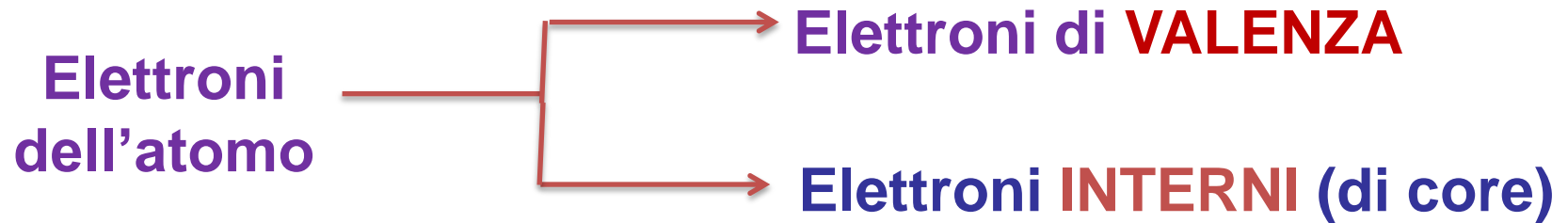


## LE FORMULE DI LEWIS



## 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

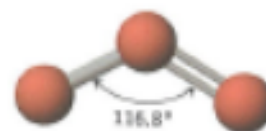
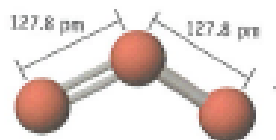
Regole per costruire le strutture di Lewis:

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

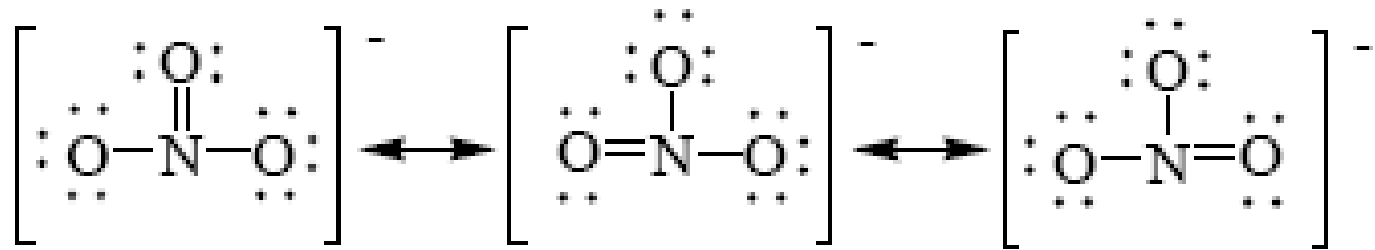
Risonanza = combinazione di strutture nelle quali gli atomi sono ugualmente collocati, mentre la disposizione degli elettroni è differente.

## La molecola di $O_3$



# LA RISONANZA

## Lo ione nitrato



La freccia  $\leftrightarrow$  non indica una “reversibilità” ma che la reale struttura dello ione  $\text{NO}_3^-$  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

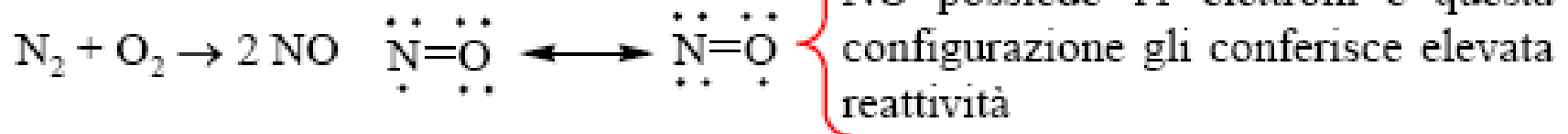
## ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

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

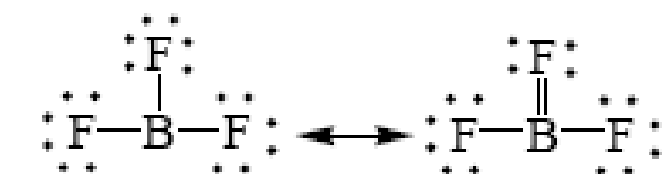
Le molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni sono denominati radicali. Per le specie radicaliche non è mai possibile raggiungere la configurazione dell'ottetto



## 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

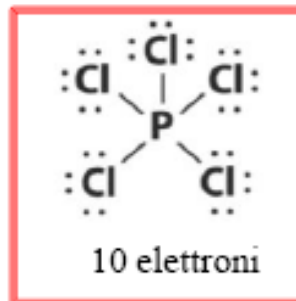
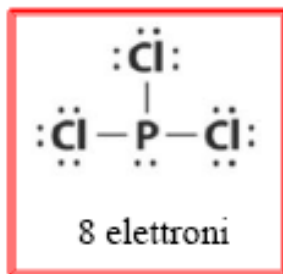


struttura di  
risonanza più  
probabile

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
$\text{SiF}_5^-$ 	$\text{PF}_5$ 	$\text{SF}_4$ 	$\text{ClF}_3$ 	$\text{XeF}_2$ 
$\text{SiF}_6^{2-}$ 	$\text{PF}_6^-$ 	$\text{SF}_6$ 	$\text{BrF}_5$ 	$\text{XeF}_4$ 

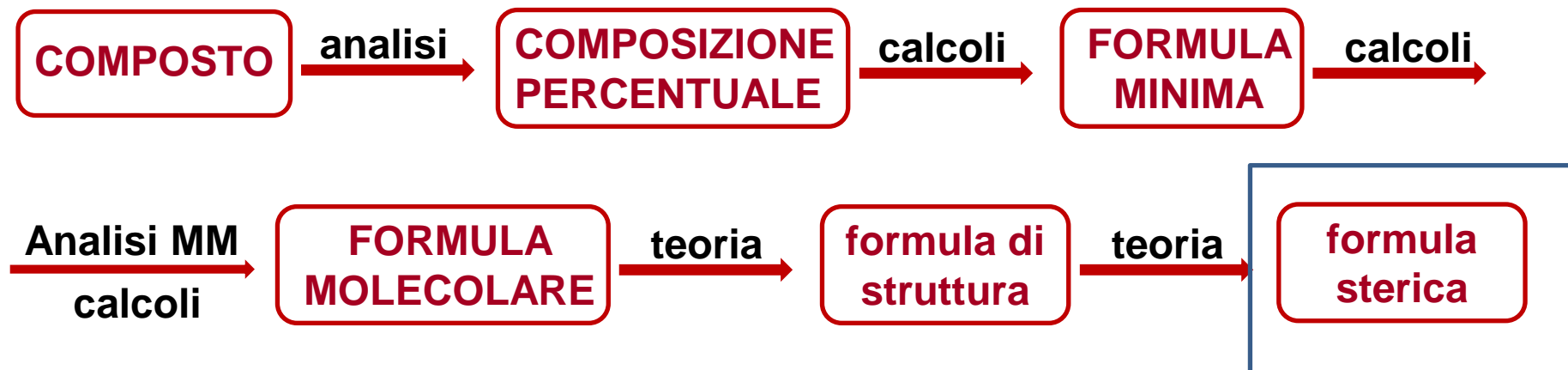
# LA MOLE E LA MASSA

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

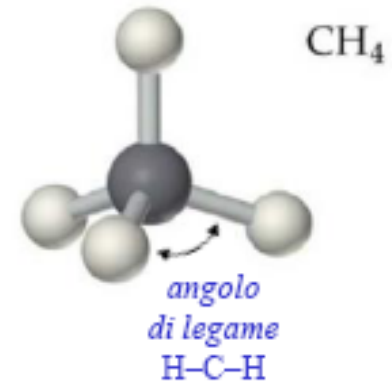




# LA GEOMETRIA DELLE MOLECOLE

**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



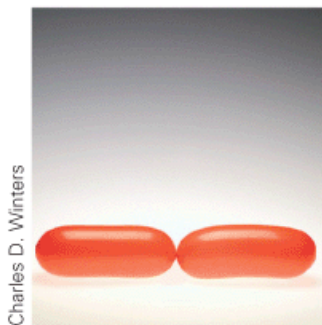
# IL MODELLO VSEPR

## (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.



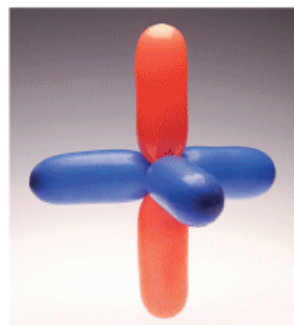
Lineare



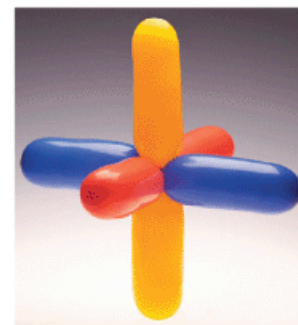
Trigonale planare



Tetraedrica



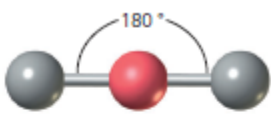
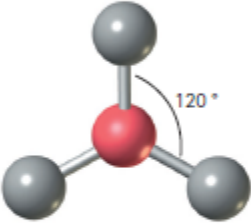
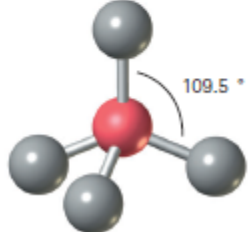
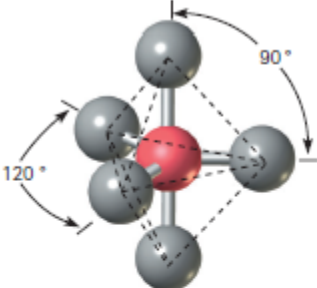
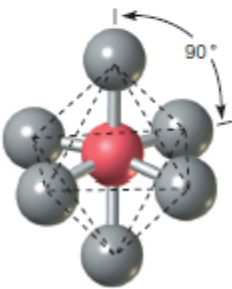
Trigonale bipiramidale



Ottaedrica


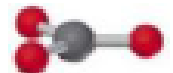



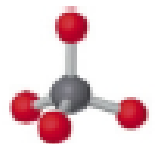
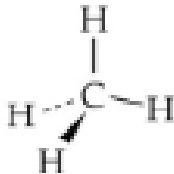
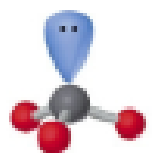
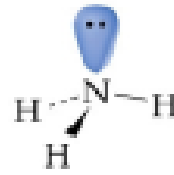
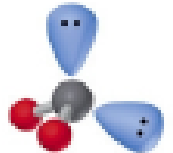
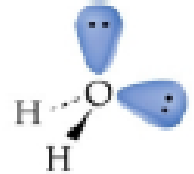
**Il numero sterico** = numero di doppietti elettronici di valenza presenti attorno all'atomo centrale.

**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	$180^\circ$	$BeF_2$		$sp$
3	$AX_3$	Trigolare planare	$120^\circ$	$BF_3$		$sp^2$
4	$AX_4$	Tetraedro	$109.5^\circ$	$CH_4$		$sp^3$
5	$AX_5$	Bipiramide trigonale	$90^\circ$ $120^\circ$ $180^\circ$	$PF_5$		$sp^3d$
6	$AX_6$	Ottaedro	$90^\circ$ $180^\circ$	$SF_6$		$sp^3d^2$

# GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

NS

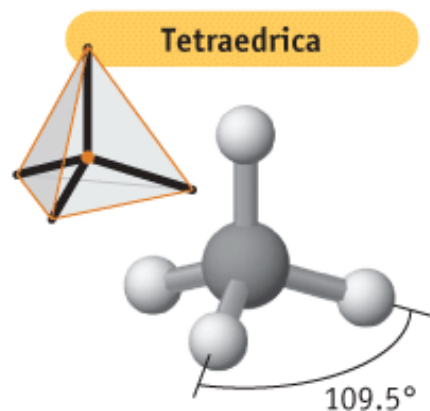
	n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
2	2	0	2 (AX <sub>2</sub> )	lineare (180°)		O=C=O
3	3	0	3 (AX <sub>3</sub> )	planare triangolare (120°)		
	2	1	3 (AX <sub>2</sub> E)	piegata (< 120°)		
4	4	0	4 (AX <sub>4</sub> )	tetraedrica (109.5°)		
	3	1	4 (AX <sub>3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

## DISTORSIONE CAUSATA DALLE COPPIE SOLITARIE

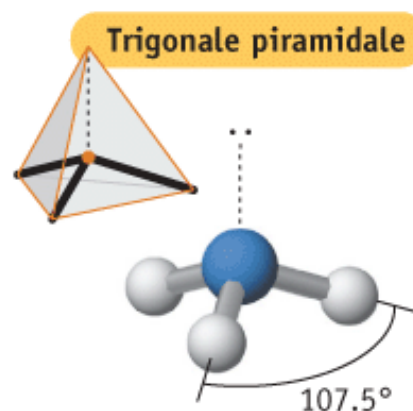
n legami	n coppie solitarie	n sfere elettroniche	geometria molecolare
4	0	4 (AX <sub>4</sub> )	tetraedrica (109.5°)
3	1	4 (AX <sub>3</sub> E)	piramidale trigonale (<109.5°)
2	2	4 (AX <sub>2</sub> E <sub>2</sub> )	piegata (<109.5°)

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

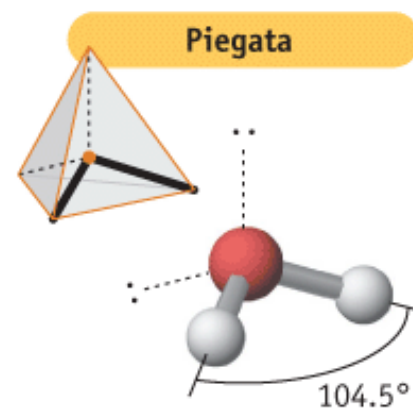
QUATTRO COPPIE ELETTRONICHE  
Geometria delle coppie = tetraedrica



**Metano, CH<sub>4</sub>**  
4 coppie di legame  
nessuna coppia solitaria




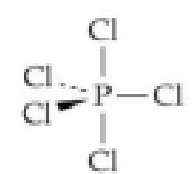
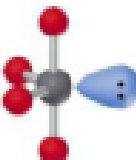
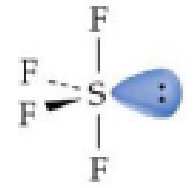
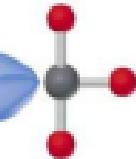
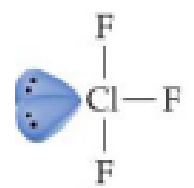
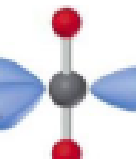
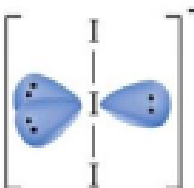
**Ammoniaca, NH<sub>3</sub>**  
3 coppie di legame  
1 coppia solitaria



**Acqua, H<sub>2</sub>O**  
2 coppie di legame  
2 coppie solitarie

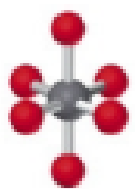
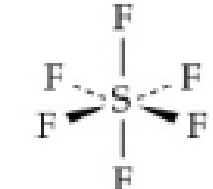
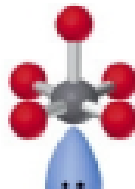
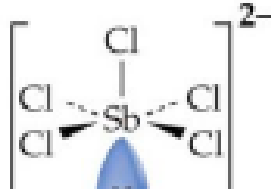
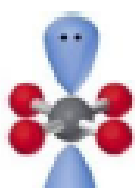
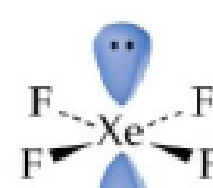
La forza repulsiva varia nell'ordine: CS-CS > CS-CL > CL-CL  
CS = coppia solitaria;  
CL = coppia di legame

# GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
5	0	5 (AX <sub>5</sub> )	bipiramidale triangolare (90-120-180 )		
4	1	5 (AX <sub>4</sub> E)	a sella (<90, <120 )		
3	2	5 (AX <sub>3</sub> E <sub>2</sub> )	a T (< 90 )		
2	3	5 (AX <sub>2</sub> E <sub>3</sub> )	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 <sub>6</sub> )	ottaedrica (90°)		
5	1	6 (AX <sub>5</sub> E <sub>1</sub> )	piramidale quadrata (90°)		
4	2	6 (AX <sub>4</sub> E <sub>2</sub> )	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*

# LA GEOMETRIA DELLE MOLECOLE

<https://www.youtube.com/watch?v=gOvfzoeJrkQ>



# PROPRIETA' DEL LEGAME

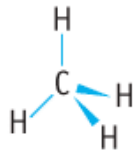
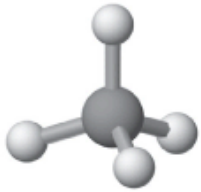
**Ordine di legame**

**Distanza di legame**

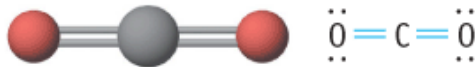
**Energia di legame**

---

## ORDINE DI LEGAME



**Ordine di legame**  
**1**



**Ordine di legame**  
**2**



**Ordine di legame**  
**3**



**Ordine di legame**  
**1.5**

## 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

## 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 <sub>2</sub> , per cui	
S						226	vale 799)	