

# Chimica per il liceo/Strutture di Lewis e di risonanza

Wikibooks, manuali e libri di testo liberi.

< Chimica per il liceo

## Le strutture di Lewis

In questa sezione esploreremo il metodo tipico per rappresentare gli elettroni del guscio di valenza e i legami chimici, vale a dire i simboli di Lewis e le strutture di Lewis.

### Simboli di Lewis

Utilizziamo i simboli di Lewis per descrivere le configurazioni elettroniche di valenza di atomi e ioni monoatomici. Un **simbolo di Lewis** è costituito da un simbolo elementare circondato da un punto per ciascuno dei suoi elettroni di valenza: la tabella qui sotto mostra i simboli di Lewis di alcuni elementi del terzo periodo della tavola periodica.

Elemento	configuraz. elettr.	simboli
sodio	[Ne] 3s <sup>1</sup>	·Na
magnesio	[Ne] 3s <sup>2</sup>	·Mg·
alluminio	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	·Al·
fosforo	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	·P·

I simboli di Lewis possono anche essere usati per illustrare la formazione di cationi da atomi, come mostrato qui per il sodio. Allo stesso modo, possono essere usati per mostrare la formazione di anioni dagli atomi, come mostrato qui per il cloro:

il sodio diventa catione  $\dot{\text{Na}} \longrightarrow \text{Na} + e^-$  oppure il cloro diventa anione  $:\ddot{\text{Cl}}\cdot + e^- \longrightarrow :\ddot{\text{Cl}}:^-$

Con i simboli di Lewis si possono mostrare il trasferimento di elettroni durante la formazione di composti ionici.

Metal		Nonmetal		Ionic Compound
Na ·	+	·Cl·	→	Na <sup>+</sup> [ :Cl: ] <sup>-</sup> sodium chloride (sodium ion and chloride ion)
·Mg·	+	·O·	→	Mg <sup>2+</sup> [ :O: ] <sup>2-</sup> magnesium oxide (magnesium ion and oxide ion)
·Ca·	+	2 :F·	→	Ca <sup>2+</sup> [ :F: ] <sub>2</sub> <sup>-</sup> calcium fluoride (calcium ion and two fluoride ions)

Formazione composti ionici con i simboli di Lewis

I cationi si formano quando gli atomi perdono elettroni, rappresentati da meno punti di Lewis, mentre gli anioni si formano quando gli atomi acquistano elettroni. Il numero totale di elettroni non cambia.

### Strutture di Lewis

Usiamo anche i simboli di Lewis per indicare la formazione di legami covalenti, che sono mostrati nelle **strutture di Lewis**, disegni che descrivono il legame in molecole e ioni poliatomici. Ad esempio, quando due atomi di cloro formano una molecola di cloro, condividono una coppia di elettroni:



Formazione della molecola di cloro con la simbologia di Lewis

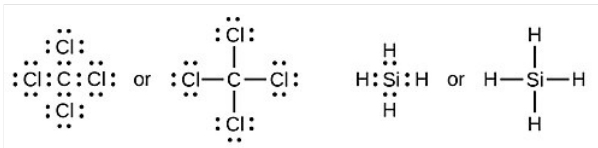
La struttura di Lewis indica che ciascun atomo di Cl ha tre coppie di elettroni che non vengono utilizzati nel legame (chiamate **coppie solitarie**) e una coppia di elettroni condivisa (scritta tra gli atomi). **Un trattino (o una linea) equivale ad indicare una coppia di elettroni condivisa:**



Una singola coppia di elettroni condivisa è chiamata **legame singolo**. Ogni atomo di cloro interagisce con otto elettroni di valenza: i sei nelle coppie solitarie e i due nel legame singolo.

### La regola dell'ottetto

Le altre molecole di alogeno (F<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub>, I<sub>2</sub> e At<sub>2</sub>) formano legami simili a quelli della molecola di cloro: un singolo legame tra gli atomi e tre coppie solitarie di elettroni per atomo. Ciò consente a ciascun atomo di alogeno di avere una configurazione elettronica di gas nobile. La tendenza degli atomi del gruppo principale a formare abbastanza legami da ottenere otto elettroni di valenza è nota come **regola dell'ottetto**.

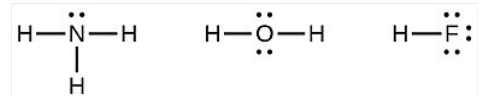


Metano e silano rappresentati con la simbologia di Lewis

Il numero di legami che un atomo può formare può spesso essere previsto dal numero di elettroni necessari per raggiungere un ottetto (otto elettroni di valenza); questo è particolarmente vero per i non metalli del secondo periodo della tavola periodica (C, N, O e F). Ad esempio, ciascun atomo di un elemento del gruppo 14 ha quattro elettroni nel suo guscio più esterno e quindi richiede altri quattro elettroni per raggiungere un ottetto. Questi quattro elettroni possono essere ottenuti formando quattro legami covalenti, come illustrato qui per il carbonio in  $\text{CCl}_4$  (tetracloruro di carbonio) e il silicio in  $\text{SiH}_4$  (silano). Poiché l'idrogeno ha bisogno solo di due elettroni per riempire il suo guscio di valenza, costituisce un'eccezione alla regola dell'ottetto. Anche gli elementi di transizione e gli elementi di

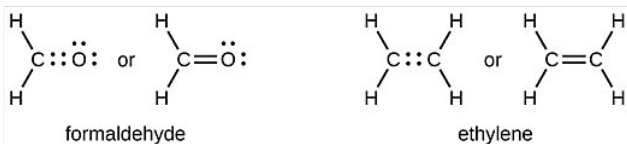
transizione interni non seguono la regola dell'ottetto:

Gli elementi del gruppo 15 come l'azoto hanno cinque elettroni di valenza nel simbolo atomico di Lewis: una coppia solitaria e tre elettroni spaiati. Per ottenere un ottetto, questi atomi formano tre legami covalenti, come nell' $\text{NH}_3$  (ammoniaca). L'ossigeno e gli altri atomi del gruppo 16 ottengono un ottetto formando due legami covalenti:



Ammoniaca, acqua, acido fluoridrico - con la simbologia di Lewis

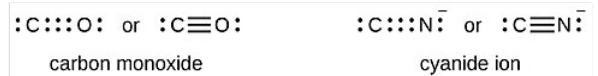
### Legami doppi e tripli



Formaldeide ed etilene - strutture di Lewis

Come accennato in precedenza, quando una coppia di atomi condivide una coppia di elettroni, si parla di legame singolo. Tuttavia, una coppia di atomi potrebbe dover condividere più di una coppia di elettroni per ottenere l'ottetto richiesto. Un **doppio legame** si forma quando due coppie di elettroni sono condivise tra una coppia di atomi, come tra gli atomi di carbonio e ossigeno in  $\text{CH}_2\text{O}$  (formaldeide) e tra i due atomi di carbonio in  $\text{C}_2\text{H}_4$  (etilene):

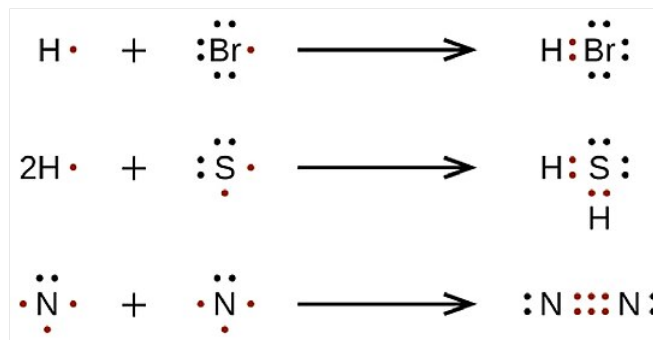
Un **triplo legame** si forma quando tre coppie di elettroni sono condivise da una coppia di atomi, come nel monossido di carbonio (CO) e nello ione cianuro ( $\text{CN}^-$ ):



Tripla legame nel monossido di carbonio e nello ione cianuro

## Scrivere strutture di Lewis con la regola dell'ottetto

Per **molecole e ioni molecolari molto semplici**, possiamo scrivere le strutture di Lewis semplicemente accoppiando gli elettroni spaiati sugli atomi costituenti. Vedi questi esempi dell'acido bromidrico, dell'acido solfidrico e dell'azoto molecolare



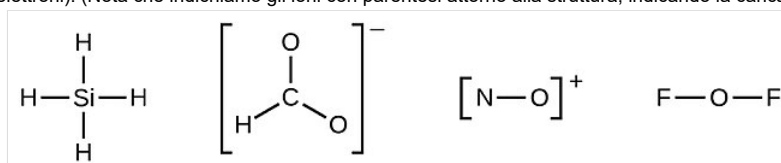
Strutture di Lewis semplici (acido bromidrico, acido solfidrico, azoto molecolare)

Per **molecole e ioni molecolari più complicati**, è utile seguire la procedura passo passo descritta qui:

1. Determinare il numero totale di elettroni di valenza (guscio esterno). Per i cationi, sottrai un elettrone per ogni carica positiva. Per gli anioni, aggiungi un elettrone per ogni carica negativa.
2. Disegna una struttura scheletrica della molecola o dello ione, disponendo gli atomi attorno a un atomo centrale. (In genere, l'elemento meno elettronegativo dovrebbe essere posizionato al centro.) Collega ciascun atomo all'atomo centrale con un singolo legame (una coppia di elettroni).
3. Distribuisci gli elettroni rimanenti come coppie solitarie sugli atomi terminali (eccetto l'idrogeno), completando un ottetto attorno a ciascun atomo.
4. Posiziona tutti gli elettroni rimanenti sull'atomo centrale.
5. Riorganizzare gli elettroni degli atomi esterni per creare legami multipli con l'atomo centrale al fine di ottenere ottetti ove possibile.

Determiniamo le strutture di Lewis di  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{CHO}_2^-$ ,  $\text{NO}^+$  e  $\text{OF}_2$  come esempi nel seguire questa procedura:

1. Determina il numero totale di elettroni di valenza (guscio esterno) nella molecola o nello ione.
  - Per una **molecola**, consideriamo il numero di elettroni di valenza su ciascun atomo della molecola: ( $\text{Si}=4e^- \times 1$  atomo) + ( $\text{H}=1e^- \times 4$  atomi) = tot 8 elettroni.
  - Per uno **ione negativo** (es. ione metanato  $\text{CHO}_2^-$ ), sommiamo il numero di elettroni di valenza degli atomi e in più si aggiunge un elettrone per ogni singola carica negativa: ( $\text{C}=4e^- \times 1$  atomo) +  $\text{H}=1e^- \times 1$ ) + ( $\text{O}=6e^- \times 2$ ) + 1 e **per la carica negativa** = tot 18 elettroni
  - Per uno **ione positivo**, come  $\text{NO}^+$ , sommiamo il numero di elettroni di valenza degli atomi e in più sottraiamo il numero di cariche positive sullo ione (un elettrone viene perso per ogni singola carica positiva) dal numero totale di elettroni di valenza: tot 10 elettroni
  - Poiché  $\text{OF}_2$  è una molecola neutra, aggiungiamo semplicemente il numero di elettroni di valenza: tot 20 elettroni
2. Disegna una struttura scheletrica della molecola o dello ione, disponendo gli atomi attorno a un atomo centrale e collegando ciascun atomo all'atomo centrale con un legame singolo (una coppia di elettroni). (Nota che indichiamo gli ioni con parentesi attorno alla struttura, indicando la carica fuori dalle parentesi:)

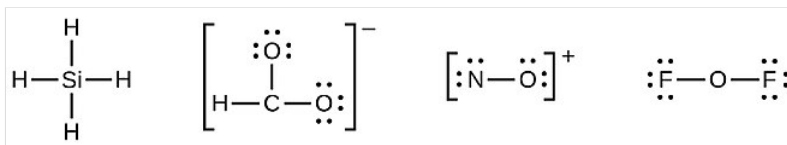


Strutture di Lewis - prima fase

Quando sono possibili diverse disposizioni di atomi, come per  $\text{CHO}_2^-$  dobbiamo usare prove sperimentali per scegliere quella corretta. In generale, è più probabile che gli elementi meno elettronegativi siano atomi centrali. In  $\text{CHO}_2^-$  l'atomo di carbonio meno elettronegativo occupa la posizione centrale circondato dagli atomi di ossigeno e idrogeno. Altri esempi includono P in  $\text{POCl}_3$ , S in  $\text{SO}_2$  e Cl in  $\text{ClO}_4^-$ . Un'eccezione è che **l'idrogeno non è quasi mai un atomo centrale**. Essendo l'elemento più elettronegativo, anche il fluoro non può essere un atomo centrale.

3. Distribuire gli elettroni rimanenti come coppie solitarie sugli atomi terminali (eccetto l'idrogeno) per completare i loro gusci di valenza con un otetto di elettroni.

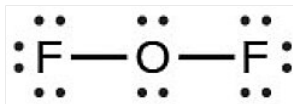
- Non ci sono elettroni rimanenti su  $\text{SiH}_4$ , quindi rimane invariato:



Strutture di lewis - secondo passaggio

4. Posiziona tutti gli elettroni rimanenti sull'atomo centrale.

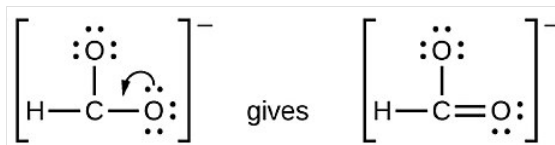
- Per  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{CHO}_2^-$ , e  $\text{NO}^+$ , non ci sono elettroni rimanenti; abbiamo già posizionato tutti gli elettroni determinati nel passaggio 1.
- Per  $\text{OF}_2$ , avevamo 16 elettroni rimanenti nel passaggio 3 e ne abbiamo posizionati 12, lasciandone 4 da posizionare sull'atomo centrale:



Ossido di difluoro - struttura di lewis

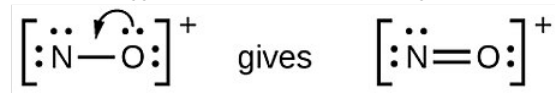
5. Riorganizzare gli elettroni degli atomi esterni per creare legami multipli con l'atomo centrale al fine di ottenere ottetti ove possibile.

- $\text{SiH}_4$ : Si ha già un otetto, quindi non è necessario fare nulla.
- $\text{CHO}_2^-$ : Abbiamo distribuito gli elettroni di valenza come coppie solitarie sugli atomi di ossigeno, ma l'atomo di carbonio manca di un otetto:



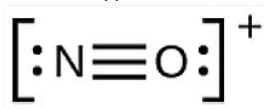
Ione metanato - lewis

- $\text{NO}^+$ : Per questo ione abbiamo aggiunto otto elettroni di valenza, ma nessuno dei due atomi ha un otetto. Non possiamo aggiungere altri elettroni poiché abbiamo già utilizzato il totale che abbiamo trovato nel passaggio 1, quindi dobbiamo spostare gli elettroni per formare un legame multiplo:



Ione nitrosonio - struttura di lewis 3

- questo non produce ancora un otetto, quindi dobbiamo spostare un'altra coppia, formando un triplo legame:



Ione nitrosonio - struttura di Lewis finale

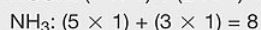
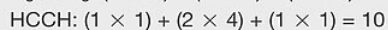
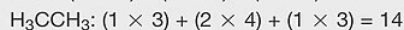
- In  $\text{OF}_2$ , ogni atomo ha un otetto come disegnato, quindi non cambia nulla.

### Esempio 1

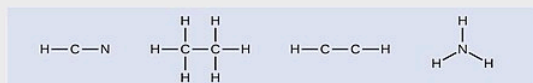
La missione Cassini-Huygens della NASA ha rilevato una grande nube di acido cianidrico tossico (HCN) su Titano, una delle lune di Saturno. Il titanio contiene anche etano ( $\text{H}_3\text{CCH}_3$ ), acetilene (HCCH) e ammoniaca ( $\text{NH}_3$ ). Quali sono le strutture di Lewis di queste molecole?

## Solution

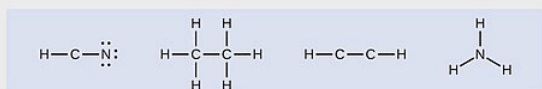
Step 1. Calculate the number of valence electrons.



Step 2. Draw a skeleton and connect the atoms with single bonds. Remember that H is never a central atom:



Step 3. Where needed, distribute electrons to the terminal atoms:



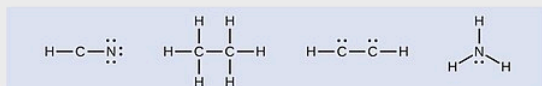
HCN: six electrons placed on N

H<sub>3</sub>CCH<sub>3</sub>: no electrons remain

HCCH: no terminal atoms capable of accepting electrons

NH<sub>3</sub>: no terminal atoms capable of accepting electrons

Step 4. Where needed, place remaining electrons on the central atom:



HCN: no electrons remain

H<sub>3</sub>CCH<sub>3</sub>: no electrons remain

HCCH: four electrons placed on carbon

NH<sub>3</sub>: two electrons placed on nitrogen

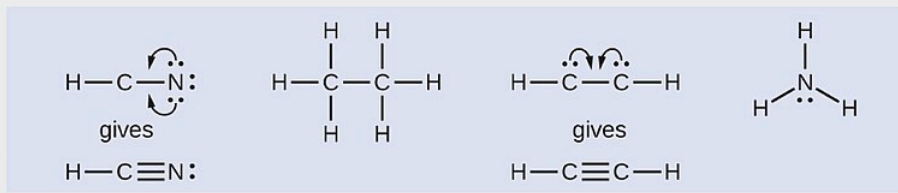
Step 5. Where needed, rearrange electrons to form multiple bonds in order to obtain an octet on each atom:

HCN: form two more C-N bonds

H<sub>3</sub>CCH<sub>3</sub>: all atoms have the correct number of electrons

HCCH: form a triple bond between the two carbon atoms

NH<sub>3</sub>: all atoms have the correct number of electrons



Soluzione esempio1

## Esercizio 1

Sia il monossido di carbonio, CO, sia l'anidride carbonica, CO<sub>2</sub>, sono prodotti della combustione di combustibili fossili. Entrambi questi gas causano anche problemi: la CO è tossica e la CO<sub>2</sub> è coinvolta nel cambiamento climatico globale. Quali sono le strutture di Lewis di queste due molecole?

(Risposta in fondo alla pagina)

## Eccezioni alla regola dell'ottetto

Molte molecole covalenti hanno atomi centrali che non hanno otto elettroni nelle loro strutture di Lewis. Queste molecole rientrano in tre categorie:

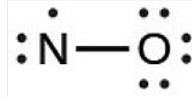
- Le molecole con elettroni dispari hanno un numero dispari di elettroni di valenza e quindi hanno un elettrone spaiato.
- Le molecole carenti di elettroni hanno un atomo centrale che ha meno elettroni di quelli necessari per una configurazione di gas nobile.
- Le molecole ipervalenti hanno un atomo centrale che ha più elettroni del necessario per una configurazione di gas nobile.

### Molecole di elettroni dispari

Chiamiamo **radicali liberi** le molecole che contengono un numero dispari di elettroni. L'ossido nitrico, NO, è un esempio di molecola di elettroni dispari; viene prodotto nei motori a combustione interna quando ossigeno e azoto reagiscono ad alte temperature.

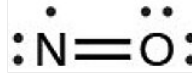
Per disegnare la struttura di Lewis per una molecola di elettroni dispari come NO, seguiamo gli stessi cinque passaggi che faremmo per le altre molecole, ma con alcune piccole modifiche:

1. **Determinare il numero totale di elettroni di valenza (guscio esterno)** . La somma degli elettroni di valenza è 5 (da N) + 6 (da O) = 11. Il numero dispari ci dice immediatamente che abbiamo un radicale libero, quindi sappiamo che non tutti gli atomi possono avere otto elettroni nel suo guscio di valenza.
2. **Disegna una struttura scheletrica della molecola** . Possiamo facilmente disegnare uno scheletro con un legame singolo N–O: N–O
3. **Distribuire gli elettroni rimanenti come coppie solitarie sugli atomi terminali** . In questo caso non esiste un atomo centrale, quindi distribuiamo gli elettroni attorno a entrambi gli atomi. In queste situazioni diamo otto elettroni all'atomo più elettronegativo; quindi l'ossigeno ha il guscio di valenza pieno



Monossido di azoto a

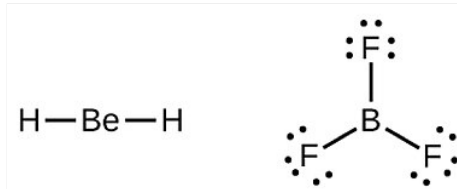
4. **Posizionare tutti gli elettroni rimanenti sull'atomo centrale** . Poiché non ci sono elettroni rimanenti, questo passaggio non è applicabile.
5. **Riorganizzare gli elettroni per creare legami multipli con l'atomo centrale al fine di ottenere ottetti ove possibile** . Sappiamo che una molecola di elettroni dispari non può avere un ottetto per ogni atomo, ma vogliamo che ogni atomo si avvicini il più possibile a un ottetto. In questo caso, l'azoto ha solo cinque elettroni attorno a sé. Per avvicinarci all'ottetto per l'azoto, prendiamo una delle coppie solitarie dell'ossigeno e la usiamo per formare un doppio legame NO. (Non possiamo prendere un'altra coppia solitaria di elettroni sull'ossigeno e formare un triplo legame perché l'azoto avrebbe allora nove elettroni.)



Monossido di azoto b

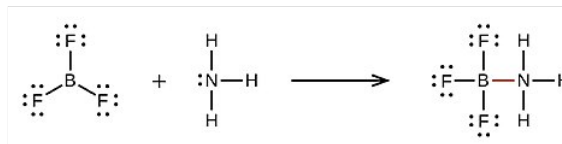
## Molecole carenti di elettroni

Incontreremo anche alcune molecole che contengono atomi centrali che non hanno un guscio di valenza pieno. Generalmente si tratta di molecole con atomi centrali dei gruppi 2 e 13, atomi esterni che sono idrogeno o altri atomi che non formano legami multipli. Ad esempio, le molecole del diidruro di berillio,  $\text{BeH}_2$ , e del trifluoruro di boro,  $\text{BF}_3$ , contengono atomi centrali con solo due e tre elettroni di valenza, rispettivamente. Con solo H come atomi esterni, c'è solo una possibilità per la struttura di Lewis di  $\text{BeH}_2$ , e non soddisfa la regola dell'ottetto per l'atomo centrale Be (vedi sotto). È possibile disegnare una struttura con un doppio legame tra un atomo di boro e un atomo di fluoro in  $\text{BF}_3$ , soddisfacendo la regola dell'ottetto, ma prove sperimentali indicano che le lunghezze dei legami sono più vicine a quelle previste per i legami singoli B–F. Ciò suggerisce che la migliore struttura di Lewis ha tre legami singoli B–F e un boro carente di elettroni. Anche la reattività del composto è coerente con un boro carente di elettroni. Tuttavia, i legami B–F sono leggermente più corti di quanto effettivamente previsto per i singoli legami B–F, indicando che nella molecola reale si trova qualche carattere di doppio legame.



Molecole elettroni deficienti 1

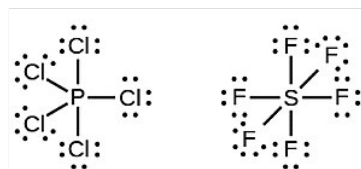
Un atomo come l'atomo di boro in  $\text{BF}_3$ , che non ha otto elettroni, è molto reattivo. Si combina facilmente con una molecola contenente un atomo con una coppia solitaria di elettroni. Ad esempio,  $\text{NH}_3$  reagisce con  $\text{BF}_3$  perché la coppia solitaria sull'azoto può essere condivisa con l'atomo di boro:



Molecole elettroni deficienti 2

## Molecole ipervalenti

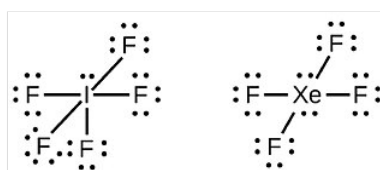
Gli elementi nel secondo periodo della tavola periodica ( $n = 2$ ) possono ospitare solo otto elettroni nei loro orbitali del guscio di valenza perché hanno solo quattro orbitali di valenza (uno orbitale  $2s$  e tre orbitali  $2p$ ). Gli elementi nel terzo periodo e in quelli superiori ( $n \geq 3$ ) hanno più di quattro orbitali di valenza e possono condividere più di quattro coppie di elettroni con altri atomi perché hanno orbitali  $d$  vuoti nello stesso livello. Le molecole formate da questi elementi sono talvolta chiamate **molecole ipervalenti**. La Figura 4.13 mostra le strutture di Lewis per due molecole ipervalenti,  $\text{PCl}_5$  e  $\text{SF}_6$ .



Molecole ipervalenti 1

Nel  $\text{PCl}_5$ , l'atomo centrale del fosforo condivide cinque coppie di elettroni. Nell' $\text{SF}_6$  lo zolfo condivide sei coppie di elettroni.

In alcune molecole ipervalenti, come  $\text{IF}_5$  e  $\text{XeF}_4$ , alcuni degli elettroni nel guscio esterno dell'atomo centrale sono coppie solitarie:



Molecole ipervalenti 2

Quando scriviamo le strutture di Lewis per queste molecole, scopriamo che ci sono degli elettroni rimasti dopo aver riempito i gusci di valenza degli atomi esterni con otto elettroni. Questi elettroni aggiuntivi devono essere assegnati all'atomo centrale.

## La carica formale

Nella sezione precedente abbiamo discusso come scrivere strutture di Lewis per molecole e ioni poliatomici. Come abbiamo visto, tuttavia, in alcuni casi sembra che esista più di una struttura valida per una molecola. Possiamo utilizzare il concetto di carica formale per aiutarci a prevedere la struttura di Lewis più appropriata quando più di una è ragionevole.

### Calcolo della carica formale

La **carica formale** di un atomo in una molecola è la carica *ipotetica* che l'atomo avrebbe se potessimo ridistribuire uniformemente gli elettroni nei legami tra gli atomi. Un altro modo per dirlo è che la carica formale risulta quando prendiamo il numero di elettroni di valenza di un atomo neutro, sottraiamo gli elettroni di non legame e quindi sottraiamo il numero di legami collegati a quell'atomo nella struttura di Lewis.

Pertanto, calcoliamo la carica formale come segue: **carica formale = elettroni di valenza (atomo libero) - coppie elettroni liberi - 1/2 elettroni di legame**

Possiamo ricontrollare i calcoli delle cariche formali determinando la somma delle cariche formali per l'intera struttura. La somma delle cariche formali di tutti gli atomi di una molecola deve essere zero; la somma delle cariche formali di uno ione dovrebbe essere uguale alla carica dello ione.

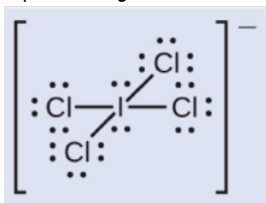
Dobbiamo ricordare che la carica formale calcolata per un atomo non è la carica *effettiva* dell'atomo nella molecola. La carica formale è solo un'utile procedura contabile; non indica la presenza di cariche effettive.

### Esempio 2

Assegnare cariche formali a ciascun atomo nello ione  $\text{ICl}_4^-$

#### Soluzione

1. Passaggio 1. *Dividiamo equamente le coppie di elettroni di legame per tutti i legami I-Cl:*



ione tetracloroioduro

2. Passaggio 2. *Assegniamo le coppie solitarie di elettroni ai loro atomi.* A ciascun atomo di Cl sono ora assegnati sette elettroni e l'atomo di I ne ha otto.

3. Passaggio 3. *Sottrarre questo numero dal numero di elettroni di valenza per l'atomo neutro:* I:  $7 - 8 = -1$  Cl:  $7 - 7 = 0$  La somma delle cariche formali di tutti gli atomi è uguale a  $-1$ , che è identico a la carica dello ione ( $-1$ ).

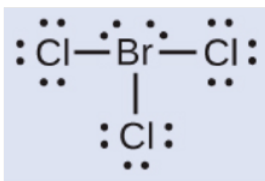
### Esercizio 2

Calcola la carica formale per ciascun atomo nella molecola di monossido di carbonio:

#### Soluzione in fondo alla pagina

### Esempio 3

Assegnare cariche formali a ciascun atomo nella molecola  $\text{BrCl}_3$



tricloruro di bromo

#### Soluzione

1. Passaggio 1. *Assegna uno degli elettroni in ciascun legame Br-Cl all'atomo di Br e uno all'atomo di Cl in quel legame:*

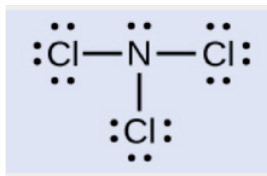
2. Passaggio 2. *Assegna le coppie solitarie al loro atomo.* Ora ogni atomo di Cl ha sette elettroni e l'atomo di Br ha sette elettroni.

3. Passaggio 3. *Sottrarre questo numero dal numero di elettroni di valenza per l'atomo neutro.* Ciò fornisce la carica formale: Br:  $7 - 7 = 0$  Cl:  $7 - 7 = 0$  Tutti gli atomi in  $\text{BrCl}_3$  hanno una carica formale pari a zero e la somma delle cariche formali è pari a zero, come deve essere in una molecola neutra.

### Esercizio 3

Determina la carica formale per ciascun atomo in  $\text{NCl}_3$

**Soluzione in fondo alla pagina**



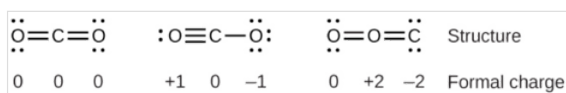
tricloruro di azoto

## Utilizzo della carica formale per prevedere la struttura molecolare

La disposizione degli atomi in una molecola o in uno ione è chiamata **struttura molecolare**. In molti casi, seguire i passaggi per scrivere le strutture di Lewis può portare a più di una possibile struttura molecolare: diversi posizionamenti di legami multipli e coppie solitarie di elettroni o diverse disposizioni di atomi, per esempio. Alcune linee guida che coinvolgono la carica formale possono essere utili per decidere quale delle possibili strutture è più probabile per una particolare molecola o ione:

1. Una struttura molecolare in cui tutte le cariche formali sono pari a zero è preferibile ad una in cui alcune cariche formali non sono pari a zero.
2. Se la struttura di Lewis deve avere cariche formali diverse da zero, è preferibile la soluzione con le cariche formali più piccole diverse da zero.
3. Le strutture di Lewis sono preferibili quando le cariche formali adiacenti sono pari a zero o di segno opposto.
4. Quando dobbiamo scegliere tra più strutture di Lewis con distribuzioni simili di cariche formali, è preferibile la struttura con cariche formali negative sugli atomi più elettronegativi.

Per vedere come si applicano queste linee guida, consideriamo alcune possibili strutture per l'anidride carbonica,  $\text{CO}_2$ . Sappiamo dalla nostra discussione precedente che l'atomo meno elettronegativo occupa tipicamente la posizione centrale, ma le cariche formali ci permettono di capire *perché* ciò accade. Possiamo tracciare tre possibilità per la struttura: carbonio al centro e doppi legami, carbonio al centro con un legame singolo e triplo e ossigeno al centro con doppi legami:



carica formale della  $\text{CO}_2$

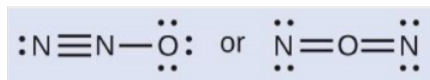
Confrontando i tre oneri formali, possiamo identificare definitivamente come preferibile la struttura di sinistra perché presenta solo oneri formali pari a zero (Linea Guida 1).

Come altro esempio, lo ione tiocianato, uno ione formato da un atomo di carbonio, un atomo di azoto e un atomo di zolfo, potrebbe avere tre diverse strutture molecolari:  $\text{NCS}^-$ ,  $\text{CNS}^-$  o  $\text{CSN}^-$ . Le cariche formali presenti in ciascuna di queste strutture molecolari possono aiutarci a scegliere la disposizione più probabile degli atomi. Qui sono mostrate le possibili strutture di Lewis e le cariche formali per ciascuna delle tre possibili strutture per lo ione tiocianato:

Si noti che la somma delle cariche formali in ogni caso è uguale alla carica dello ione (-1). Tuttavia, la prima disposizione di atomi è preferita perché ha il numero più basso di atomi con cariche formali diverse da zero (Linea guida 2). Inoltre, posiziona l'atomo meno elettronegativo al centro e la carica negativa sull'elemento più elettronegativo (Linea guida 4).

### Esempio 4

Il protossido di azoto,  $\text{N}_2\text{O}$ , comunemente noto come gas esilarante, viene utilizzato come anestetico in interventi chirurgici minori, come l'estrazione di routine dei denti del giudizio. Qual è la struttura più probabile per il protossido di azoto?



$\text{N}_2\text{O}$  carica formale a

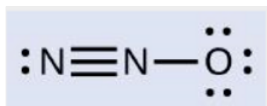
### Soluzione

La determinazione dell'addebito formale produce quanto segue:



$\text{N}_2\text{O}$  carica formale b

La struttura con un atomo di ossigeno terminale soddisfa al meglio i criteri per la distribuzione più stabile della carica formale:



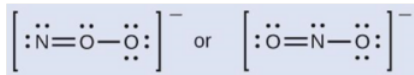
$\text{N}_2\text{O}$  carica formale c

Il numero di atomi con cariche formali è ridotto al minimo (Linea guida 2), non c'è carica formale con una grandezza maggiore di uno (Linea guida 2), la carica formale negativa è sull'elemento più elettronegativo (Linea guida 4) e l'atomo meno elettronegativo è in posizione centrale.

### Esercizio 4

Qual è la struttura molecolare più probabile dello ione nitrito  $\text{NO}_2^-$ ?





NO<sub>2</sub>- struttura molecolare

Soluzione in fondo alla pagina

## Ibridi di risonanza

Si noti che la struttura più probabile per l'anione nitrito nell'esercizio 4 può in realtà essere disegnata in due modi diversi, distinti dalle posizioni dei legami NO e N=O:



NO<sub>2</sub>- struttura di risonanza

Se gli ioni nitrito contengono effettivamente un legame singolo e uno doppio, ci aspetteremmo che le lunghezze dei due legami siano diverse. Un doppio legame tra due atomi è più corto (e più forte) di un legame singolo tra gli stessi due atomi. Gli esperimenti mostrano, tuttavia, che entrambi gli N-O si legano hanno la stessa forza e lunghezza e sono identici in tutte le altre proprietà.

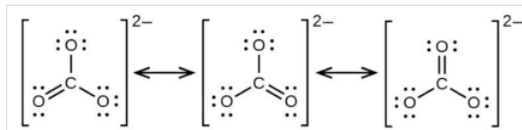
Non è possibile scrivere una singola struttura di Lewis per NO<sub>2</sub><sup>-</sup> in cui l'azoto ha un otetto ed entrambi i legami sono equivalenti. Utilizziamo invece il concetto di **risonanza**: se per una molecola o uno ione si possono scrivere due o più strutture di Lewis con la stessa disposizione degli atomi, la distribuzione effettiva degli elettroni è una media di quella mostrata dalle varie strutture di Lewis. La distribuzione effettiva degli elettroni in ciascuno dei legami azoto-ossigeno in NO<sub>2</sub><sup>-</sup> è la media tra un legame doppio e un legame singolo. Chiamiamo **forme di risonanza** le singole strutture di Lewis. La struttura elettronica effettiva della molecola (la media delle forme di risonanza) è chiamata **ibrido di risonanza** delle singole forme di risonanza. Una freccia a doppia punta tra le strutture di Lewis indica che si tratta di forme di risonanza.



NO<sub>2</sub>- struttura di risonanza corretta

Dovremmo ricordare che una molecola descritta come un ibrido di risonanza non possiede *mai* una struttura elettronica descritta da nessuna delle due forme di risonanza. Non fluttua tra le forme di risonanza; piuttosto, la struttura elettronica effettiva è *sempre* la media di quella mostrata da tutte le forme di risonanza. George Wheland, uno dei pionieri della teoria della risonanza, usò un'analogia storica per descrivere la relazione tra forme di risonanza e ibridi di risonanza. Un viaggiatore medievale, non avendo mai visto prima un rinoceronte, lo descrisse come un ibrido tra un drago e un unicorno perché aveva molte proprietà in comune con entrambi. Proprio come un rinoceronte a volte non è né un drago né un unicorno altre volte, un ibrido di risonanza non è nessuna delle sue forme di risonanza in un dato momento. Come un rinoceronte, è un'entità reale di cui le prove sperimentali hanno dimostrato l'esistenza. Ha alcune caratteristiche in comune con le sue forme di risonanza, ma le forme di risonanza stesse sono immagini convenienti e immaginarie (come l'unicorno e il drago).

L'anione carbonato, fornisce un secondo esempio di risonanza:



ione carbonato struttura di risonanza

Un atomo di ossigeno deve avere un doppio legame con il carbonio per completare l'ottetto sull'atomo centrale. Tutti gli atomi di ossigeno, tuttavia, sono equivalenti e il doppio legame potrebbe formarsi da uno qualsiasi dei tre atomi. Ciò dà origine a tre forme di risonanza dello ione carbonato. Poiché possiamo scrivere tre strutture di risonanza identiche, sappiamo che la disposizione effettiva degli elettroni nello ione carbonato è la media delle tre strutture. Ancora una volta, gli esperimenti mostrano che tutti e tre i legami C-O sono esattamente gli stessi.

## Risposte degli esercizi della pagina

Es. 1:  $\text{C}\equiv\text{O}:$      $:\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}:$

Es. 2: C -1, O +1

Es. 3: N: o; tutti e tre gli atomi di Cl: o

Es. 4: ONO<sup>-</sup>

## Esercizi

- Esercizi (<https://openstax.org/books/chemistry-atoms-first-2e/pages/4-exercises>) su Openstax (4.4 e 4.5) in inglese
- Soluzioni (<https://openstax.org/books/chemistry-atoms-first-2e/pages/chapter-4>) degli esercizi su OpenStax

## Fonti

<https://openstax.org/books/chemistry-atoms-first-2e/pages/4-4-lewis-symbols-and-structures>

<https://openstax.org/books/chemistry-atoms-first-2e/pages/4-5-formal-charges-and-resonance>

[https://en.wikibooks.org/wiki/General\\_Chemistry/Molecular\\_Shape](https://en.wikibooks.org/wiki/General_Chemistry/Molecular_Shape)