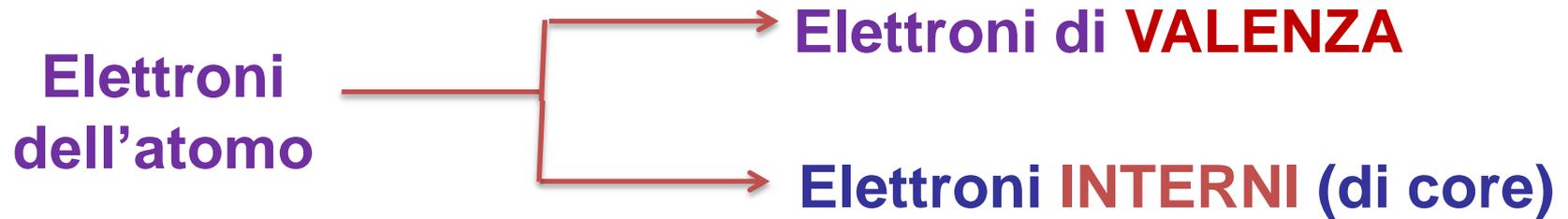


LE FORMULE DI LEWIS



LA REGOLA DELL'OTTETTO

Nella maggior parte dei composti covalenti gli elementi raggiungono la configurazione elettronica dei gas nobili (8 elettroni nel guscio più esterno)

Le strutture di Lewis **NON** danno informazioni sulla **GEOMETRIA** delle molecole!

COME SI DISEGNANO LE STRUTTURE DI LEWIS

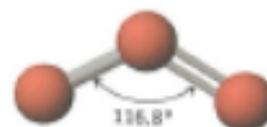
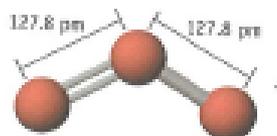
Regole per costruire le strutture di Lewis:

1. Riconoscere l'**atomo centrale** a cui sono legati gli altri atomi;
2. Trovare il **numero totale di elettroni di valenza**;
3. Si consideri ogni legame come un **legame singolo** e determinare il numero di **coppie di legame**;
4. Determinare il numero di **coppie solitarie (lone pair)**;
5. Disegnare la molecola disponendo: 1. le **coppie di legame**, 2. le **coppie solitarie** sugli **atomi terminali** per i quali è sempre soddisfatta la regola dell'ottetto;
6. Se l'atomo centrale ha **meno di 8 elettroni**, una o più coppie solitarie degli atomi terminali vengono trasformate in coppie di legame.

LA RISONANZA

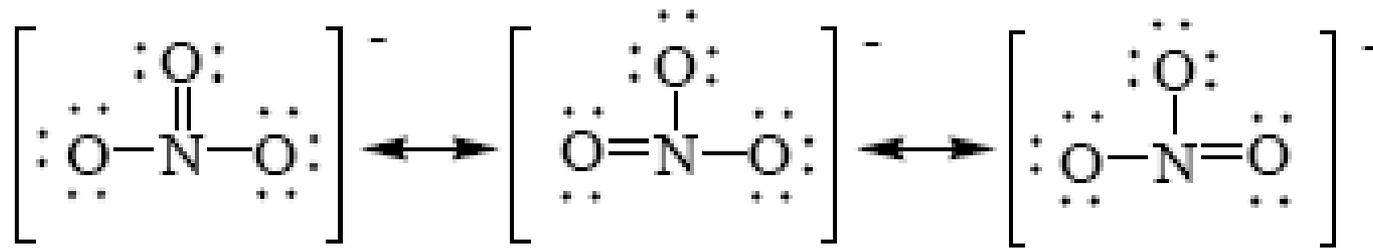
Risonanza = combinazione di strutture nelle quali gli atomi sono ugualmente collocati, mentre la disposizione degli elettroni è differente.

La molecola di O_3



LA RISONANZA

Lo ione nitrato



La freccia \leftrightarrow non indica una “reversibilità” ma che la reale struttura dello ione NO_3^- è una struttura intermedia tra le tre raffigurate. I dati sperimentali riportano che non è possibile distinguere nella struttura legami singoli e doppi ma tutti e tre i legami hanno una distanza intermedia tra il singolo e il doppio \Rightarrow gli elettroni di legame sono **delocalizzati** e l’energia del sistema si abbassa.

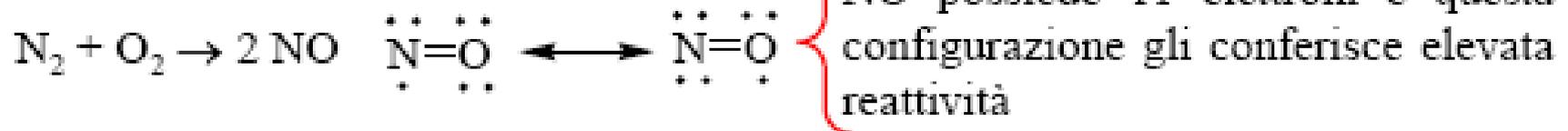
Delocalizzazione = la densità elettronica in più dovuta alla seconda coppia di e^- di un doppio legame non viene condivisa da una coppia in particolare ma si distribuisce tra più atomi

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

1. Molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni
2. Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha meno di un ottetto di elettroni di valenza
3. Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha più di un ottetto di elettroni di valenza

Molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni

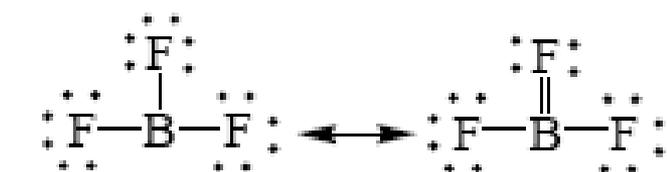
Le molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni sono denominati radicali. Per le specie radicaliche non è mai possibile raggiungere la configurazione dell'ottetto



ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha meno di un ottetto di elettroni di valenza

La maggior parte degli elementi del gruppo IIIA non raggiungono la configurazione dell'ottetto poiché posseggono solo 3 elettroni nel guscio di valenza. Formano quindi tre legami covalenti e raggiungono la configurazione elettronica di 6



struttura di
risonanza più
probabile

struttura di risonanza che prevede che per raggiungere la configurazione dell'ottetto dell'atomo di boro il fluoro, elemento molto elettronegativo, metta in compartecipazione un doppietto di elettroni. Questa forma di risonanza è quindi poco rilevante

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha più di un ottetto di elettroni di valenza

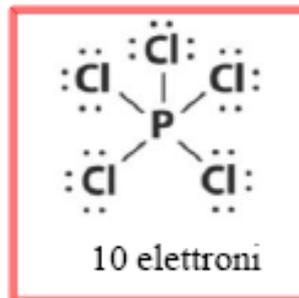
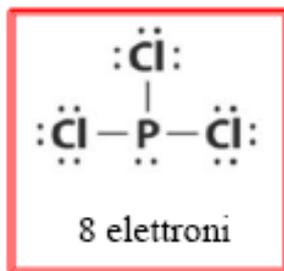


TABELLA 8.6 Strutture di Lewis di molecole in cui vi sono più di otto elettroni attorno all'atomo centrale

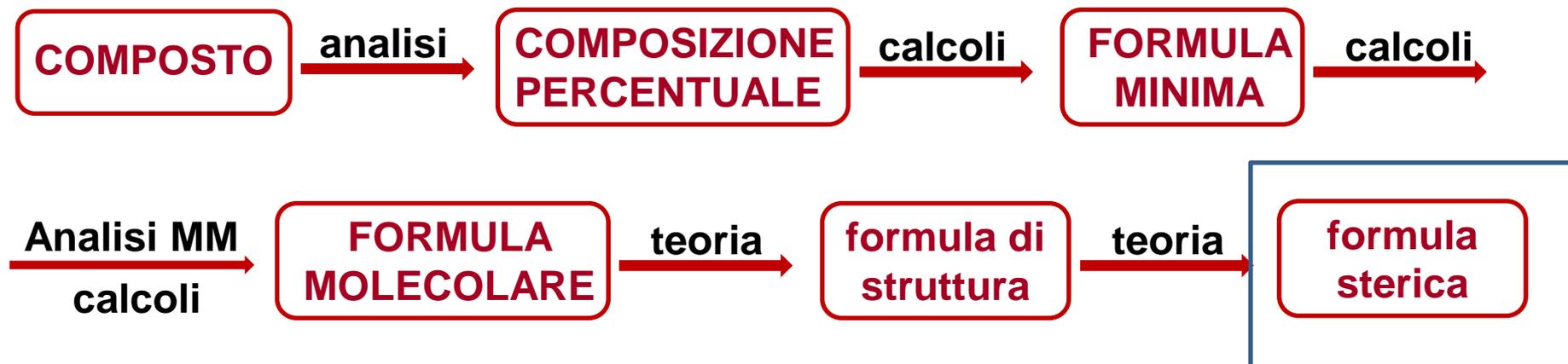
Gruppo 4A	Gruppo 5A	Gruppo 6A	Gruppo 7A	Gruppo 8
SiF_5^- 	PF_5 	SF_4 	ClF_3 	XeF_2
SiF_6^{2-} 	PF_6^- 	SF_6 	BrF_5 	XeF_4

LA MOLE E LA MASSA

Noto il peso molecolare o il peso formula del composto, conosciamo la sua massa molare e quindi possiamo convertire il numero di moli in massa o la massa in numero di moli.

$$n = \frac{m}{MM}$$

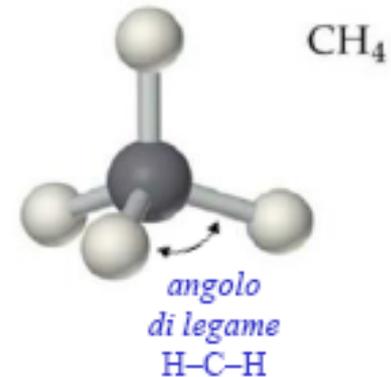
LE FORMULE DEI COMPOSTI



LA GEOMETRIA DELLE MOLECOLE

Geometria molecolare = disposizione relativa nello spazio degli atomi costituenti una molecola o un composto covalente a struttura infinita

Angoli di legame = gli angoli individuati dagli assi di due legami che hanno un atomo in comune



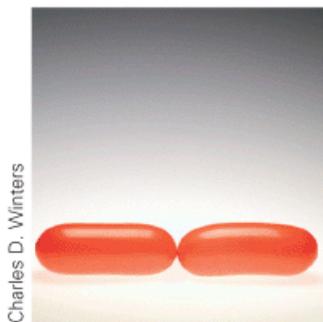
IL MODELLO VSEPR

(Valence Shell Electron Pair Repulsion)

(Repulsione delle Coppie di Elettroni del Guscio di Valenza)

Le coppie di elettroni del guscio di valenza dell'atomo centrale si respingono tra loro, pertanto nello spazio si dispongono in modo tale da essere il più lontano possibile le une dalle altre.

Esiste una sola possibile geometria che soddisfa questo requisito.



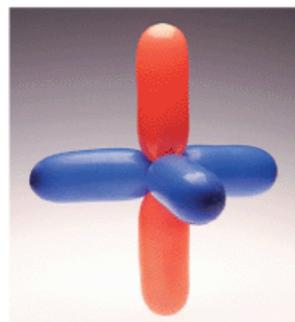
Lineare



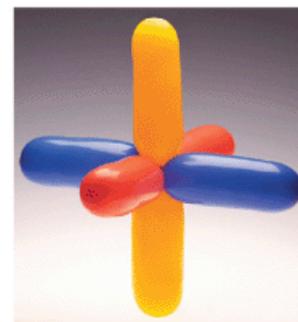
Trigonale planare



Tetraedrica



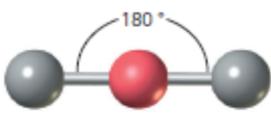
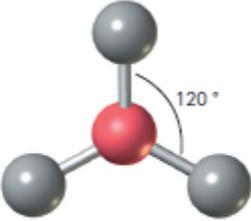
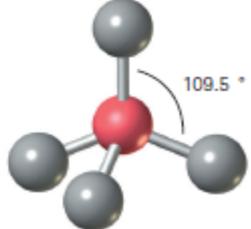
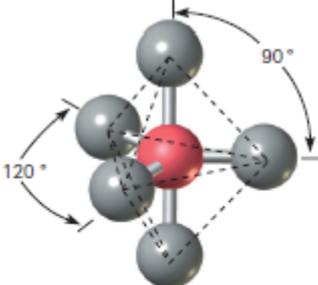
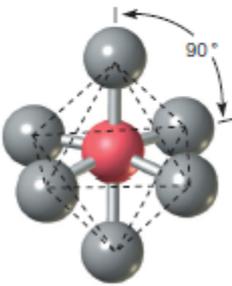
Trigonale bipiramidale



Ottaedrica

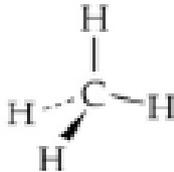
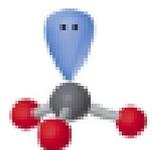
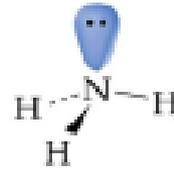
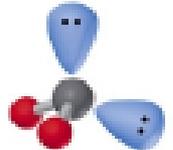
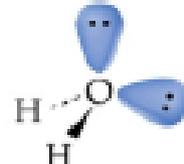
Il numero sterico = numero di doppietti elettronici di valenza presenti attorno all'atomo centrale.

**GEOMETRIE
PREVISTE DAL
MODELLO VSEPR**

NS	Tipo di specie	Orientazione delle coppie elettroniche	Angoli di legame previsti	Esempio	Modello ball and stick	Ibrid.
2	AX_2	Lineare	180°	BeF_2		sp
3	AX_3	Trigolare planare	120°	BF_3		sp^2
4	AX_4	Tetraedro	109.5°	CH_4		sp^3
5	AX_5	Bipiramide trigonale	90° 120° 180°	PF_5		sp^3d
6	AX_6	Ottaedro	90° 180°	SF_6		sp^3d^2

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

NS

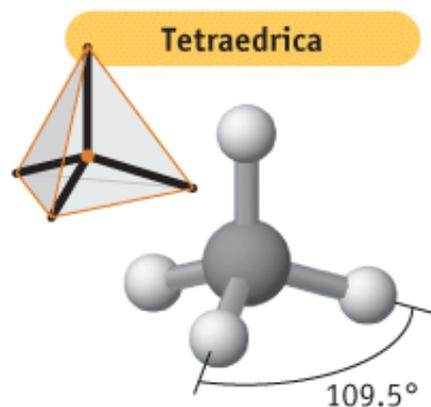
	n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
2	2	0	2 (AX ₂)	lineare (180°)		O=C=O
3	3	0	3 (AX ₃)	planare triangolare (120°)		
	2	1	3 (AX ₂ E)	piegata (< 120°)		
4	4	0	4 (AX ₄)	tetraedrica (109.5°)		
	3	1	4 (AX ₃ E)	piramidale trigonale (<109.5°)		
	2	2	4 (AX ₂ E ₂)	piegata (<109.5°)		

DISTORSIONE CAUSATA DALLE COPPIE SOLITARIE

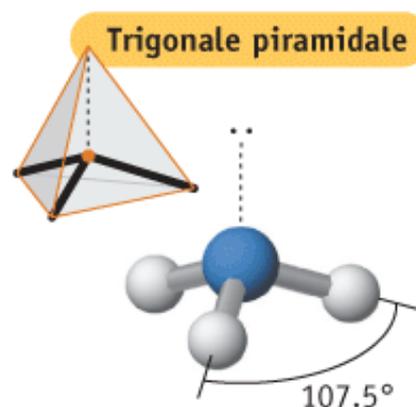
n legami	n coppie solitarie	n sfere elettroniche	geometria molecolare
4	0	4 (AX ₄)	tetraedrica (109.5°)
3	1	4 (AX ₃ E)	piramidale trigonale (<109.5°)
2	2	4 (AX ₂ E ₂)	piegata (<109.5°)

Una coppia solitaria risiede più vicino al nucleo degli elettroni di legame perché risente della forza attrattiva di un solo atomo

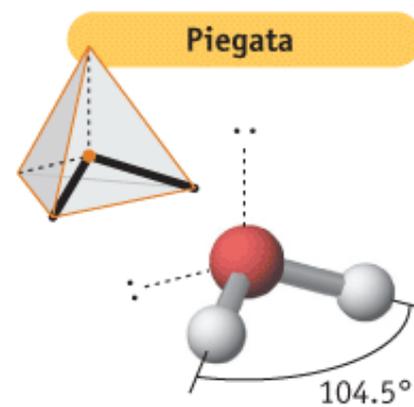
QUATTRO COPPIE ELETTRONICHE
Geometria delle coppie = tetraedrica



Metano, CH₄
4 coppie di legame
nessuna coppia solitaria



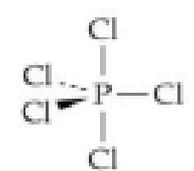
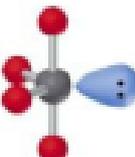
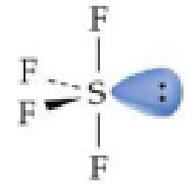
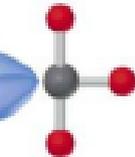
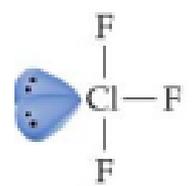
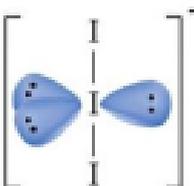
Ammoniaca, NH₃
3 coppie di legame
1 coppia solitaria



Acqua, H₂O
2 coppie di legame
2 coppie solitarie

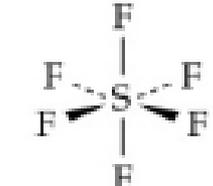
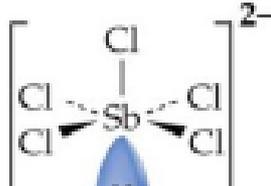
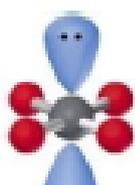
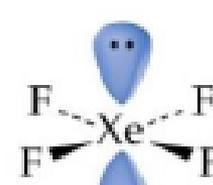
La forza repulsiva varia nell'ordine: CS-CS > CS-CL > CL-CL
CS = coppia solitaria;
CL = coppia di legame

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
5	0	5 (AX ₅)	bipiramidale triangolare (90-120-180)		
4	1	5 (AX ₄ E)	a sella (<90, <120)		
3	2	5 (AX ₃ E ₂)	a T (< 90)		
2	3	5 (AX ₂ E ₃)	lineare (180)		

Nella geometria bipiramidale trigonale una (o più) coppia solitaria in posizione equatoriale stabilizza maggiormente le struttura

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
6	0	6 (AX ₆)	ottaedrica (90°)		
5	1	6 (AX ₅ E ₁)	piramidale quadrata (90°)		
4	2	6 (AX ₄ E ₂)	planare quadrata (90°)		

Nella geometria elettronica ottaedrica, le 2 coppie solitarie si dispongono normalmente in trans (posizioni opposte). In generale le coppie solitarie distorcono la forma della molecola per diminuire la repulsione che esercitano sugli altri elettroni

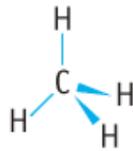
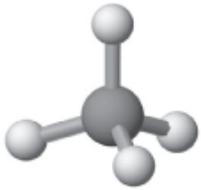
PROPRIETA' DEL LEGAME

Ordine di legame

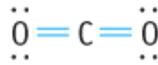
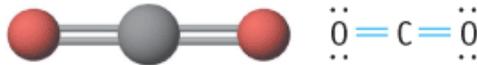
Distanza di legame

Energia di legame

ORDINE DI LEGAME



Ordine di legame
1



Ordine di legame
2



Ordine di legame
3



Ordine di legame
1.5

DISTANZA DI LEGAME

TABELLA 7-4 *Distanze di legame medie (in Å) per alcuni legami selezionati*

	Legame singolo						Legame doppio	Legame triplo
	H	C	H	O	F	S		
H	0,74	1,10	0,98	0,94	0,92	1,32		
C		1,54	1,47	1,43	1,41	1,81	C = C 1,34	C ≡ C 1,21
N			1,40	1,36	1,34	1,74	C = N 1,27	C ≡ C N 1,15
O				1,32	1,30	1,70	C = O 1,22	C ≡ O 1,13
F					1,28	1,68		
S						2,08		

ENERGIA DI LEGAME

TABELLA 7-3 *Energie di dissociazione (in kJ/mol) per alcuni legami selezionati*

	Legame singolo						Legame doppio	Legame triplo
	H	C	H	O	F	S		
H	436	413	391	463	563	347		
C		346	305	358	485	272	C = C 602	C ≡ C 835
N			163	201	283	—	C = N 615	C ≡ C N 887
O				146	190	—	C = O 732 (eccetto	C ≡ O 1072
F					155	284	in CO ₂ , per cui	
S						226	vale 799)	

DISTANZE ED ENERGIE DI LEGAME

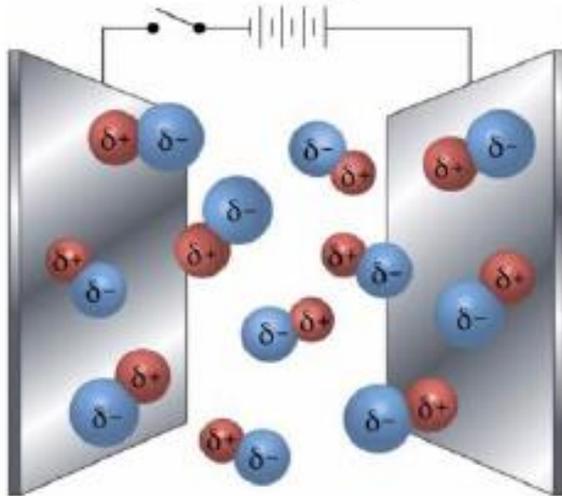
	Legame singolo	Legame doppio	Legame triplo
Distanza di legame (Å)	1.54 Å	1.34 Å	1.21 Å
Energia di legame (kJ/mol)	346	602	835

Legami più corti

Legami più forti

LA POLARITA' DELLE MOLECOLE

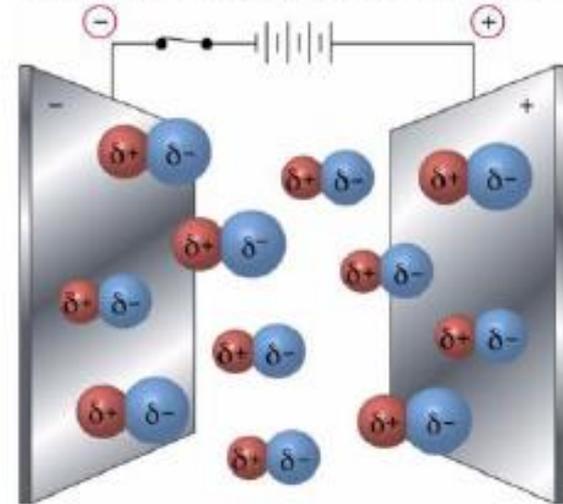
assenza di campo elettrico



(a)

le molecole polari sono orientate in maniera casuale

presenza di campo elettrico



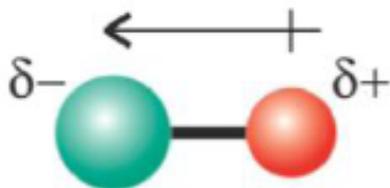
(b)

I dipoli molecolari si orientano disponendo il loro vettore $\vec{\mu}$ parallelamente a quello del campo elettrico esterno, ma con verso opposto

Dipolo elettrico = sistema costituito da due cariche puntiformi uguali e di segno opposto, $+\delta$ e $-\delta$, poste alla distanza r l'una dall'altra

Momento dipolare elettrico (momento di dipolo) μ = entità del dipolo elettrico misurabile sperimentalmente

LA POLARITA' DELLE MOLECOLE BIATOMICHE



Le molecole biatomiche **omonucleari** (stesso atomo, es. F_2 , N_2) sono sempre apolari, mentre le molecole biatomiche **eteronucleari** (atomi diversi) hanno un momento di dipolo tanto più elevato quanto maggiore è il $\Delta(EN)$ tra i due atomi.

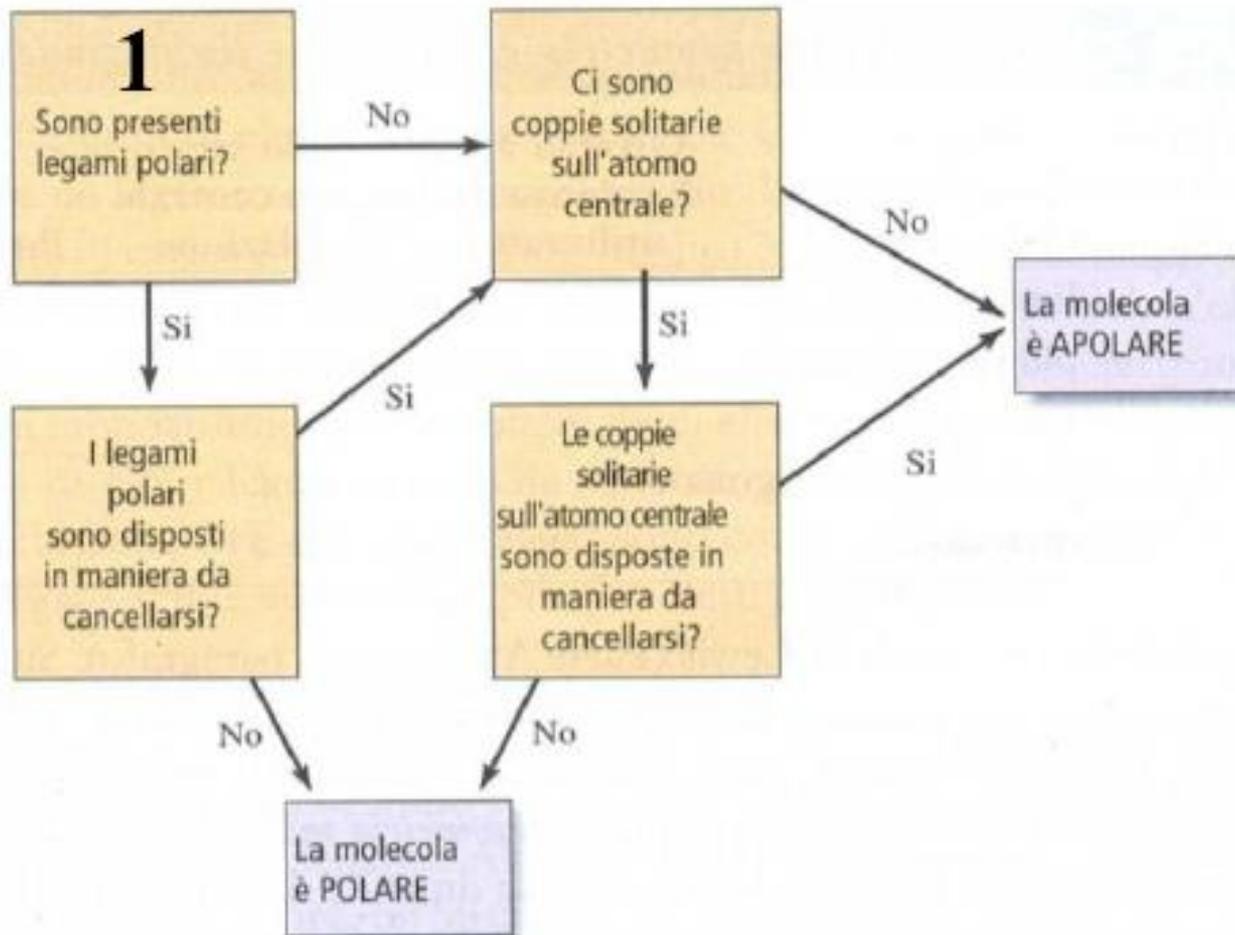
Tabella 8.7 Momenti di dipolo di alcune molecole

Molecola (AX)	Momento (μ , D)	Geometria	Molecola (AX_2)	Momento (μ , D)	Geometria
HF	1,78	Lineare	H_2O	1,85	Piegata
HCl	1,07	Lineare	H_2S	0,95	Piegata
HBr	0,79	Lineare	SO_2	1,62	Piegata
HI	0,38	Lineare	CO_2	0	Lineare
H_2	0	Lineare			
Molecola (AX_3)	Momento (μ , D)	Geometria	Molecola (AX_4)	Momento (μ , D)	Geometria
NH_3	1,47	Trigonale piramidale	CH_4	0	Tetraedrica
PH_3	0,23	Trigonale piramidale	CH_2Cl_2	1,02	Tetraedrica
BF_3	0	Trigonale planare	CH_3Cl	1,68	Tetraedrica
			$CHCl_3$	1,04	Tetraedrica
			CCl_4	0	Tetraedrica

LA POLARITA' DELLE MOLECOLE POLIATOMICHE

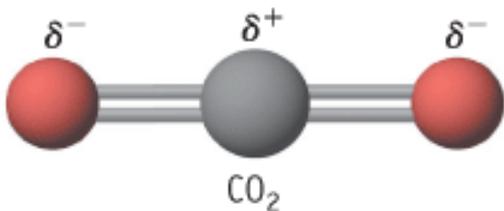
molecola
polare

- c'è almeno un legame polare o una coppia solitaria sull'atomo centrale
- i legami polari non sono disposti in modo da cancellare le loro polarità
- le coppie solitarie sull'atomo centrale non sono disposte in modo da cancellare le loro polarità

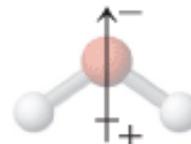
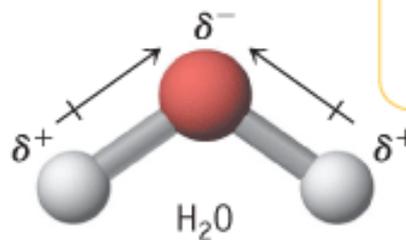


LA POLARITA' DELLE MOLECOLE POLIATOMICHE

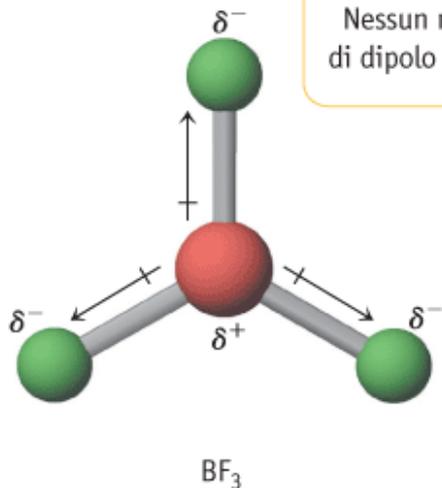
Nessun momento di dipolo risultante



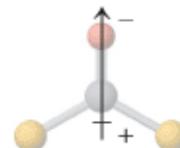
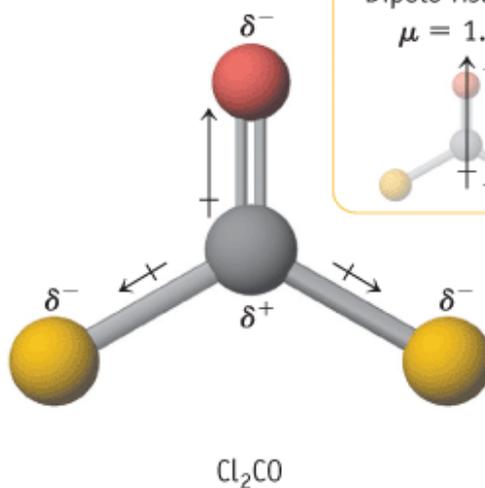
Dipolo risultante
 $\mu = 1.85D$



Nessun momento di dipolo risultante



Dipolo risultante
 $\mu = 1.17D$



Dipolo risultante
 $\mu = 1.47D$

