



LA CARICA FORMALE

Di Maurizio Prof Romani

LA CARICA FORMALE

- La carica formale CF è la carica assegnata a un atomo in una molecola o in uno ione poliatomico, assumendo che gli elettroni di legame siano equamente condivisi indipendentemente dall'elettronegatività di ciascun atomo.
- E' quindi diversa dal numero di ossidazione, che tiene conto delle elettronegatività degli atomi costituenti la molecola.
- Nel caso che in una molecola o uno ione poliatomico possano essere possibili diverse geometrie, rappresentate da diverse strutture di Lewis, la carica formale è utile per stabilire quale fra queste strutture sia la più probabile.
- La carica formale di un qualsiasi atomo in una molecola può essere calcolata con la seguente equazione:

$$CF = V - N - B$$

V è il numero di elettroni di valenza dell'atomo isolato nello stato fondamentale

N è il numero degli elettroni di valenza di non legame dell'atomo nella molecola

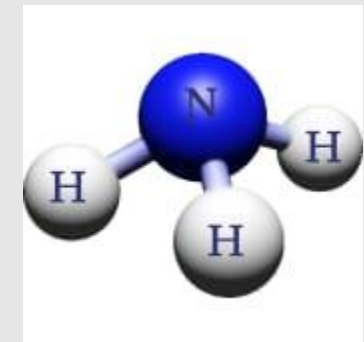
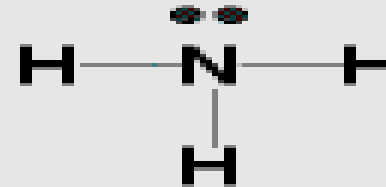
B è il numero totale dei legami (coppia di elettroni)

In una molecola neutra la Carica Formale complessiva deve essere uguale a zero,
mentre in uno ione poliatomico la Carica Formale complessiva deve essere pari alla carica dello ione.

Esempio:

Calcoliamo la Carica Formale degli atomi dell'ammoniaca,
che essendo una molecola neutra dovrà avere CF totale = 0.

La sua struttura di Lewis è rappresentata in figura:



L'**azoto** ha

5 elettroni di valenza (V),

2 elettroni solitari (N)

e fa 3 legami (B), quindi: $CF = 5 - 2 - 3 = 0$

L'**idrogeno**

ha 1 elettrone di valenza,

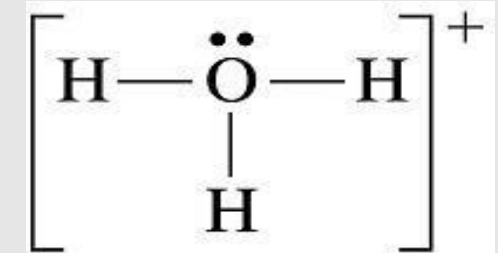
0 elettroni solitari

e fa 1 legame, quindi: $CF = 1 - 0 - 1 = 0$

La struttura di Lewis da noi ipotizzata è corretta.

Secondo esempio
consideriamo lo ione H_3O^+ ,
essendo uno ione poliatomico dovrà avere CF totale = +1.

La sua struttura di Lewis è rappresentata in figura:



L'ossigeno

ha 6 elettroni di valenza,

2 elettroni solitari

e fa 3 legami,

$$\text{quindi CF} = 6 - 2 - 3 = +1$$

L'idrogeno

ha 1 elettrone di valenza,

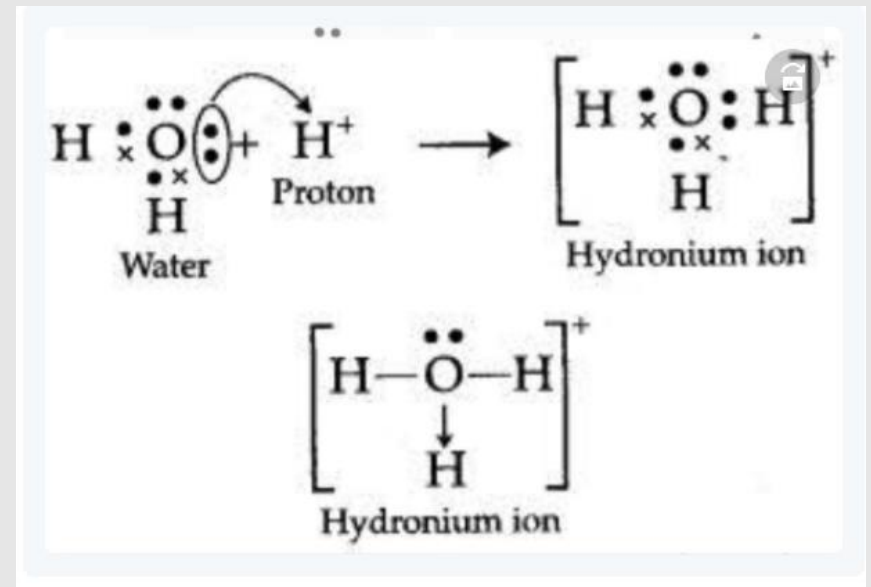
0 elettroni solitari

e fa 1 legame,

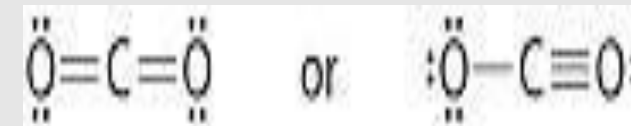
$$\text{quindi: CF} = 1 - 0 - 1 = 0$$

La carica formale dello ione poliatomico è quindi +1, che coincide con la carica dello ione poliatomico:

la struttura di Lewis ipotizzata è corretta.



per la molecola di **CO₂** le possibili strutture di Lewis sono due:



Per identificare quale delle due strutture sia più rappresentativa calcoliamo per entrambe la carica formale:

- Per identificare quale delle due strutture sia più rappresentativa calcoliamo per entrambe la carica formale:

prima struttura:

$$\text{CF} = \text{V} - \text{N} - \text{B}$$

$$\text{CF dell'ossigeno} = 6 - 4 - 2 = 0$$

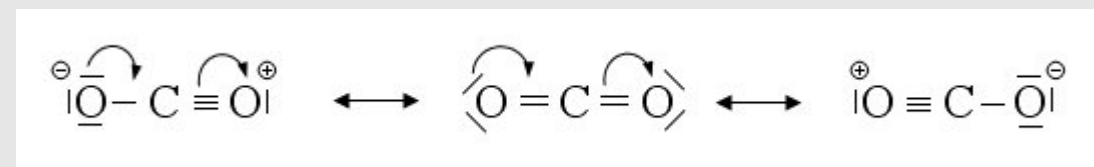
$$\text{CF del carbonio} = 4 - 0 - 4 = 0$$

seconda struttura:

$$\text{CF dell'ossigeno a sinistra} = 6 - 6 - 1 = -1$$

$$\text{CF dell'ossigeno a destra} = 6 - 2 - 3 = +1$$

$$\text{CF del carbonio} = 4 - 0 - 4 = 0$$



Si noti che la CF in entrambe le strutture è pari a zero, a conferma che CO₂ è una molecola neutra.

Ma quale delle 2 strutture sarà la più probabile?

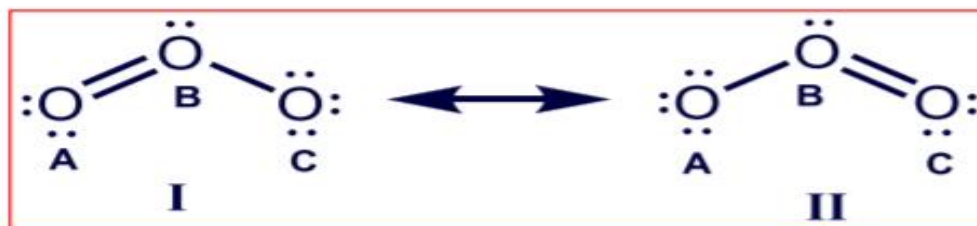
La prima struttura è simmetrica, quindi più stabile,
nella seconda struttura uno dei 2 atomi di ossigeno, molto più elettronegativo del carbonio, avrebbe CF = +1,
mentre il carbonio avrebbe CF = 0.

Quindi la seconda struttura non è corretta.

Esempio: O_3 – Carica formale

$$Q_F = N_A - N_{LP} - \frac{1}{2} N_{BP}$$

- N_A numero di elettroni di valenza;
- N_{LP} numero di elettroni delle coppie non condivise
- N_{BP} numero di elettroni delle coppie di legame



$$O_A [6 - 4 - \frac{1}{2}(4)] = 0$$

$$O_B [6 - 2 - \frac{1}{2}(6)] = +1$$

$$O_C [6 - 6 - \frac{1}{2}(2)] = -1$$

$$O_A [6 - 6 - \frac{1}{2}(2)] = -1$$

$$O_B [6 - 2 - \frac{1}{2}(6)] = +1$$

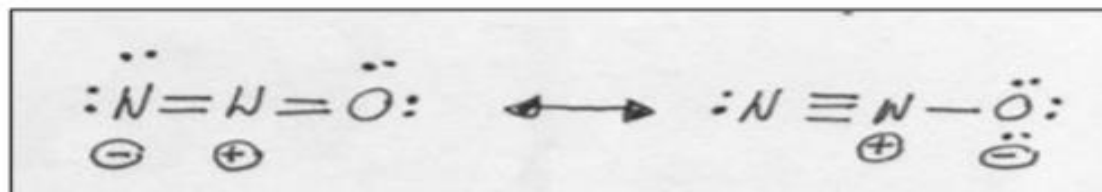
$$O_C [6 - 4 - \frac{1}{2}(4)] = 0$$

- Per entrambe le forme di risonanza la carica formale totale è zero poichè O_3 è una molecola neutra.

Carica formale – Forma di risonanza più importante

- Le cariche formali più piccole (siano esse positive o negative) sono preferibili a quelle più grandi.
- Non sono desiderabili cariche simili su atomi adiacenti.
- Una carica formale più negativa dovrebbe risiedere su un atomo più elettronegativo.

Esempio:



L'ossigeno è più elettronegativo dell'azoto.

La seconda formula di struttura è più importante della prima