

STRUTTURE DI LEWIS

Regole empiriche

- $N - A = S$
- Si pone almeno una coppia di e^- tra l'atomo centrale e ciascuno degli atomi a cui è legato
- Si distribuiscono le coppie di e^- rimanenti in modo da completare l'ottetto per ogni atomo aggiungendo doppietti isolati o legami multipli (solo C, N, O, P, S). Gli elementi dal terzo periodo in poi, possono circondarsi di più di 8 e^-
- H è sempre terminale ed è legato ad uno solo degli altri atomi
- Per molecole con n° dispari di e^- si cerca di avvicinarsi il più possibile all'ottetto

Acido Cianidrico

ESEMPIO

HCN

$$N = 2 + 8 + 8 = 18$$

$$A = 1 + 4 + 5 = 10$$

$$S = 8 \rightarrow 4 \text{ legami covalenti}$$



Carica Formale

Carica formale su un atomo data dalla differenza tra il numero di elettroni dell'atomo libero e quello attribuitogli formalmente in una formula di struttura. Gli elettroni di legame vengono assegnati formalmente uno a ciascun atomo.

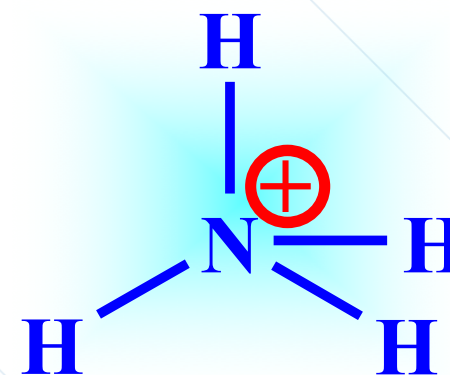
La somma delle cariche formali sui singoli atomi deve essere uguale a zero per le molecole neutre oppure, nel caso di ioni, uguale alla carica dello ione

CARICHE FORMALI

Ione ammonio



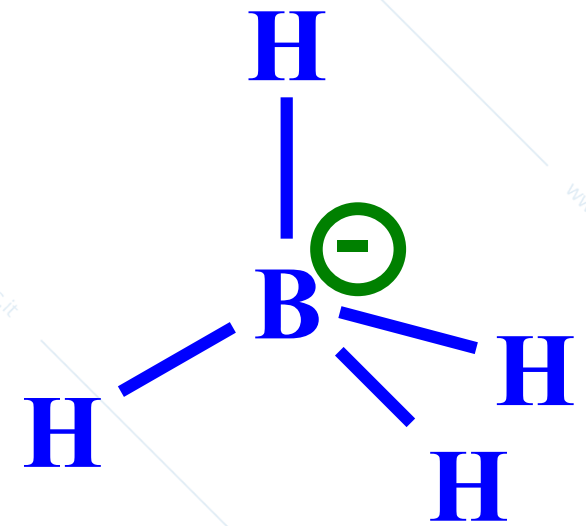
- N ha 5 e⁻ di partenza e forma 4 legami, quindi ha una carica formale +1



Ione boroidruro



- B ha 3 e^- di partenza e forma 4 legami, quindi ha una carica formale -1



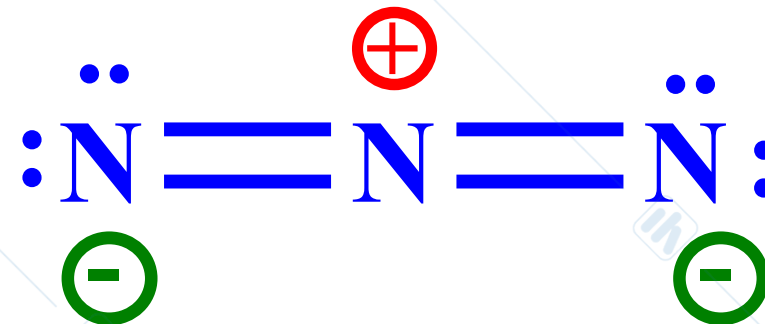
Ione azoturo



$$\text{N} = 24$$

$$\text{A} = 16$$

$$\text{S} = 8$$



Ione solfito

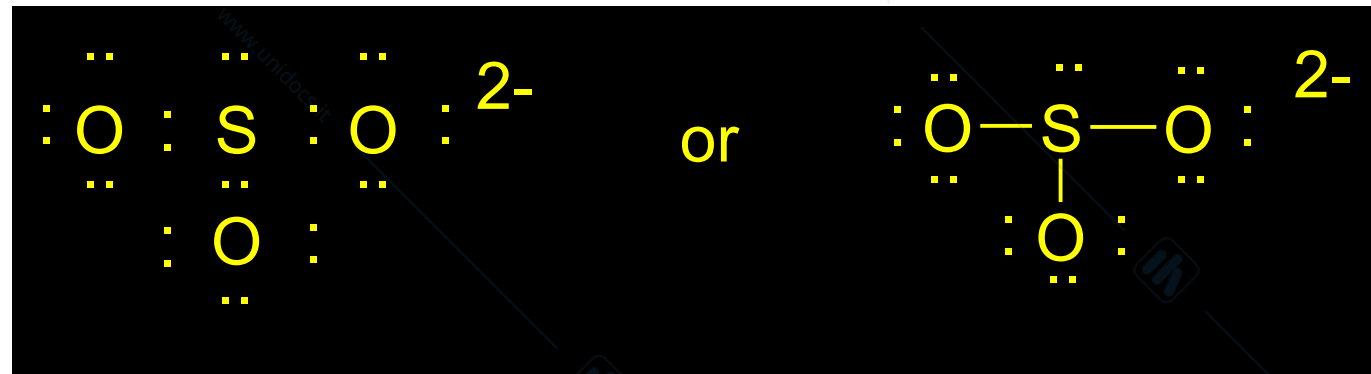
ESEMPIO



$$N = 8 + 3(8) = 32$$

$$A = 6 + 3(6) + 2 = 26$$

$$S = 6 \rightarrow 3 \text{ legami}$$

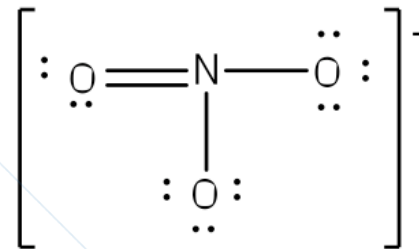


Risonanza

- Vi sono molecole le cui proprietà non sono ben spiegate da *una singola* struttura di Lewis che tenga conto cioè delle proprietà osservate (contenuto energetico, lunghezza dei legami, comportamento chimico, etc.)
- Si è allora costretti a sostituire a una singola formula un *insieme di formule* di Lewis.
- Questo processo mentale di mediazione tra più strutture si chiama **RISONANZA**.

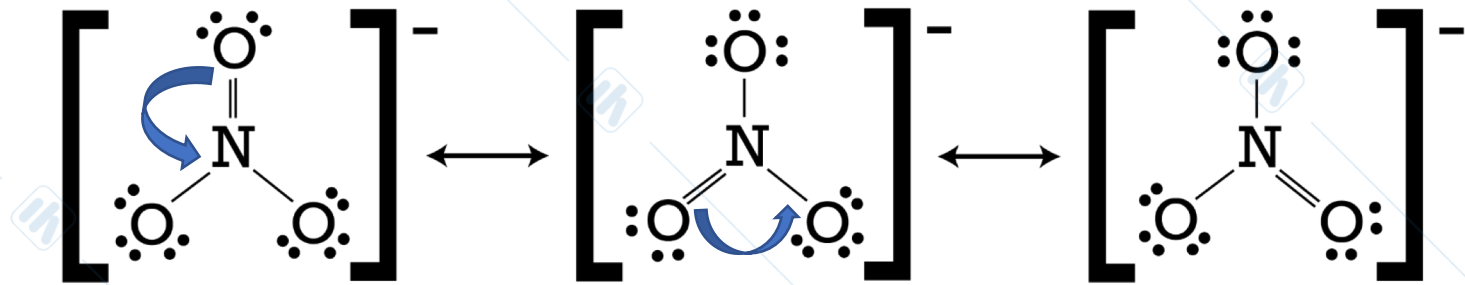
Risonanza

Ione nitrato: NO_3^-



La struttura di Lewis prevede che N forma legami singoli con due atomi di ossigeno e un legame doppio con un terzo atomo di ossigeno. Legami singoli e doppi hanno energie e distanze diverse, quindi nella molecola dovrei trovare due tipi di legami e due distanze diverse dalla terza

Ione Nitrato

$$\text{NO}_3^-$$


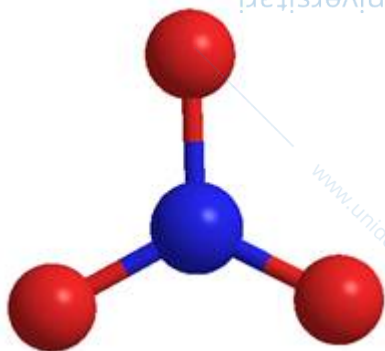
Risonanza: la vera formula molecolare è intermedia fra le formule limite possibili. Le formule limite hanno uguale disposizione spaziale degli atomi, ma diversa localizzazione del legame π . Ovvero atomi uguali hanno un ordine di legame diverso. Ciò NON corrisponde alla realtà fisica, che si può misurare sperimentalmente

Risonanza

- In realtà lo ione nitrato è caratterizzato da 3 legami N-O IDENTICI tra loro e da 3 distanze di legame N-O uguali tra loro.
- Una sola formula di Lewis non può illustrare la realtà fisica di questa molecola, e dobbiamo ricorrere alle formule limite

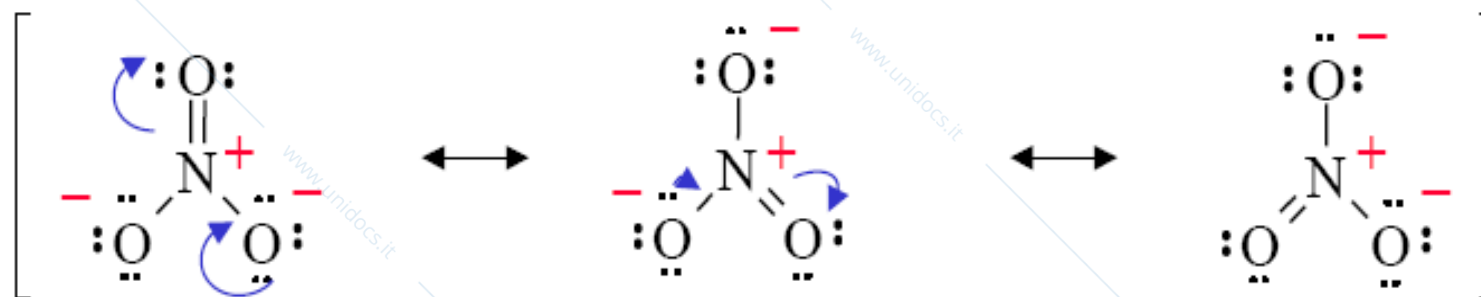
Risonanza

- Le forme di risonanza o *forme contributive* si differenziano solo per la **posizione degli elettroni**.
- Solo gli elettroni (lone pairs o π) possono muoversi.
- I nuclei e gli angoli di legame restano gli stessi.
- La risonanza genera una *delocalizzazione* di carica elettrica.



Ogni ossigeno possiede 1/3 di carica negativa

- Possiamo immaginare che gli elettroni si muovano *in coppia* per convertire una forma di risonanza in un'altra.



- Il movimento di *due* elettroni viene indicato con **freccie ricurve** a *doppia* punta.

Ibrido di risonanza

Si parla di ibrido di risonanza quando nessuna formula di Lewis rappresenta la struttura reale della molecola che invece può essere vista come un ibrido tra le varie forme limite