

Tutorato di chimica generale

Tutor: Riva Laura



POLITECNICO
MILANO 1863

Per registrare la presenza al tutorato:

Vai sul sito: www.tutorapp.polimi.it (link in chat)

Inserisci il mio codice persona e regista la tua presenza:

10402807

O scansiona il QR code:



POLITECNICO
MILANO 1863



Struttura delle Molecole: Teoria di Lewis e VSEPR



POLITECNICO
MILANO 1863

CENNI TEORICI – TEORIA DI LEWIS

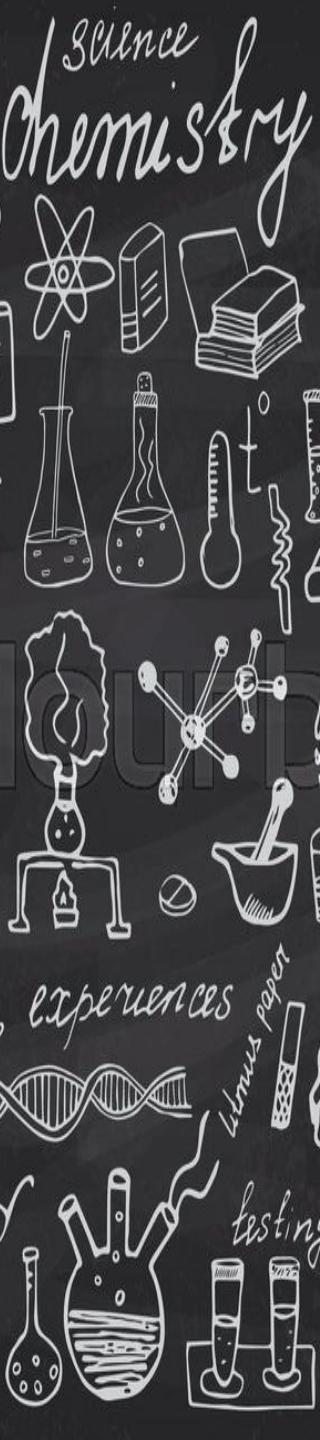
La **struttura di Lewis**, è un modo di rappresentare atomi basandosi sulla **regola dell'ottetto**.

La regola dell'ottetto prevede che ogni atomo tende, attraverso la formazione di legami chimici, ad acquistare o a perdere o a mettere in compartecipazione elettroni fino a **raggiungere una configurazione elettronica esterna costituita da otto elettroni** (uguale a quella del gas nobile più vicino).

Queste strutture sono un disegno bidimensionale dove ogni atomo è rappresentato dal suo simbolo chimico, circondato da **punti che rappresentano i suoi elettroni di valenza**. Gli elettroni spaiati sono rappresentati da un punto singolo, i doppietti elettronici da una coppia di punti o un trattino.

Gli elettroni che partecipano ad un legame covalente sono disposti tra i simboli dei due atomi che formano il legame: un **legame singolo** è rappresentato da una coppia di punti, un **legame doppio** da due coppie di punti, un **legame triplo** da tre coppie di punti.

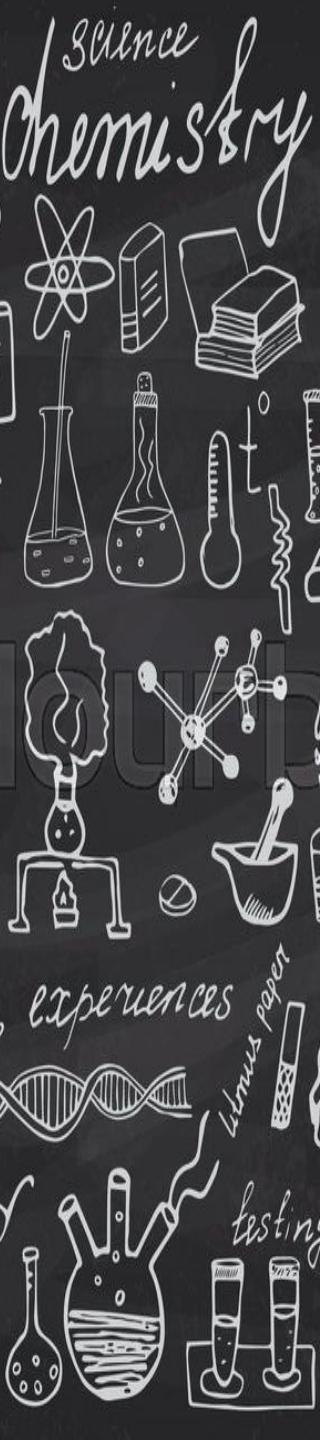
Accanto ai simboli degli atomi è indicata, se diversa da zero, la loro **carica formale**.



COME COSTRUIRE LA STRUTTURA DI LEWIS

È possibile disegnare una struttura di Lewis per una molecola con il seguente **schema**:

1. si **contano gli elettroni di valenza** di ciascun atomo presente nella formula bruta;
2. si **divide il numero di elettroni per due** ottenendo dunque il numero di coppie elettroniche che andranno sistemate nella struttura;
3. si **costruisce uno "scheletro"** contenente solamente legami di tipo σ , avendo cura di disporre gli eventuali atomi di idrogeno in posizioni terminali;
4. dopo aver sottratto dal totale il numero di coppie utilizzate per formare i legami σ **si dispongono le restanti coppie in maniera tale da soddisfare la regola dell'ottetto**, ad esempio utilizzandole come coppie solitarie oppure come legami multipli;
5. si verifica che il **numero ed il modulo delle cariche formali sia il minore possibile** ed inoltre che cariche formali positive non si trovino su elementi elettronegativi.



CENNI TEORICI – TEORIA DI LEWIS

Carica Formale (FC): una carica formale è la carica assegnata ad un atomo in una molecola, assumendo che gli elettroni di legame siano equamente condivisi tra gli atomi indipendentemente dalla loro elettronegatività.

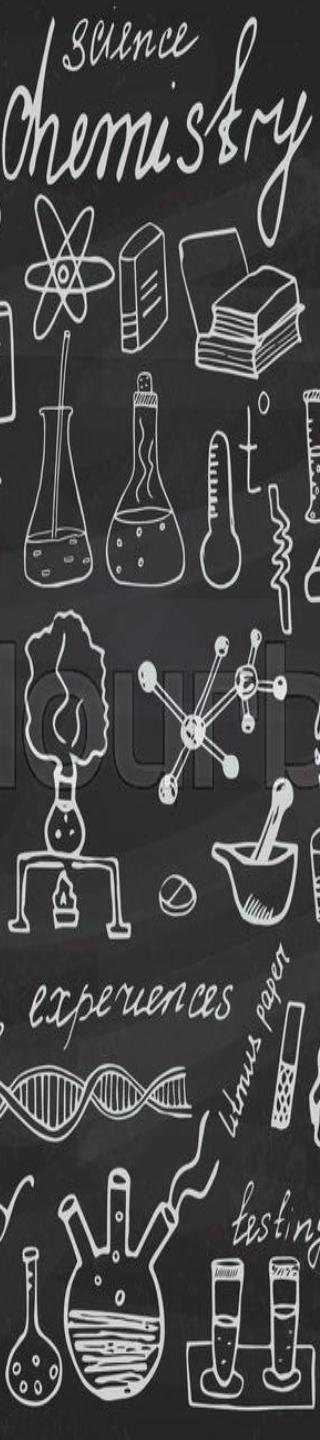
La carica formale di un qualsiasi atomo in una molecola può essere calcolata con la seguente equazione

$$FC = V - N - B$$

Nella determinazione della corretta struttura di Lewis (o della formula di risonanza predominante) per una molecola, la struttura viene scelta in maniera tale che su ogni atomo la carica formale sia minima.

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

- Gli elementi del primo periodo: idrogeno ed elio, per questi sono sufficienti due elettroni (raggiungono il duetto).
- Specie con elettroni dispari, ad esempio NO.
- Gli acidi di Lewis, ad esempio: BCl₃ o AlF₃, i quali non raggiungono l'ottetto.
- I complessi, i composti organometallici o composti quali PCl₅ o SCl₆, che potendo sfruttare orbitali disponibili si dice che possiedono "ottetto espanso".



CENNI TEORICI – RISONANZA

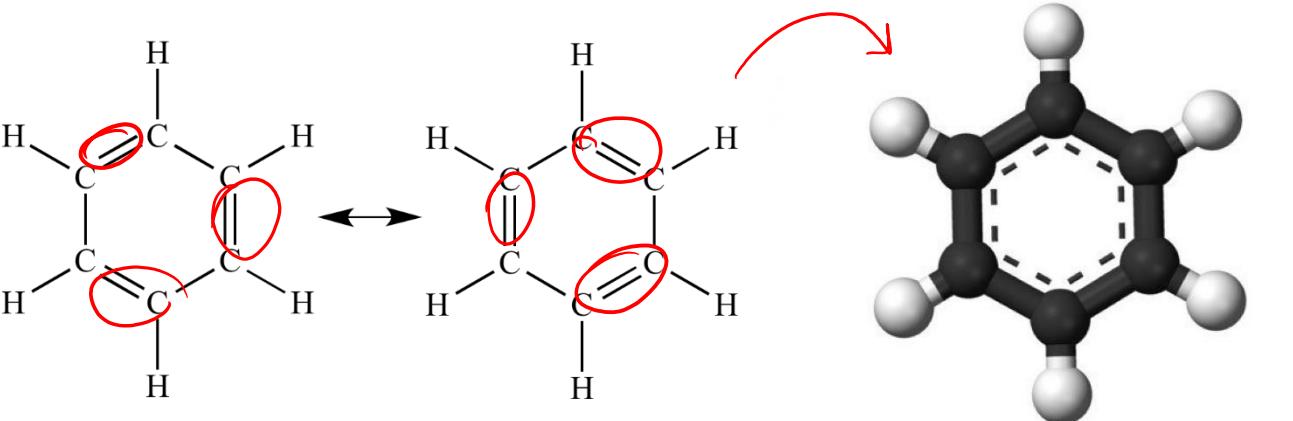
Vi sono molecole le cui **proprietà non sono ben spiegate da una singola struttura di Lewis** che tenga globalmente conto delle proprietà osservate (contenuto energetico, lunghezza dei legami, comportamento chimico, etc.)

Si è allora costretti a sostituire a una singola formula un insieme di formule di Lewis. Questo processo di mediazione tra più strutture si chiama **RISONANZA**.

Le *forme di risonanza o forme contributive* si differenziano solo per la posizione degli elettroni.

Solo gli **elettroni π** possono muoversi. I nuclei e gli angoli di legame restano gli stessi.

La risonanza genera una **delocalizzazione di carica elettrica**.



CENNI TEORICI – TEORIA VSEPR

VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion): teoria che permette di prevedere la geometria delle molecole basandosi sulla repulsione tra doppietti elettronici di legame e di non legame.

Le **copie di elettroni più esterne**, avendo tutte la stessa carica negativa, tendono a **respingersi** le une con le altre e a disporsi il più lontano possibile.

I **doppietti solitari di non legame** tendono ad occupare un **volumen maggiore** rispetto ai doppietti condivisi ed esercitano quindi una forza repulsiva di maggiore intensità.

Per determinare la geometria molecolare è necessario calcolare il valore del **numero sterico (NS)** sommando il numero di atomi (**X**) legati all'atomo centrale (**A**) e il numero di copie di elettroni libere presenti sull'atomo centrale (**E**). Ogni molecola è quindi rappresentabile dalla formula generica

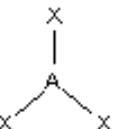
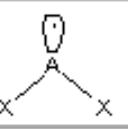
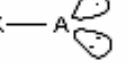
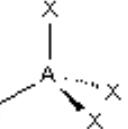
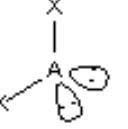
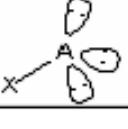
$$AX_mE_n$$

dove **A** rappresenta l'atomo centrale, **X** il numero di atomi legati all'atomo centrale ed **E** le copie di elettroni solitarie presenti sull'atomo centrale.



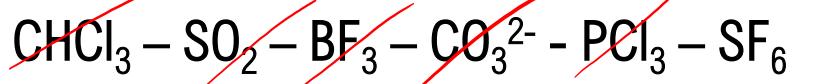
Science Chemistry



Total Domains	Generic Formula	Picture	Bonded Atoms	Lone Pairs	Molecular Shape	Electron Geometry	Example	Hybridization	Bond Angles
1	AX	A—X	1	0	Linear	Linear	H ₂	s	180
2	AX ₂	X—A—X	2	0	Linear	Linear	CO ₂	sp	180
	AXE	O A—X	1	1	Linear	Linear	CN ⁻		
3	AX ₃		3	0	Trigonal planar	Trigonal planar	AlBr ₃	sp ²	120
	AX ₂ E		2	1	Bent	Trigonal planar	SnCl ₂		
	AXE ₂		1	2	Linear	Trigonal planar	O ₂		
4	AX ₄		4	0	Tetrahedral	Tetrahedral	SiCl ₄	sp ³	109.5
	AX ₃ E		3	1	Trigonal pyramid	Tetrahedral	PH ₃		
	AX ₂ E ₂		2	2	Bent	Tetrahedral	SeBr ₂		
	AXE ₃		1	3	Linear	Tetrahedral	Cl ₂		

ESERCIZI

1. Scrivere la struttura di Lewis delle seguenti molecole e determinarne anche la geometria molecolare attraverso la VSEPR:



$$\text{CHCl}_3 \rightarrow 4 + 1 + 7 \cdot 3 = 26 \text{ e}^-_{\text{TOT}}$$

$$26/2 = 13 \text{ coppie}$$

$$13 - 4 = 9 \text{ coppie residue}$$

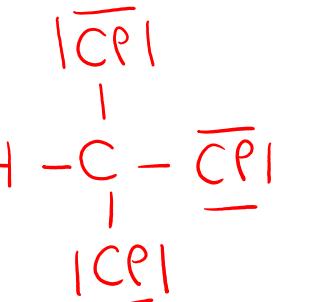
AX₄ → TETRAEDRICA

$$\text{SO}_2 \rightarrow 6 + 6 \cdot 2 = 18 \text{ e}^-_{\text{TOT}}$$

$$18/2 = 9 \text{ coppie}$$

$$9 - 2 = 7 \text{ coppie residue}$$

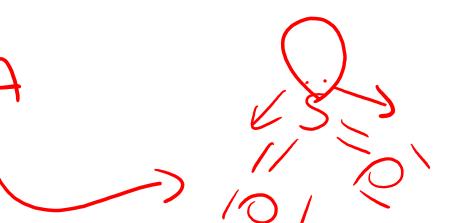
AX₂E₁ ⇒ PIEGATA



$$\text{CF(H)} = 1 - 0 - 1 = 0 \checkmark$$

$$\text{CF(C)} = 4 - 0 - 4 = 0 \checkmark$$

$$\text{CF(Cl)} = 7 - 6 - 1 = 0 \checkmark$$



$$\text{CF(O)} = 6 - 4 - 2 = 0 \checkmark$$

$$\text{CF(S)} = 6 - 2 - 4 = 0 \checkmark$$



$$\text{BF}_3 \rightarrow 3 + 7 \cdot 3 = 24 e^-_{\text{TOT}}$$

$$24/2 = 12 \text{ coppie}$$

$$12 - 3 = 9 \text{ coppie residue}$$

$\text{AX}_3 \Rightarrow$ TRIGONALE PLANARE

$$\text{CO}_3^{2-} \rightarrow 4 + 6 \cdot 3 + 2 = 24 e^-_{\text{TOT}}$$

$$24/2 = 12 \text{ coppie}$$

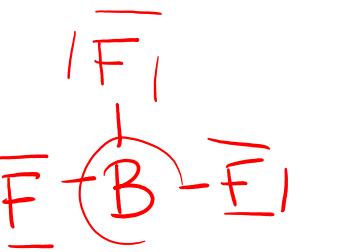
$$12 - 3 = 9 \text{ coppie residue}$$

$$\text{CF(C)} = 4 - 0 - 4 = 0 \vee$$

$$\text{CF(O}_1\text{)} = 6 - 4 - 2 = 0 \vee$$

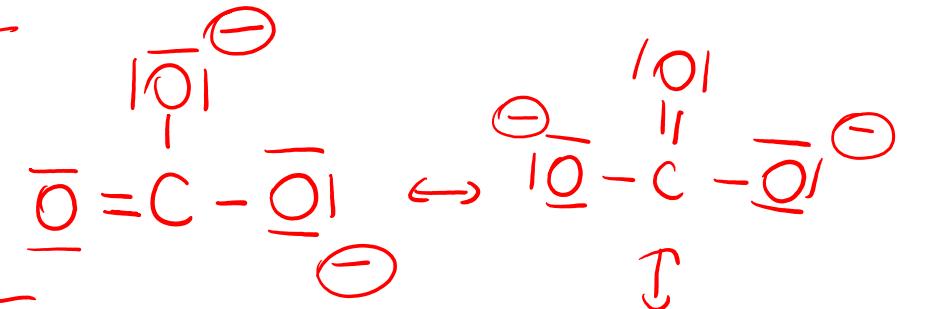
$$\text{CF(O}_2\text{)} = 6 - 6 - 1 = -1 \vee$$

$\text{AX}_3 \Rightarrow$ TRIGONALE PLANARE

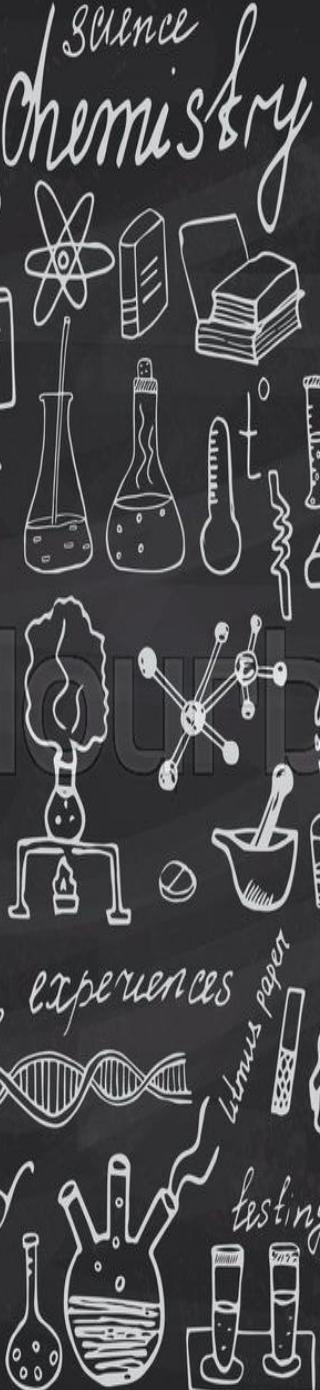
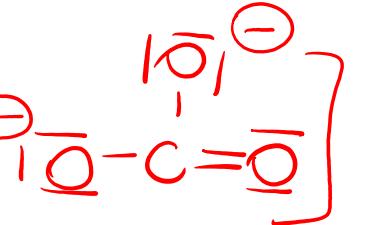


$$\text{CF(B)} = 3 - 0 - 3 = 0 \vee$$

$$\text{CF(F)} = 7 - 6 - 1 = 0 \vee$$



RISONANZA



$$\text{PCl}_3 \rightarrow 5 + 7 \cdot 3 = 26 e^- \text{ TOT}$$

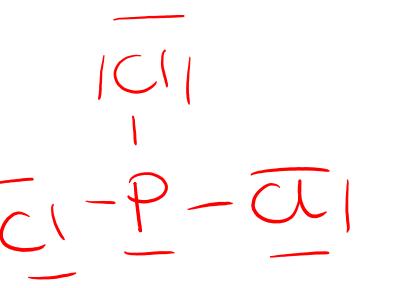
$$26/2 = 13 \text{ coppie}$$

$$13 - 3 = 10 \text{ coppie residue}$$

$$\text{CF}(\text{a}) = 7 - 6 - 1 = 0 \vee$$

$$\text{CF}(\text{P}) = 5 - 2 - 3 = 0 \vee$$

$\text{AX}_3\text{E} \rightarrow$ TRIGONALE PIRAMIDALE



$$\text{SF}_6 \rightarrow 6 + 7 \cdot 6 = 48 e^- \text{ TOT}$$

$$48/2 = 24 \text{ coppie}$$

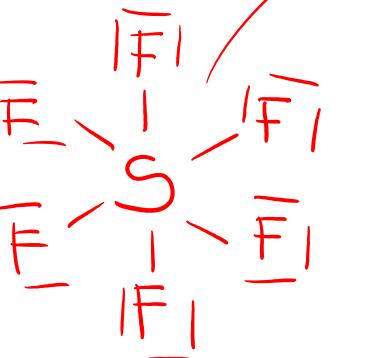
$$24 - 6 = 18 \text{ coppie residue}$$

$$\text{CF}(\text{S}) = 6 - 0 - 6 = 0 \vee$$

$$\text{CF}(\text{F}) = 7 - 6 - 1 = 0 \vee$$

$\text{AX}_6 \rightarrow$ OTTAEDRICA

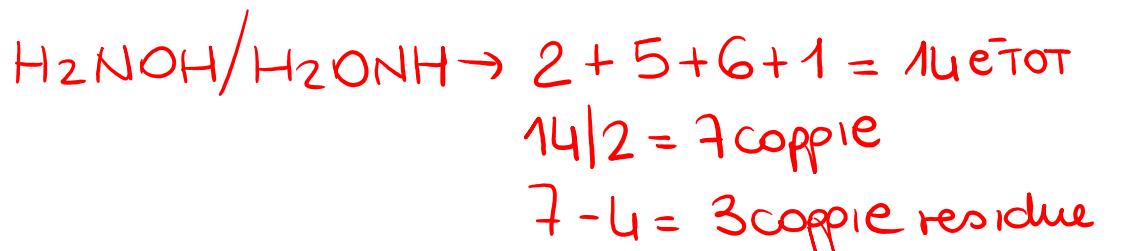
ottetto espanso



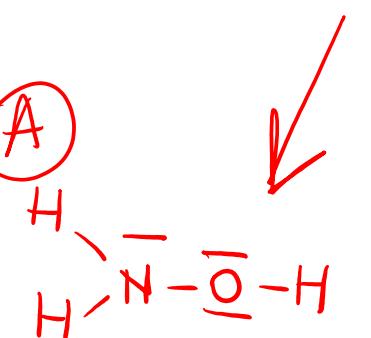
ESERCIZI

2. Assegnate le cariche formali agli atomi delle seguenti specie e scegliete lo scheletro di struttura più probabile:

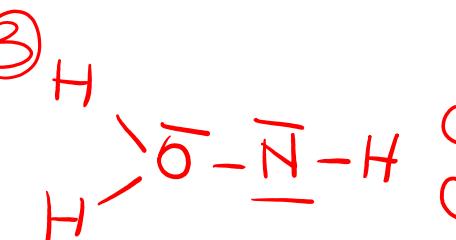
- a) H₂NOH o H₂ONH
- b) SCS o CSS
- c) NFO o FNO
- d) SOCl₂ o OSCl₂ o OCl₂S
- e) F₃SN o F₃NS



(A) Favorito



$$\text{CF(H)} = 1 - 0 - 1 = 0 \vee$$
$$\text{CF(N)} = 5 - 2 - 3 = 0 \vee$$
$$\text{CF(O)} = 6 - 4 - 2 = 0 \vee$$



$$\text{CF(H)} = 1 - 0 - 1 = 0 \vee$$
$$\text{CF(N)} = 5 - 4 - 2 = -1$$
$$\text{CF(O)} = 6 - 2 - 3 = +1$$

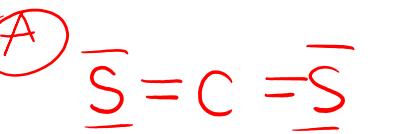


$$SCS/CSS \rightarrow 6+4+6 = 16_{TOT}$$

$$16/2 = 8 \text{ couple}$$

$$8 - 2 = 6 \text{ couple residue}$$

(A) favorite



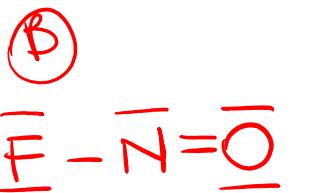
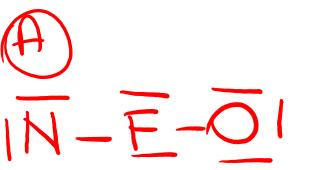
$$CF(C) = 4 - 0 - 4 = 0 \vee$$
$$CF(S) = 6 - 4 - 2 = 0 \vee$$

$$NFO/FNO \rightarrow 5+7+6 = 18 e^-_{TOT}$$

$$18/2 = 9 \text{ couple}$$

$$9 - 2 = 7 \text{ couple residue}$$

(B) favorite



$$CF(C) = 4 - 4 - 2 = -2$$

$$CF(S)_1 = 6 - 4 = 2$$

$$CF(S)_2 = 6 - 4 - 2 = 0 \vee$$

$$CF(N) = 5 - 4 - 1 = 0$$

$$CF(F) = 7 - 4 - 2 = +1$$

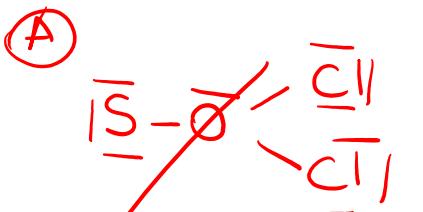
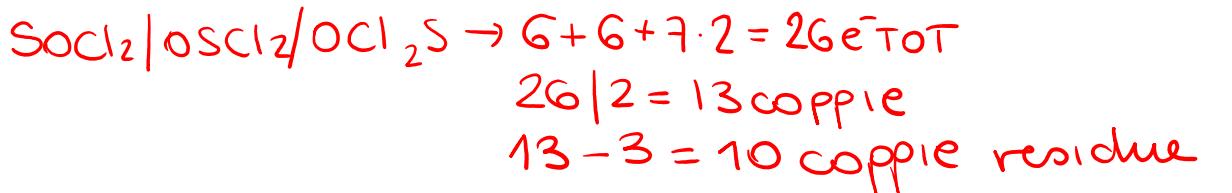
$$CF(O) = 6 - 6 - 1 = -1$$

$$CF(F) = 7 - 6 - 1 = 0 \vee$$

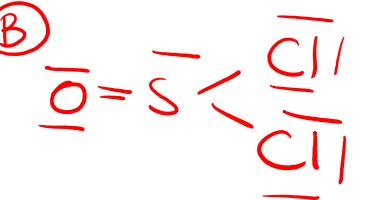
$$CF(N) = 5 - 2 - 3 = 0 \vee$$

$$CF(O) = 6 - 4 - 2 = 0 \vee$$

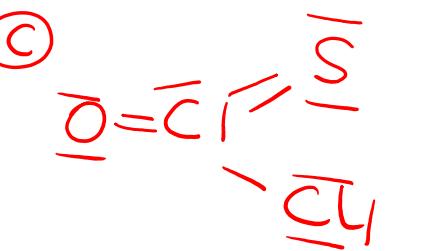




$$\begin{aligned} \text{CF(S)} &= 6 - 6 - 1 = -1 & \text{CF(O)} &= 6 - 4 - 2 = 0 \\ \text{CF(O)} &= 6 - 2 - 3 = +1 & \text{CF(S)} &= 6 - 2 - 4 = 0 \\ \text{CF(Cl)} &= 7 - 6 - 1 = 0 & \text{CF(Cl)} &= 7 - 6 - 1 = 0 \end{aligned}$$

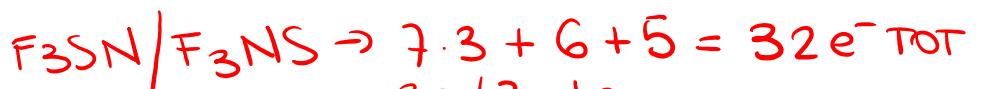


$$\begin{aligned} \text{CF(O)} &= 6 - 4 - 2 = 0 & \text{CF(Cl)}_1 &= 7 - 2 - 5 = 0 \leftarrow \\ \text{CF(S)} &= 6 - 4 - 2 = 0 & \text{CF(Cl)}_2 &= 7 - 6 - 1 = 0 \end{aligned}$$



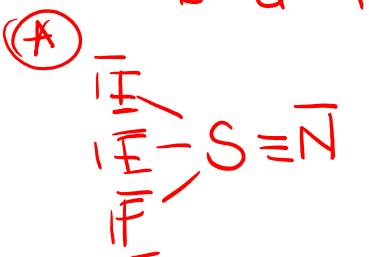
$$\begin{aligned} \text{CF(O)} &= 6 - 4 - 2 = 0 \\ \text{CF(Cl)}_1 &= 7 - 2 - 5 = 0 \leftarrow \\ \text{CF(Cl)}_2 &= 7 - 6 - 1 = 0 \end{aligned}$$

(B) favorita ↪

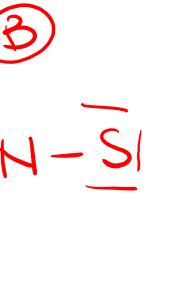


$$32 / 2 = 16 \text{ coppie}$$

$$16 - 6 = 12 \text{ coppie residue}$$



$$\begin{aligned} \text{CF(F)} &= 7 - 6 - 1 = 0 & \text{CF(S)} &= 6 - 0 - 6 = 0 \\ \text{CF(S)} &= 6 - 0 - 6 = 0 & \text{CF(N)} &= 5 - 2 - 3 = 0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \text{CF(F)} &= 7 - 6 - 1 = 0 & \text{CF(N)} &= 5 - 0 - 4 = +1 \\ \text{CF(S)} &= 6 - 6 - 1 = -1 \end{aligned}$$

(A) Favorita

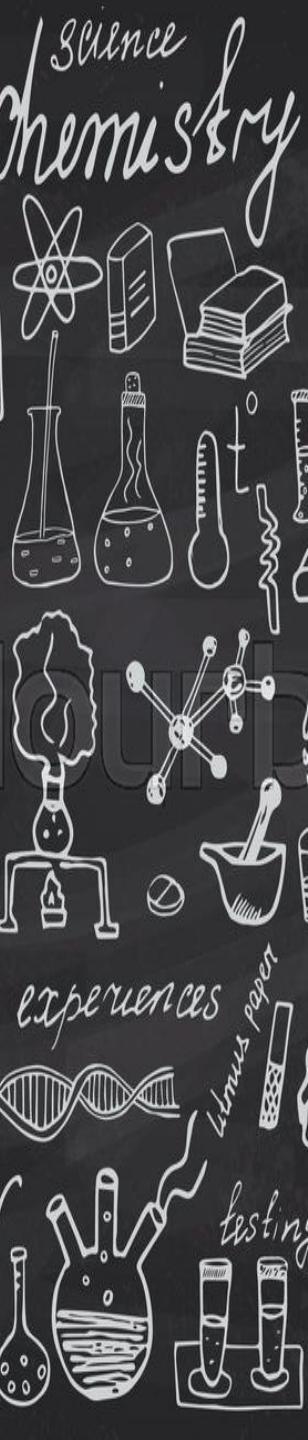


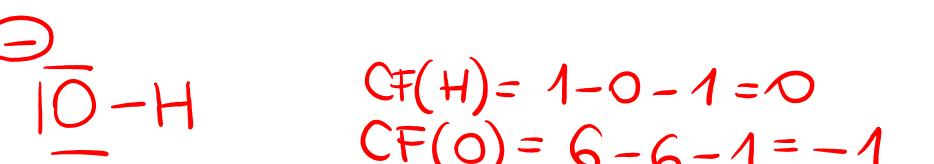
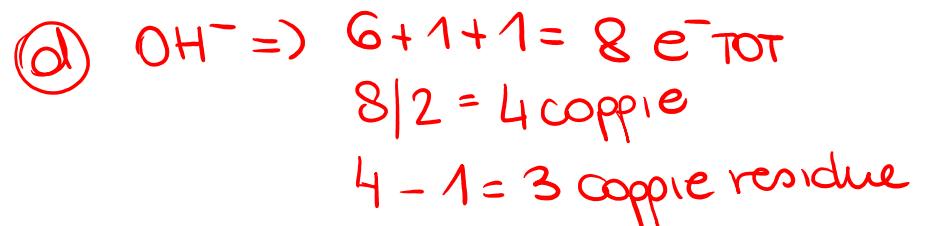
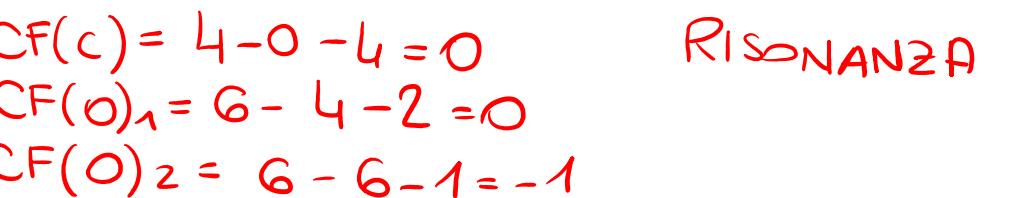
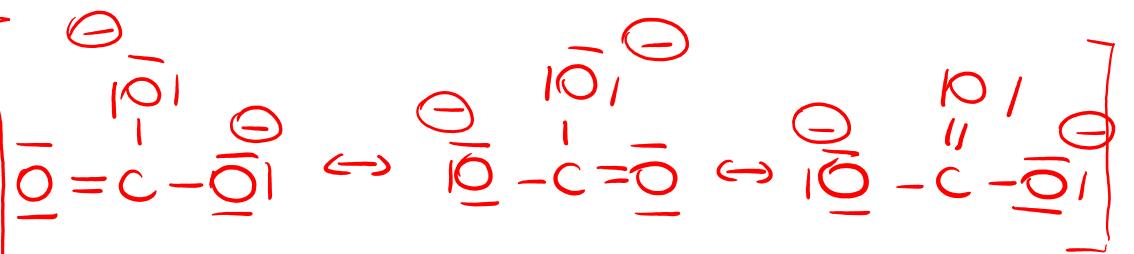
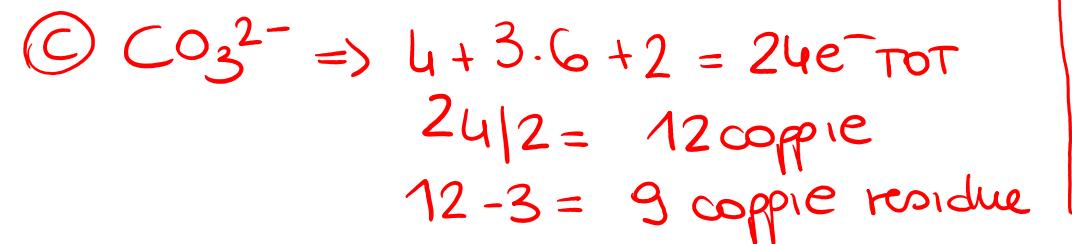
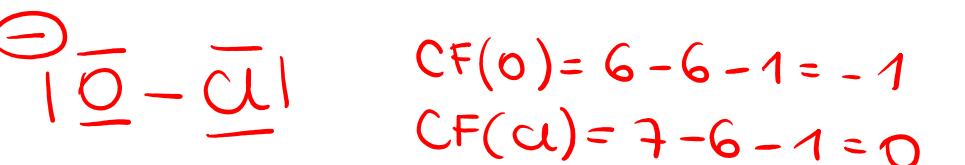
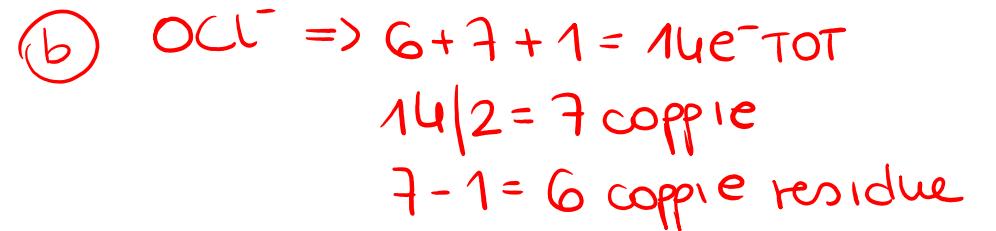
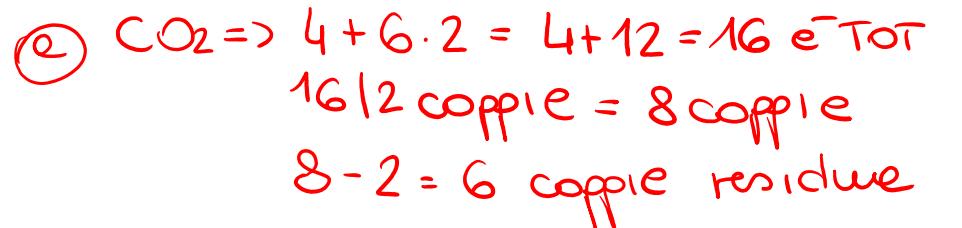
ESERCIZI

3. Quale delle seguenti specie richiede un ibrido di risonanza per la sua struttura di Lewis?

- a) CO_2
- b) OCl^-
- c) CO_3^{2-}
- d) OH^-

Spiegare.

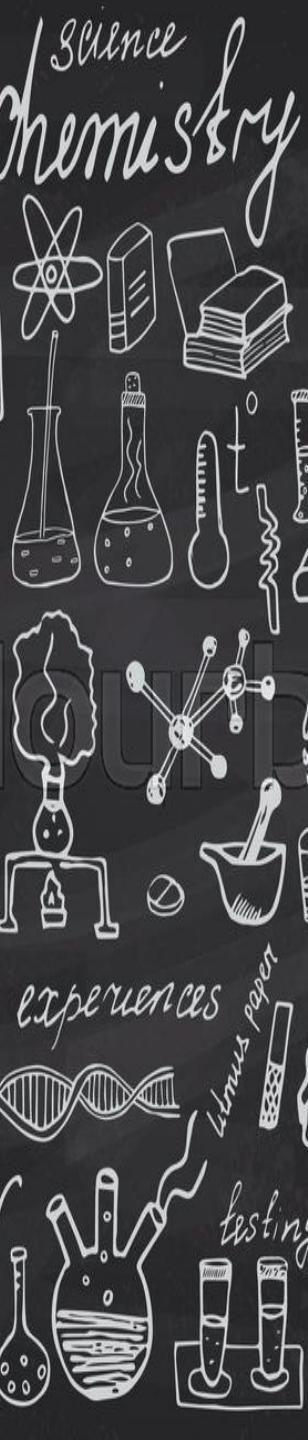


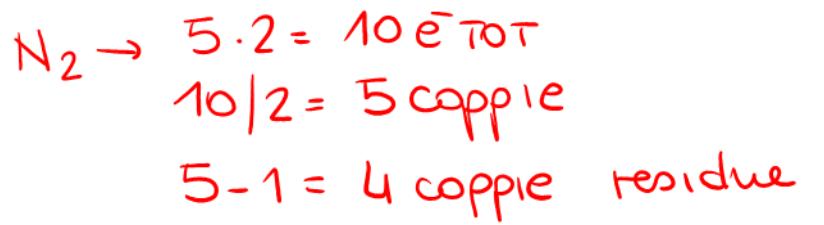


ESERCIZI

4. Usate la teoria VSEPR per prevedere le forme geometriche delle seguenti molecole ed ioni:

- a) N_2 → LINEARE
- b) HCN → LINEARE
- c) NH_4^+ → TETRAEDRICA
- d) NO_3^- → TRIGONALE PLANARE
- e) NSF → PIEGATA

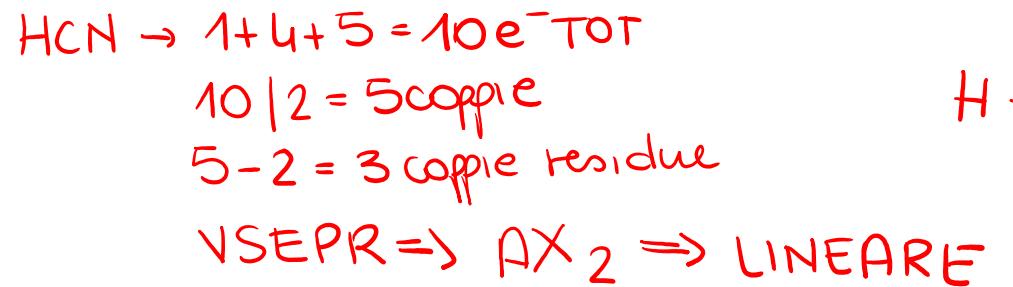




$|N \equiv N|$

$$CF(N) = 5 - 2 - 3 = 0$$

VSEPR $\rightarrow A-X \rightarrow$ Lineare

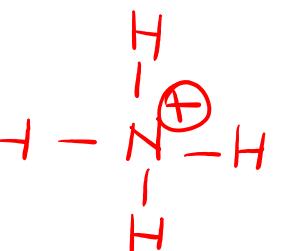
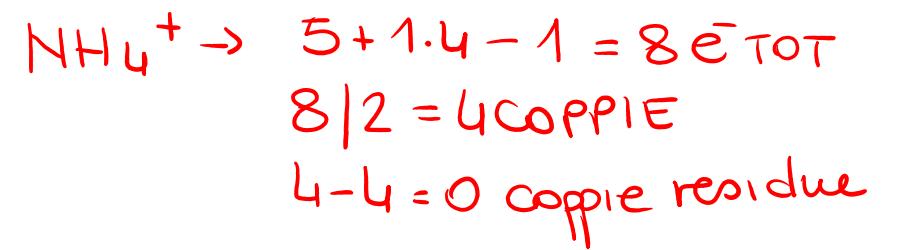


$H-C \equiv N|$

$$CF(H) = 1 - 0 - 1 = 0$$

$$CF(C) = 4 - 0 - 4 = 0$$

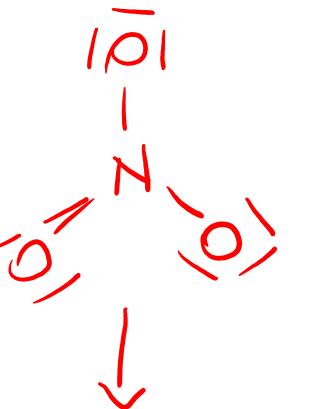
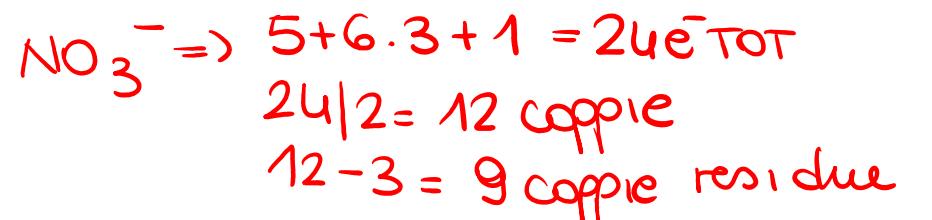
$$CF(N) = 5 - 2 - 3 = 0$$



$$CF(H) = 1 - 0 - 1 = 0$$

$$CF(N) = 5 - 0 - 4 = 1$$

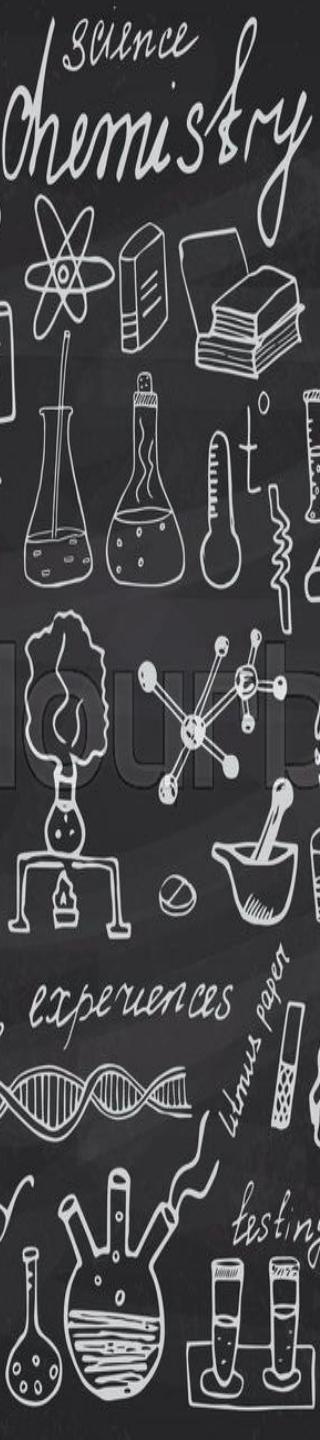
VSEPR $\Rightarrow AX_4 \rightarrow$ Tetraedrice

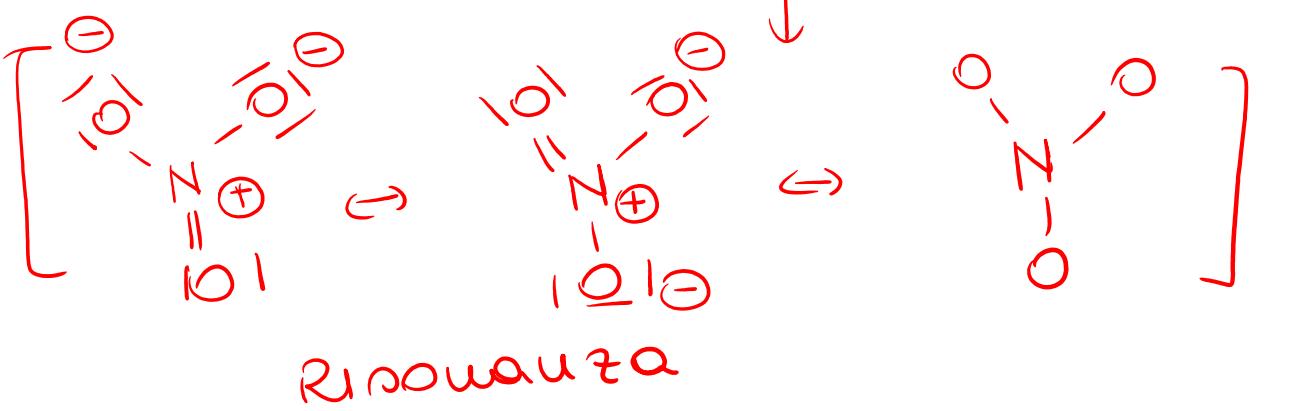


$$CF(N) = 5 - 0 - 4 = +1$$

$$CF(O)_1 = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$CF(O)_2 = 6 - 6 - 1 = -1$$





VSEPR \rightarrow $AX_3 \rightarrow$ TRIGONALE PIANA

$$NSF \rightarrow 5 + 6 + 7 = 18 e^-_{TOT}$$

$$18/2 = 9 \text{ coppie}$$

$$9 - 2 = 7 \text{ coppie residue}$$

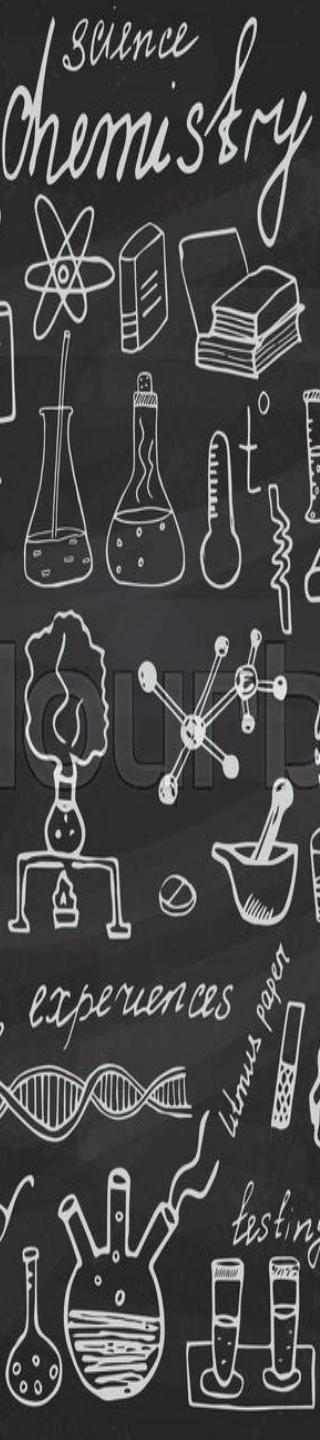
$$\bar{N} = \bar{S} - \underline{\bar{F}}$$

$$CF(N) = 5 - 2 - 3 = 0$$

$$CF(S) = 6 - 2 - 4 = 0$$

$$CF(F) = 7 - 6 - 1 = 0$$

VSEPR \rightarrow $AX_2E_1 \rightarrow$ PIEGATA

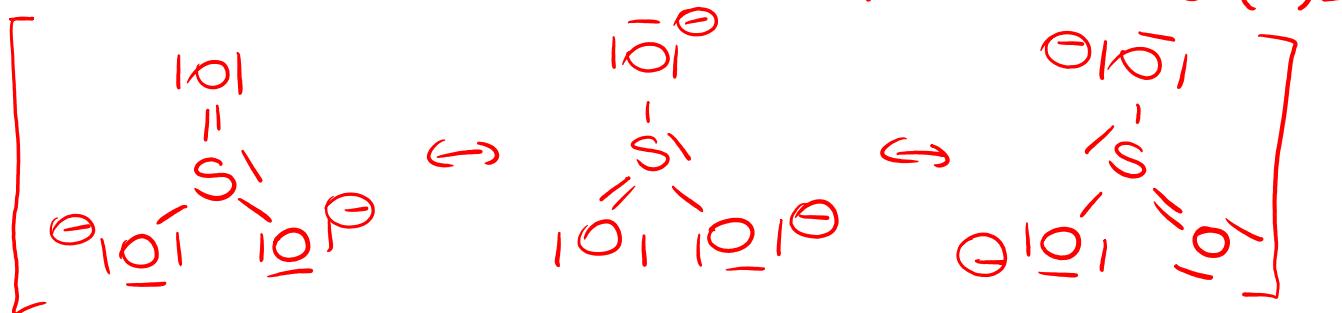
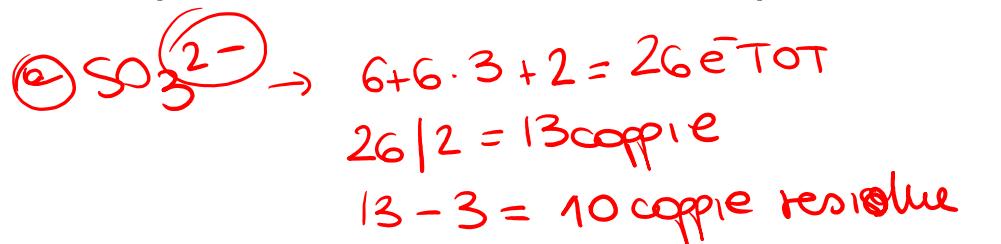


ESERCIZI

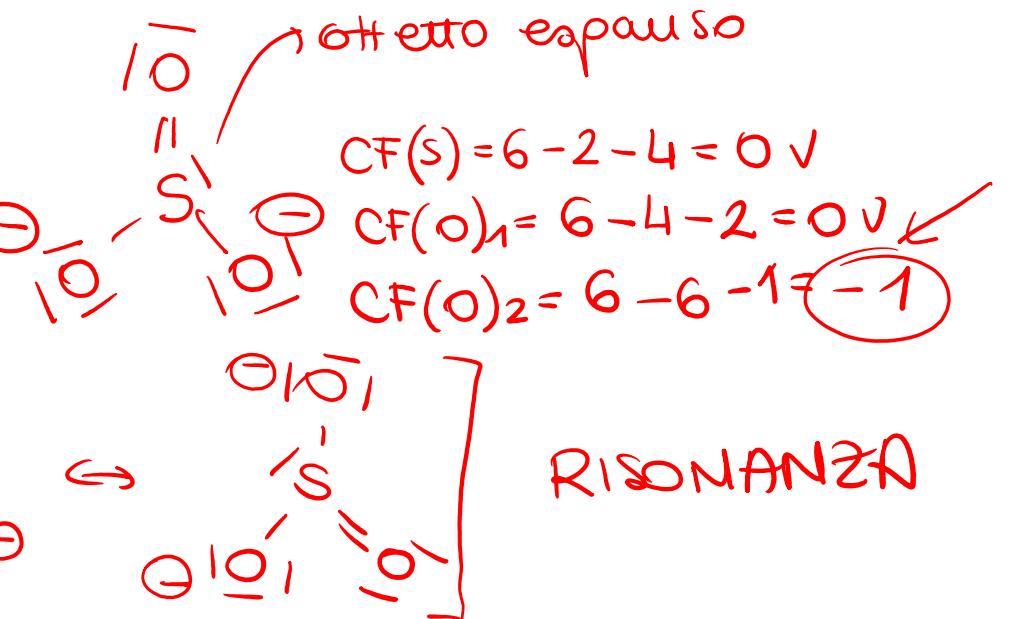
5. Uno dei seguenti ioni ha una forma *trigonale planare*:

- ~~a) SO_3^{2-}~~ NO
~~b) PO_4^{3-}~~ NO
~~c) PF_6^-~~ NO
d) CO_3^{2-} SI 

Qual è questo ione? Commentare la risposta.

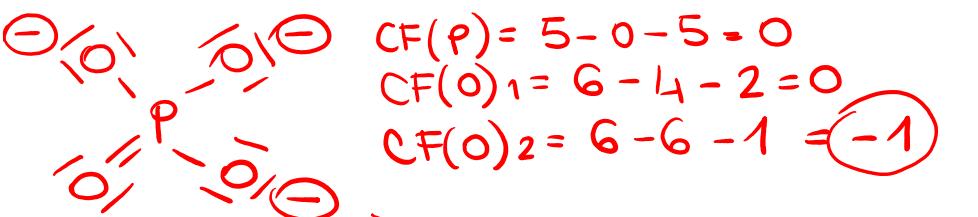


$\text{AX}_3\text{E}_1 \rightarrow$ Trigonale pyramidale



$$\text{PO}_4^{3-} \rightarrow 5 + 6 \cdot 4 + 3 = 32 e^- \text{TOT}$$

$32/2 = 16$ coppie $\rightarrow 16 - 4 = 12$ coppie residue



4 forme di risonanza

$\text{AX}_4 \rightarrow$ Tetraedrica

$$\text{PF}_6^- \rightarrow 5 + 7 \cdot 6 + 1 = 48 e^- \text{TOT}$$

$48/2 = 24$ coppie

$24 - 6 = 18$ coppie residue

$\text{AX}_6 \rightarrow$ OTTAEDRICA

$$\text{CO}_3^2- \rightarrow 4 + 6 \cdot 3 + 2 = 24 e^- \text{TOT}$$

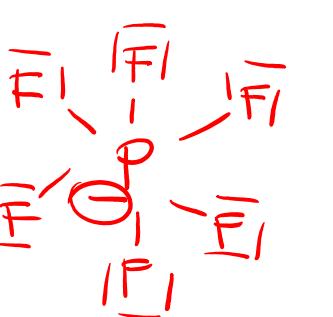
$24/2 = 12$ coppie

$12 - 3 = 9$ coppie residue

$$\text{CF}(C) = 4 - 4 = 0 \vee \text{CF}(O)_1 = 6 - 4 - 2 = 0$$

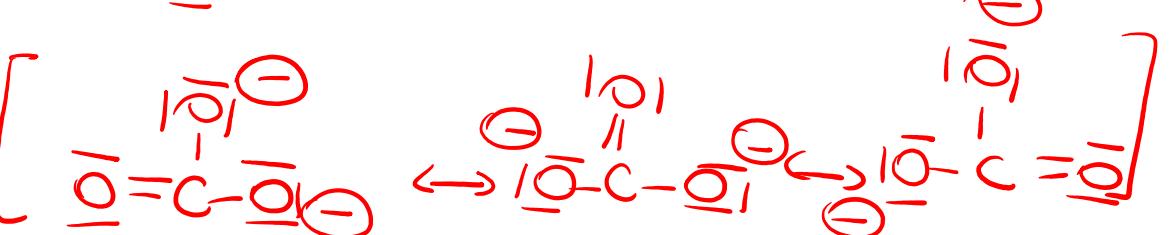
$$\text{CF}(O)_2 = 6 - 6 - 1 = -1$$

$\text{AX}_3 \rightarrow$ TRIGONALE PLANARE



$$\text{CF}(P) = 5 - 6 = -1$$

$$\text{CF}(F) = 7 - 6 - 1 = 0$$

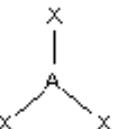
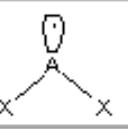
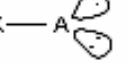
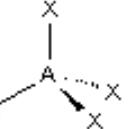
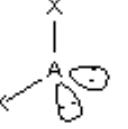
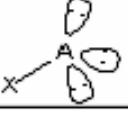


RISONANZA



Science Chemistry



Total Domains	Generic Formula	Picture	Bonded Atoms	Lone Pairs	Molecular Shape	Electron Geometry	Example	Hybridization	Bond Angles
1	AX	A—X	1	0	Linear	Linear	H ₂	s	180
2	AX ₂	X—A—X	2	0	Linear	Linear	CO ₂	sp	180
	AXE	(O) A—X	1	1	Linear	Linear	CN ⁻		
3	AX ₃		3	0	Trigonal planar	Trigonal planar	AlBr ₃	sp ²	120
	AX ₂ E		2	1	Bent	Trigonal planar	SnCl ₂		
	AXE ₂		1	2	Linear	Trigonal planar	O ₂		
4	AX ₄		4	0	Tetrahedral	Tetrahedral	SiCl ₄	sp ³	109.5
	AX ₃ E		3	1	Trigonal pyramid	Tetrahedral	PH ₃		
	AX ₂ E ₂		2	2	Bent	Tetrahedral	SeBr ₂		
	AXE ₃		1	3	Linear	Tetrahedral	Cl ₂		

Per domande e chiarimenti:

laura2.riva@polimi.it



POLITECNICO
MILANO 1863