

Esercitazione 5 - Squadra 1 (Chimica e Materiali) 16/10/2020

5.1 Disporre i seguenti composti ionici in ordine crescente di energia reticolare: LiF, CaS, KCl, MgO, BN.

L'energia reticolare è la quantità di energia rilasciata quando degli ioni passano da uno stato gassoso isolato ad un reticolo ionico. In generale tale energia si può stimare valutando la carica degli ioni coinvolti e la distanza a cui si trovano

$$E_{\text{ret}} \sim Q_1 Q_2 / d$$

Si deve quindi considerare la carica degli ioni e la loro distanza. Considerando i composti dati, si sa che LiF è formato da cationi Li^+ e anioni F^- . Quindi $Q_1 Q_2 = | +1 | * | -1 | = 1$. Per tutti:

$$\text{LiF} \quad | +1 | * | -1 | = 1$$

$$\text{CaS} \quad | +2 | * | -2 | = 4$$

$$\text{KCl} \quad | +1 | * | -3 | = 1$$

$$\text{MgO} \quad | +2 | * | -2 | = 4$$

$$\text{BN} \quad | +3 | * | -3 | = 9$$

L'altra grandezza da considerare è la distanza tra gli ioni. Questa però è meno influente. Per esempio, la distanza tra gli ioni in LiF è 2,04 Å mentre in KCl è 3,15 Å, un fattore di solo ca. 1,5. Se gli ioni si trovano più in alto nella tavola periodica, i raggi ionici sono più piccoli e quindi anche la distanza d che si può stimare come la somma dei raggi. Se la distanza d è più corta l'energia è più grande seguendo l'equazione sopra riportata. Quindi l'energia per LiF è più alta come per KCl, e più alta per MgO che per CaS. Quindi si può ordinare i sali prima per la carica degli ioni e poi per la distanza:

L'ordine corretto è quindi: $\text{CsI} < \text{LiF} < \text{CaS} < \text{MgO} < \text{BN}$.

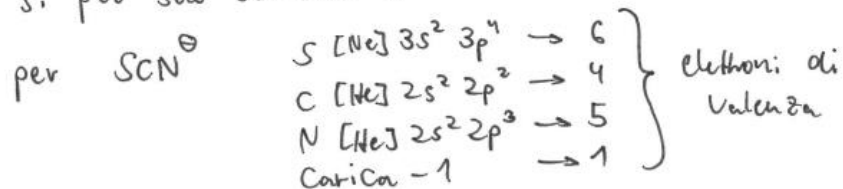
5.2 Determinare le strutture di Lewis per le seguenti molecole: LiSCN (lineare), P_4 (tetraedro), C_6F_6 (anello simmetrico di carboni), NO_3^- e KrF_2 .

• Li SCN

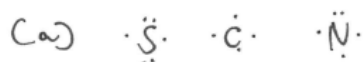
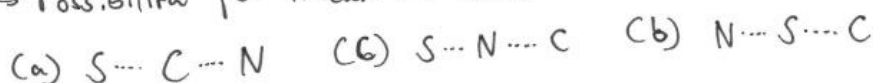
→ non è una molecola ma un sale



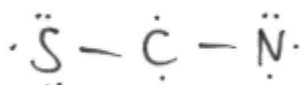
↓
per un singolo atomo/ione
si può solo scrivere il simbolo



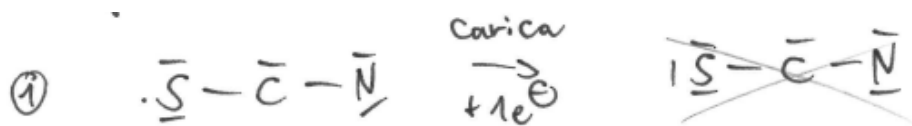
→ Possibilità per lineari molecole



Sappiamo che dovrebbe essere almeno un legame



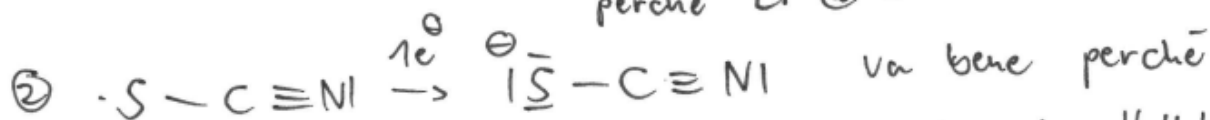
Poi ci sono 5 opzioni per distribuire gli elettroni rimanenti:



↳ questo non è possibile perché

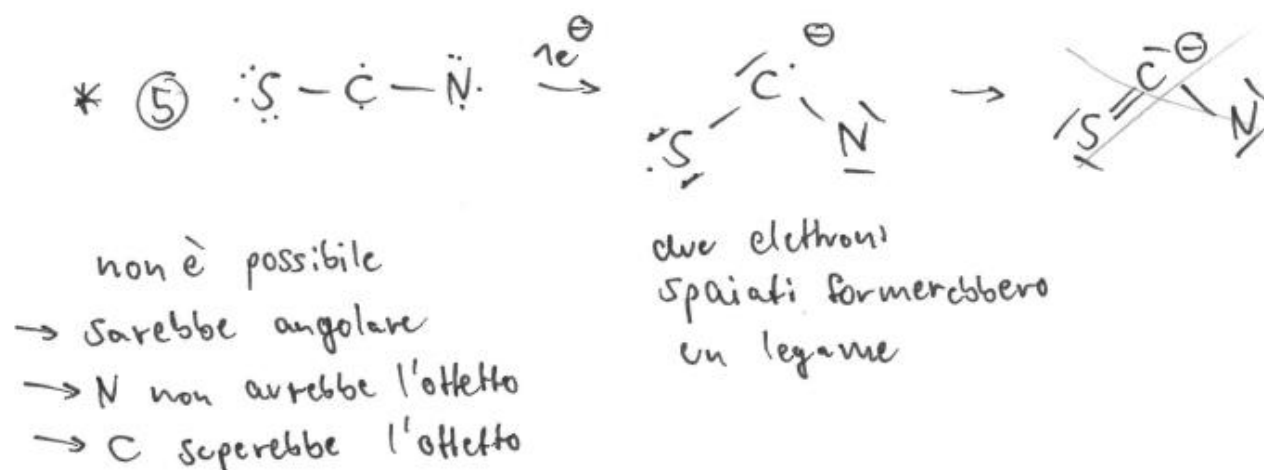
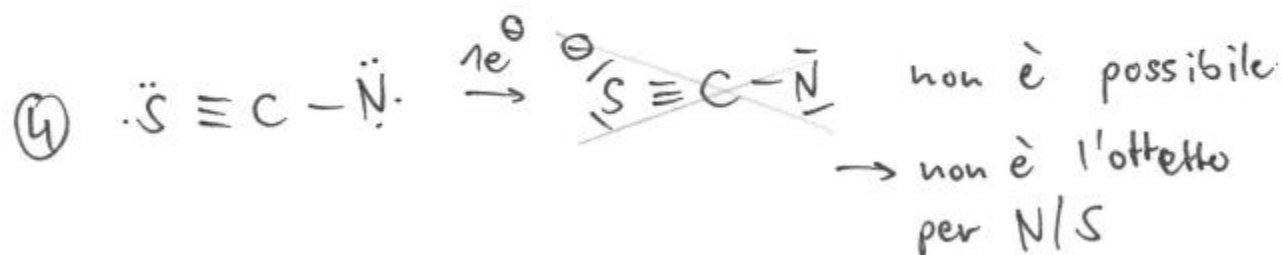
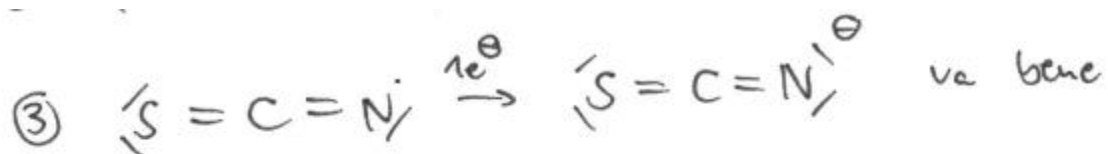
→ C/N non avrebbero l'ottetto

→ molecola sarebbe angolata (VSEPR)
perché LP @ C

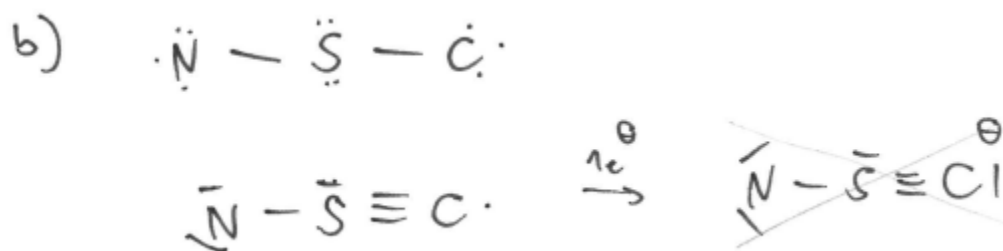


→ ogni atomo ha l'ottetto

→ sarebbe lineare

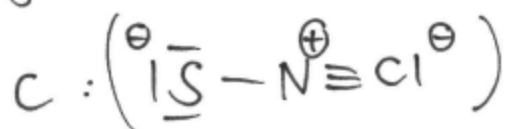
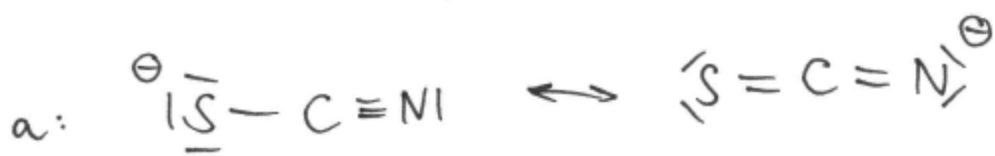
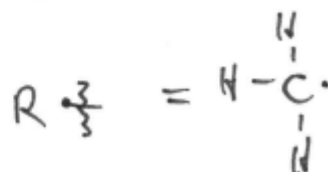
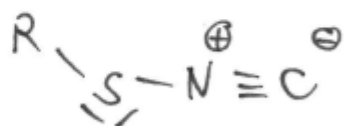
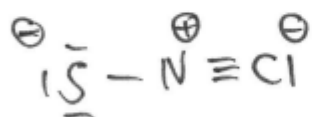
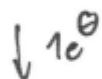
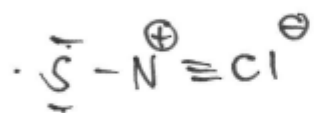
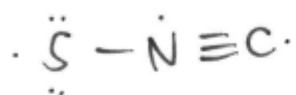
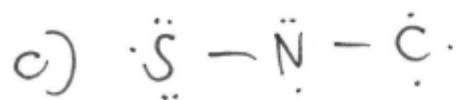


Poi per la struttura b:



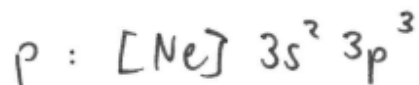
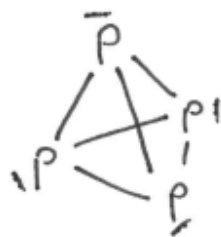
C'è solo questa possibilità per avere un ottetto sul carbonio. Poi mancano però elettroni sull'azoto mentre zolfo ha troppi.

Per la struttura c, c'è solo questa possibilità:



In fatti esistono molecole con un resto organico che sono però meno stabile per la carica formale. Insomma:

• P_4

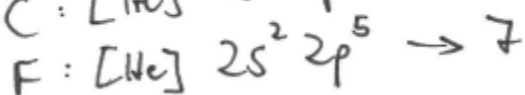
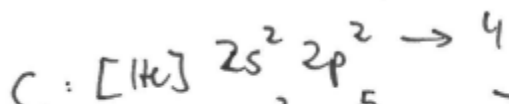


Sappiamo che dovrebbe essere almeno un legame tra gli atomi

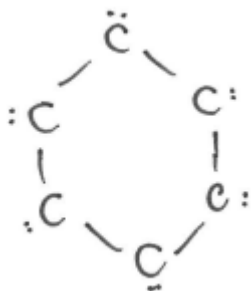
→ ogni P fa tre legami: (tetraedro)

→ per gli $2 e^-$ rimasti → LP

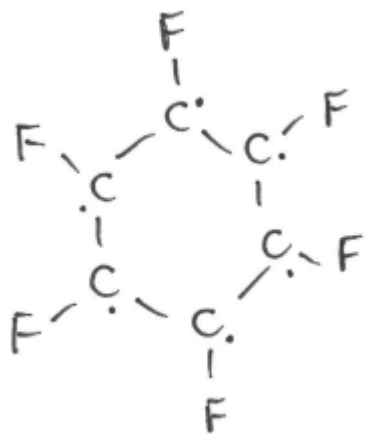
• C_6F_6



Sappiamo che è un anello



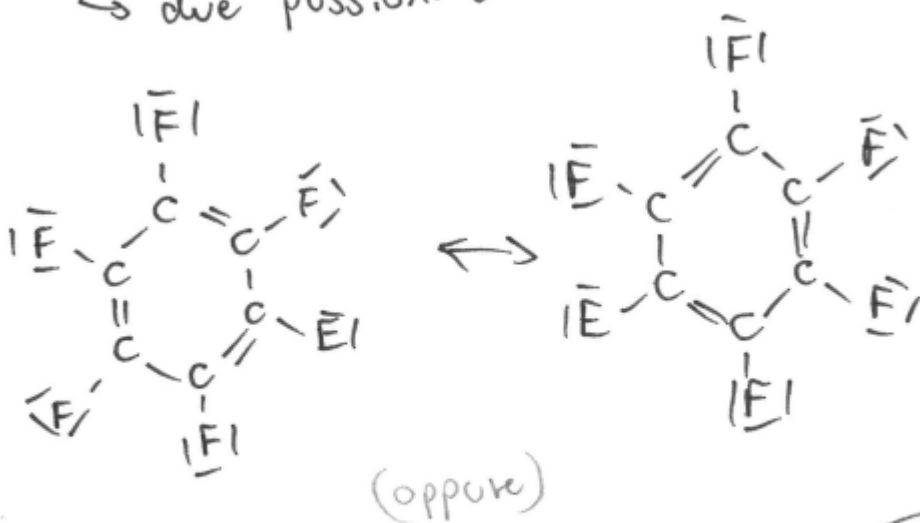
→ visto che sono $G \times F$
che fanno 1 legame
modo più semplice è:



→ gli elettroni
che sono

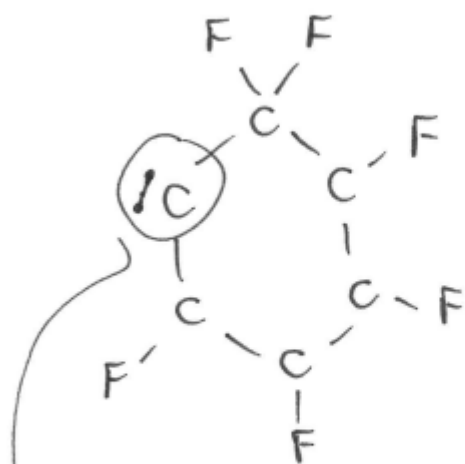
rimasti formano
legami → radicali molto reattivi

↳ due possibilità:

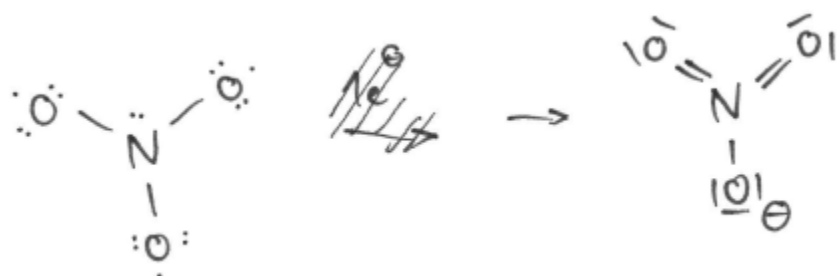
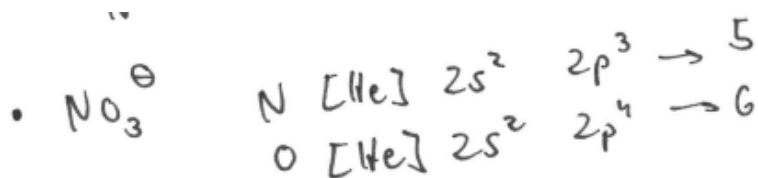


Strutture di risonanza

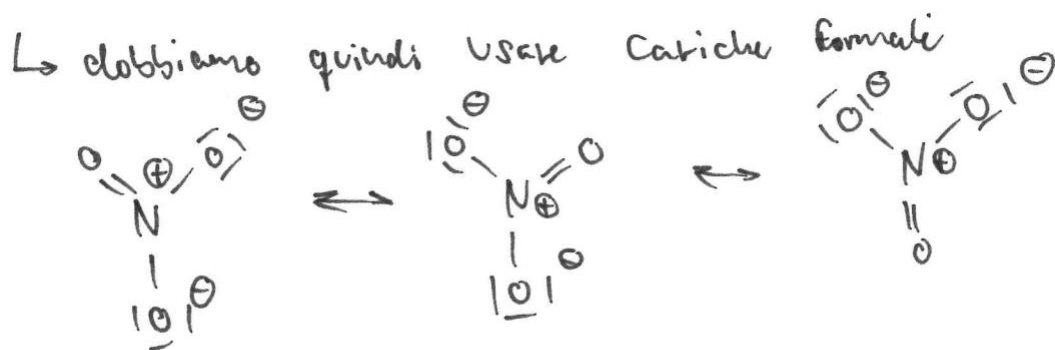
→ altra opzione es.



non sarebbe l'ottetto per questo

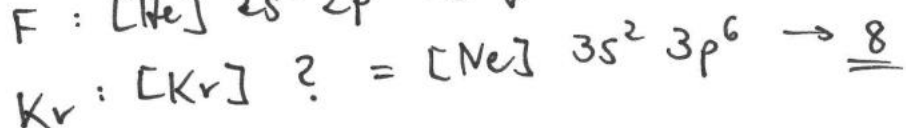
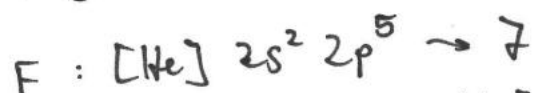


Non va bene, perché N avrebbe più di ottetto. Elementi del secondo periodo non devono mai avere più! Ci



Strutture di risonanza

• KrF_2



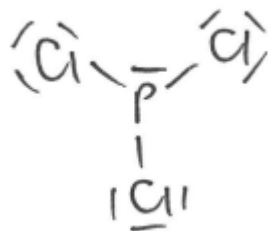
5.3 Determinare la geometria dell'assetto elettronico e molecolare secondo la VSEPR delle seguenti specie:

PCl_3 , SiF_4 , BCl_3 , PCl_5 , O_3 .

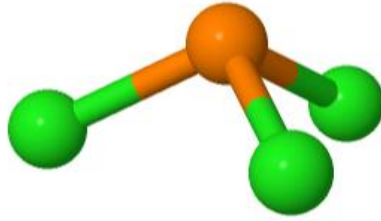
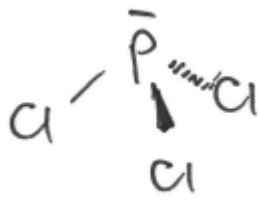
Ci sono siti per visualizzare le strutture molecolari:

https://www.mn-am.com/online_demos/corina_demo_interactive

È essenziale avere la corretta struttura di Lewis:

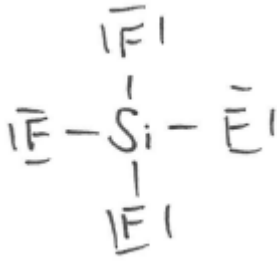


In questo caso, basta considerare P, perché gli atomi Cl sono solo collegati ad un altro atomo. P (A) è collegato a tre atomi (X). Inoltre, c'è un doppio singolare (E), quindi AX_3E . Siccome la somma dei legami è 4 ($3 \cdot \text{X} + \text{E}$), la struttura viene dal tetraedro. C'è una coppia solitaria quindi è piramide trigonale:

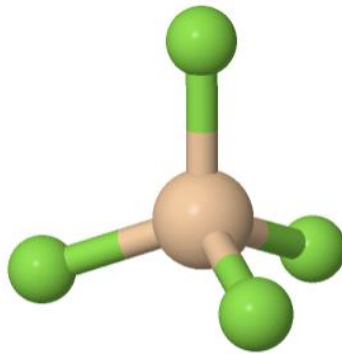
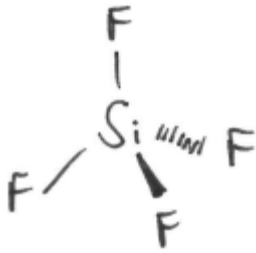


oppure

SiF₄:

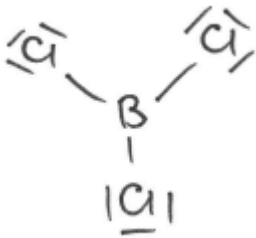


quindi AX₄, quindi: Tetraedro

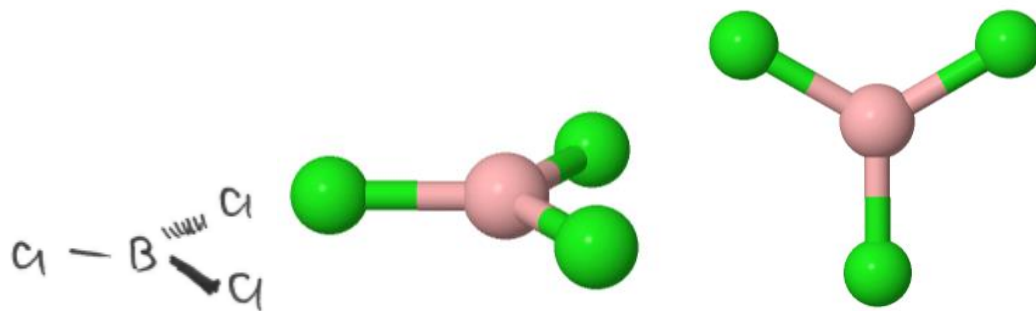


oppure

BCl₃:

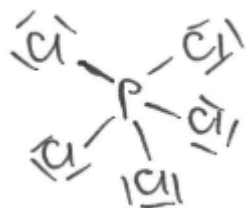


quindi AX₃, quindi: trigonale planare

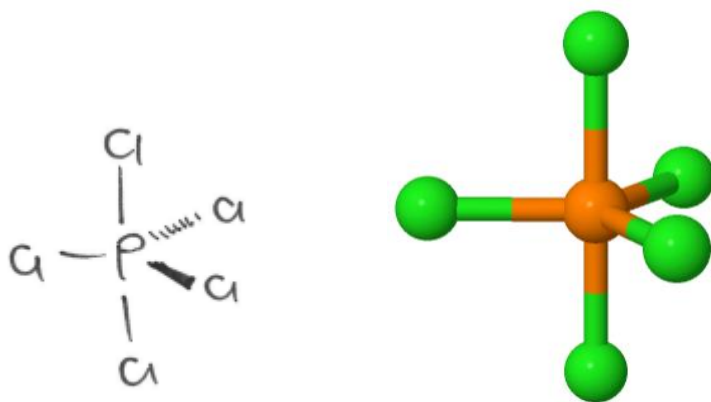


(da sopra)

PCl_3 :

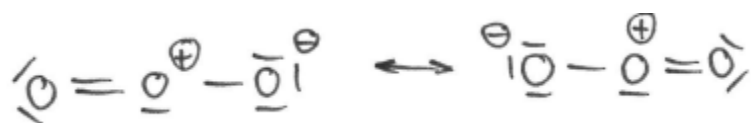


quindi AX_5 , quindi: trigonale bipiramide



oppure

O_3 :



quindi AX_2E , quindi: angolare

