

## Esercitazione n.5

### -STRUTTURE DI LEWIS

### SIMBOLI DI LEWIS

**ELETTRONI DI VALENZA:** sono gli elettroni del guscio esterno, i responsabili principali delle proprietà chimiche di un atomo e quindi della natura dei legami chimici che vengono a stabilirsi fra esso ed altri atomi.

Si usa rappresentare convenzionalmente gli atomi in modo da evidenziare soltanto la loro configurazione elettronica esterna, trascurando quella dei livelli interni completi.

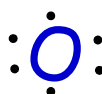
esempio: atomo di bromo, **Br** (Z=35)  
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$   
 $[Ar] 4s^2 4p^5$



esempio: atomo di sodio, **Na** (Z=11)  
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$   
 $[Ne] 3s^1$



esempio: atomo di ossigeno, **O** (Z=8)  
 $1s^2 2s^2 2p^4$   
 $[He] 2s^2 2p^4$



**Simboli di Lewis**

|         | 1A(1) 2A(2)     |                 |                                 |                                 |                                 |                                 |                                 |                                 |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
|         | ns <sup>1</sup> | ns <sup>2</sup> | 3A(13)                          | 4A(14)                          | 5A(15)                          | 6A(16)                          | 7A(17)                          | 8A(18)                          |
| Periodo |                 |                 | ns <sup>2</sup> np <sup>1</sup> | ns <sup>2</sup> np <sup>2</sup> | ns <sup>2</sup> np <sup>3</sup> | ns <sup>2</sup> np <sup>4</sup> | ns <sup>2</sup> np <sup>5</sup> | ns <sup>2</sup> np <sup>6</sup> |
|         | 2               | • Li •          | • B •                           | • C •                           | • N •                           | • O •                           | • F •                           | • Ne •                          |
| 3       | • Na •          | • Mg •          | • Al •                          | • Si •                          | • P •                           | • S •                           | • Cl •                          | • Ar •                          |

Il simbolo dell'elemento rappresenta il nucleo (e gli elettroni interni), i puntini attorno al simbolo rappresentano gli elettroni di valenza

NB.1 Da notare il numero del gruppo (A) (1A-8A) dice il numero di elettroni di valenza.

NB.2 Si deve collocare un puntino per volta sui quattro lati (superiore, destro, inferiore e sinistro) del simbolo dell'elemento.

NB.3 Si deve appaiare i puntini fino a che non sono stati utilizzati tutti.

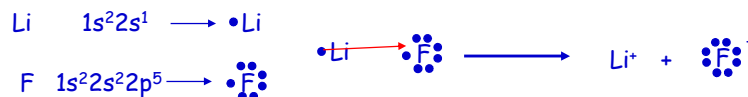
**REGOLA DELL'OTTETTO:**

Quando gli atomi si legano, cedono, acquistano o condividono elettroni per raggiungere un livello esterno pieno di otto (o due) elettroni.

**LEGAME IONICO:**

È il trasferimento di elettroni da un metallo ad un non metallo per formare ioni che si uniscono in un composto ionico solido.

In tutti i casi di legame ionico: il numero totale di elettroni ceduti dagli atomi metallici è uguale al numero totale di elettroni acquistati dagli atomi non metallici.



Ma la condivisione di elettroni è senza dubbio il modo principale in cui gli atomi interagiscono chimicamente. **LEGAME COVALENTE**

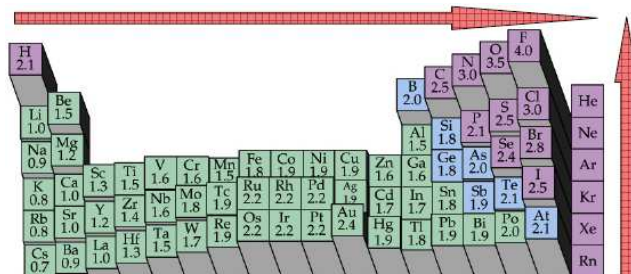
In corrispondenza di una certa distanza internucleare, a fronte della crescente repulsione viene raggiunta l'attrazione massima e il sistema ha l'energia potenziale minima.

In un legame covalente, ciascun atomo conta gli elettroni condivisi come appartenenti completamente a se stesso.



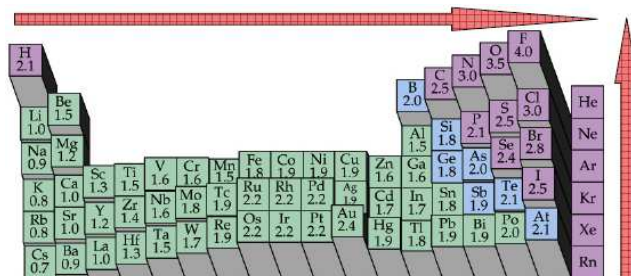
### ELETTRONEGATIVITA'

$\chi$ , chi: è la capacità relativa di un atomo legato di attrarre gli elettroni condivisi.



Elettronegatività inversa al raggio atomico: infatti il nucleo di un atomo più piccolo è più vicino alla coppia condivisa di quanto sia quello di un atomo più grande e quindi attrae più fortemente gli elettroni di legame.

| $\Delta EN$ | CARATTERE IONICO        |
|-------------|-------------------------|
| $>1,7$      | In prevalenza ionico    |
| $0,4-1,7$   | Covalente polare        |
| $<0,4$      | In prevalenza covalente |
| 0           | Covalente apolare       |



### ESERCIZIO 1:

Per ciascun composto seguente dire se è in prevalenza ionico, covalente polare, in prevalenza covalente o covalente apolare :

NaCl

KBr

$Cl_2$

HCl

### STRUTTURE di LEWIS o FORMULE di LEWIS

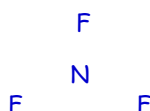
Mostrano come gli atomi sono legati l'uno all'altro all'interno di una molecola (ma non rivela la forma complessiva).

Sono costituite da simboli di Lewis che rappresentano ciascun atomo e gli atomi vicini, le coppie di legame che li tengono uniti e le coppie solitarie che riempiono il guscio esterno di ciascun atomo.

#### Strutture di Lewis per molecole con legami singoli

**ESEMPIO:** Scrivere la struttura di Lewis di una molecola (esempio  $\text{NF}_3$ )

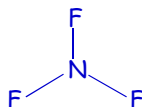
1. Scrivere lo scheletro della struttura molecolare (di solito si mette al centro l'atomo meno elettronegativo)



2. Si determina il numero totale di elettroni di valenza disponibili

$$[1 \times \text{N} (5 e^-)] + [3 \times \text{F} (7 e^-)] = 5 e^- + 21 e^- = 26 e^-$$

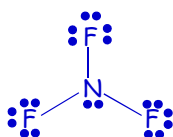
3. Si disegnano i legami singoli da ciascun atomo circostante a quello centrale e si sottraggono due elettroni di valenza per ciascun legame.



$$3 \text{ legami N-F} \times 2 e^- = 6 e^-$$

$$\text{Da cui } 26 e^- - 6 e^- = 20 e^- \text{ restanti}$$

4. Si distribuiscono gli elettroni restanti in coppie in modo che ogni atomo ottenga otto elettroni (o due nel caso di H).



**Ricorda:**

- Gli atomi centrali sono di solito quelli meno elettronegativi o con minore energia di ionizzazione.
- Gli atomi di idrogeno sono sempre terminali.
- Gli atomi di carbonio sono sempre centrali.
- Molecole e ioni poliatomici hanno in genere strutture simmetriche e compatte.

**ESERCIZIO 1:**

Si scrivano le strutture di Lewis per:

- a)  $\text{H}_2\text{S}$
- b)  $\text{OF}_2$
- c)  $\text{CH}_4\text{O}$  (metanolo)

**ESERCIZIO 2:** Disegnare lo scheletro della struttura delle seguenti molecole

a.  $\text{CH}_4$

b.  $\text{CH}_3\text{Cl}$

**ESERCIZIO 3:** si scriva la struttura di Lewis per l'idrossilammina  $\text{NH}_2\text{OH}$

**ESERCIZIO 4:** si scriva la struttura di Lewis per l'ammoniaca  $\text{NH}_3$

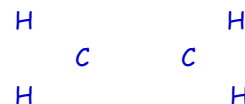
**ESERCIZIO 5:** si scriva la struttura di Lewis per  $\text{NCl}_3$

### Strutture di Lewis per molecole con legami multipli: LEGAMI DOPPI

esempio: molecola  $\text{C}_2\text{H}_4$  (etilene)

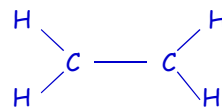
$\text{C} [\text{He}] 2s^2 2p^2$

$\text{H } 1s^1$



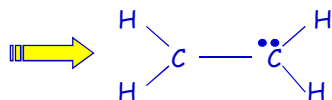
$$\text{Totale } e^- = [2 \times \text{C } (4e^-)] + [4 \times \text{H } (1e^-)] = 8e^- + 4e^- = 12e^-$$

Metto i possibili legami singoli



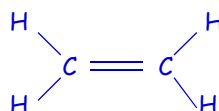
Quindi ho 5 legami per un totale di  $10e^-$

$$12e^- - 10e^- = 2e^- \text{ restanti}$$



L'atomo di C a dx ha l'ottetto completo **ma** C a sx ha 6e- quindi per completare l'ottetto si converte la coppia solitaria in un'altra coppia di legame tra i due C

E si ottiene...



**ESERCIZIO 6:** molecola  $\text{H}_2\text{CO}$  (formaldeide)

GLI ATOMI GENERALMENTE CHE FORMANO LEGAMI DOPPI E TRIPLI SONO C,N,O,P,S

Scrivere la struttura di Lewis per:

a)  $\text{CO}_2$

b)  $\text{COCl}_2$

c)  $\text{HClO}$

d)  $\text{NaOH}$

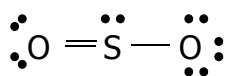
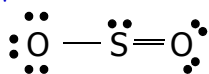
e)  $\text{H}_2\text{O}$

f)  $\text{Na}_2\text{O}$

### TEORIA della RISONANZA

Le proprietà manifestate da una specie chimica (molecola o ione) non sempre possono essere spiegate in base ad una sola formula di struttura. Alcune proprietà sono in accordo con una certa formula di struttura, altre con una formula di struttura diversa.

**ESEMPIO:** per il diossido di zolfo ( $\text{SO}_2$ ) sono ammesse due strutture equivalenti:



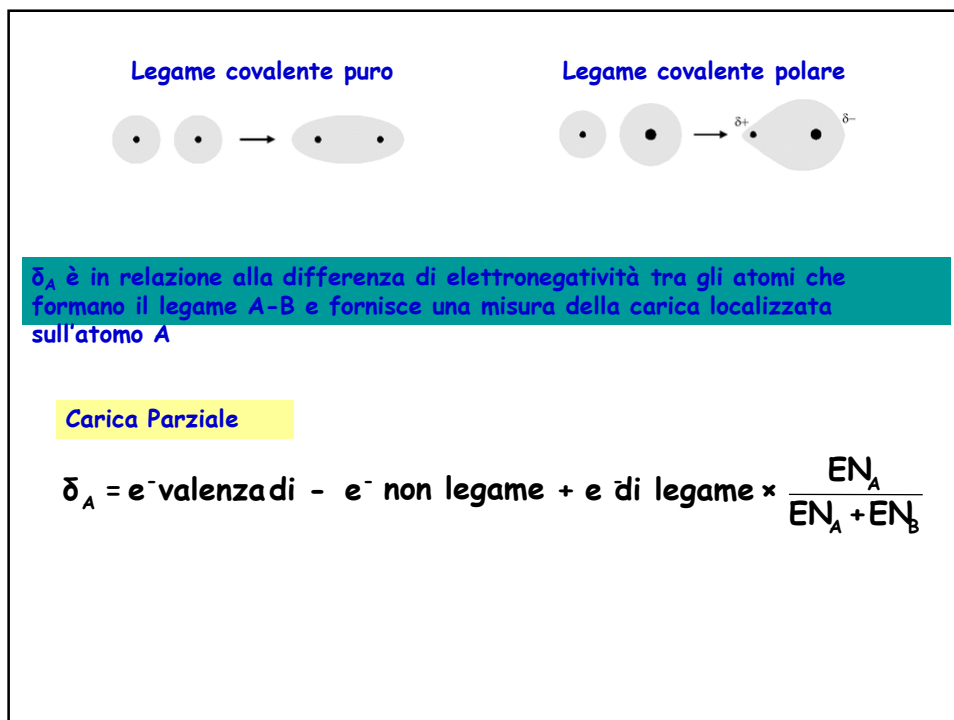
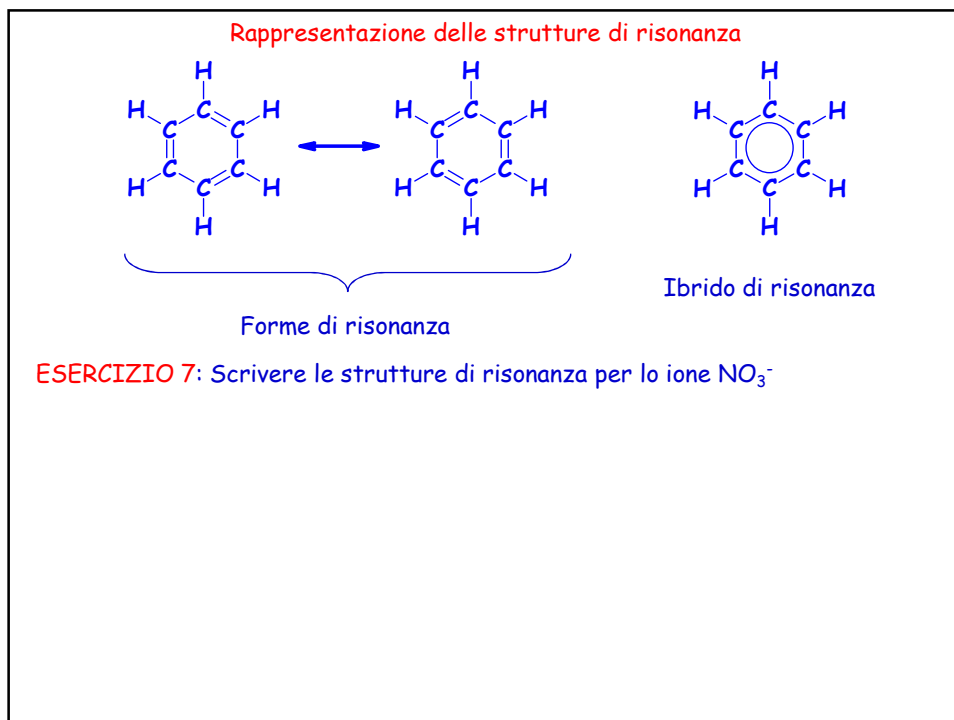
La lunghezza del legame doppio è minore della lunghezza del legame singolo fra gli stessi elementi.

Sperimentalmente le lunghezze di legame\* tra gli atomi di ossigeno risultano essere identiche (1,278 Å).



La molecola è un ibrido di risonanza fra le due strutture di Lewis.

\*LA LUNGHEZZA DI LEGAME E' LA DISTANZA FRA DUE NUCLEI DI ATOMI LEGATI



**ESERCIZIO 1**

Calcolare la carica parziale dell'atomo di fluoro nelle seguenti molecole:

(a) HF



$$V=7; N=6; B=2$$

$$EN_F=4,00$$

$$EN_H=1,00$$

(b) F<sub>2</sub>

$$V=7; N=6; B=2$$

$$EN_F=4,00$$

[R: 0.6 covalente  
polare]

[R: 0 covalente apolare]

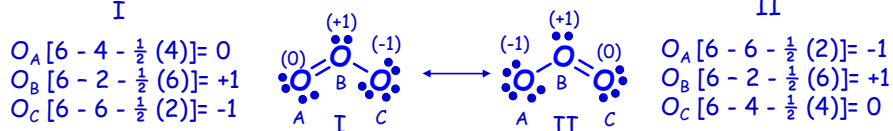
**Carica Formale**

$$\text{Car. form. di A} = e^- \text{valenza di A} - \left( e^- \text{non legame A} + e^- \text{legame A} \cdot \frac{1}{2} \right)$$

Quando sono possibili più strutture di Lewis la **carica formale** è utile per stabilire quale fra queste strutture meglio rappresenta i legami della molecolaLa carica formale di un atomo è data dal numero totale dei suoi elettroni di valenza **meno** il numero di elettroni di valenza che esso "possiede" nella molecola: esso possiede **tutti** i suoi elettroni di valenza non condivisi **più la metà** dei suoi elettroni di valenza condivisi.**ESEMPIO:** O<sub>3</sub>

La carica formale dell'ossigeno A nella forma di risonanza I è:

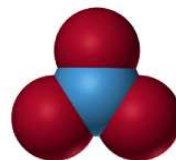
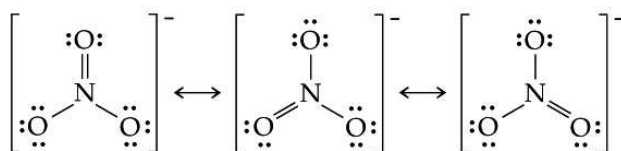
$$6e^- \text{ di valenza} - (4e^- \text{ non legame} + \frac{1}{2} \text{ di } 4e^- \text{ di legame}) = 6 - 4 - 2 = 0$$



Le forme I e II sono simmetriche- ciascuno con le stesse cariche formali ma su atomi differenti

NB: la somma delle cariche formali deve essere uguale alla carica effettiva sulla specie: zero nel caso di una molecola (come in questo caso) e la carica ionica nel caso di uno ione.

ione nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ):



La vera formula molecolare è intermedia fra le formule limite possibili.  
Le formule limite hanno uguale disposizione spaziale degli atomi

La formula limite con minore separazione di carica formale è quella a minore energia, è cioè la più stabile e contribuisce di più alla descrizione della formula vera del composto

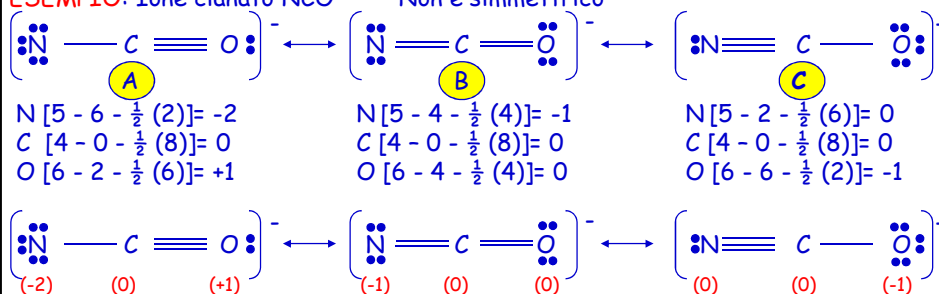
**Importante** ricordare che:

Le cariche formali più piccole (siano esse positive o negative) sono preferibili a quelle grandi.

Non sono desiderabili cariche simili su atomi adiacenti

Una carica formale più negativa dovrebbe risiedere su un atomo più elettronegativo.

**ESEMPIO:** Ione cianato  $\text{NCO}^-$  Non è simmetrico



Eliminano la forma A perché ha cariche formali più grandi delle altre in valore assoluto e una carica positiva su O (atomo più elettronegativo).

Le forme B e C hanno cariche formali dello stesso valore, ma la forma C ha una carica -1 su O (+ en) di N. Perciò B e C danno notevoli contributi all'ibrido di risonanza dello ione cianato, con C più importante.

**ESERCIZIO 8**

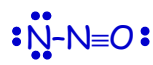
Quale è la migliore rappresentazione di Lewis per l'ossido di diazoto ( $\text{N}_2\text{O}$ ) ?



A



B



C

[ R: A]

Scrivere quale è la migliore rappresentazione di Lewis per:

