

## Composti ionici binari che contengono un metallo che forma cationi con diversa carica (con più cariche possibili)

- Prima di tutto si parte con la radice del nome dell'anione
- Si aggiunge la desinenza -uro
- Si mette il nome del catione metallico specificando la carica del metallo

Nella nomenclatura tradizionale

- per lo ione con carica/n.o. più bassa/o, suffisso -oso dopo la radice del nome del metallo
- per lo ione con carica/n.o. più alta/o, suffisso -ico dopo la radice del nome del metallo

Prendiamo in considerazione il ferro

I suoi possibili stati ossidativi sono 2 :

$\text{Fe}^{2+}$  = ione ferro(II) (n.o. +2) carica più bassa

$\text{Fe}^{3+}$  = ione ferro(III) (n.o. +3) carica più alta

Il corrispettivo del nome tradizionale sarebbe

$\text{Fe}^{2+}$  = ferroso (n.o. +2) carica più bassa

$\text{Fe}^{3+}$  = ferrico (n.o. +3) carica più alta

I rispettivi composti ionici binari che questi ioni formano con il cloro sono:

$\text{FeCl}_2$  = cloruro di ferro(II)—nome IUPAC

oppure cloruro ferroso —nome tradizionale

$\text{FeCl}_3$  = cloruro di ferro(III) —nome IUPAC

oppure cloruro ferrico —nome tradizionale

| metallo  | Simbolo ione       | S.O. | nome         | Nome tradizionale |
|----------|--------------------|------|--------------|-------------------|
| Cromo    | $\text{Cr}^{2+}$   | +2   | Cromo(II)    | Cromoso           |
|          | $\text{Cr}^{3+}$   | +3   | Cromo(III)   | Cromico           |
| Ferro    | $\text{Fe}^{2+}$   | +2   | Ferro(II)    | Ferroso           |
|          | $\text{Fe}^{3+}$   | +3   | Ferro(III)   | Ferrico           |
| Cobalto  | $\text{Co}^{2+}$   | +2   | Cobalto(II)  | Cobaltoso         |
|          | $\text{Co}^{3+}$   | +3   | Cobalto(III) | Cobaltico         |
| Rame     | $\text{Cu}^+$      | +1   | Rame(I)      | Rameoso           |
|          | $\text{Cu}^{2+}$   | +2   | Rame(II)     | Rameico           |
| Stagno   | $\text{Sn}^{2+}$   | +2   | Stagno(II)   | Stannoso          |
|          | $\text{Sn}^{4+}$   | +4   | Stagno(IV)   | Stannico          |
| Mercurio | $\text{Hg}_2^{2+}$ | +1   | Mercurio(I)  | Mercuroso         |
|          | $\text{Hg}^{2+}$   | +2   | Mercurio(II) | Mercurico         |
| Piombo   | $\text{Pb}^{2+}$   | +2   | Piombo(II)   | Piomboso          |
|          | $\text{Pb}^{4+}$   | +4   | Piombo(IV)   | Piombico          |

Nella tabella abbiamo molti casi con diversi stati di carica

Oltre ai composti biatomici possiamo avere composti poliatomici:

I composti ionici che contengono uno ione poliatomico sono denominati allo stesso modo dei composti ionici binari, utilizzando il nome dello ione poliatomico.

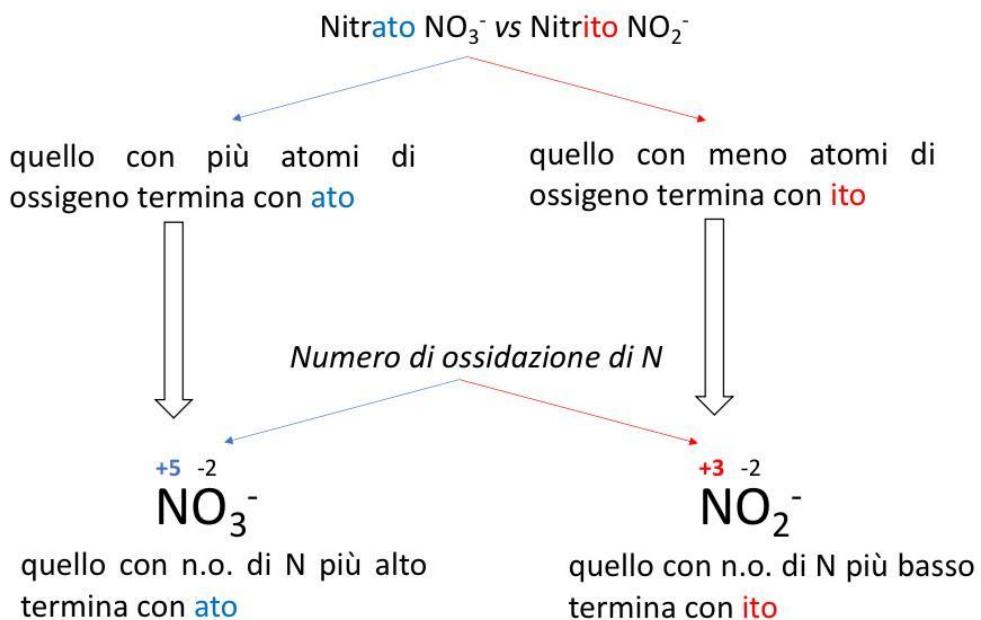
la maggior parte degli ioni

poliatomici sono ossianioni: anioni che contengono ossigeno e un altro elemento.

Per assegnare il nome

- Si parte da qual'è il nome poliatomico

Possiamo avere 2 stadi



In questo caso i nomi usati sono

- Nitrito, questa desinenza viene nello stadio in cui il n.ox è più basso
- Nitrato, questa desinenza viene usata nello stadio in cui il n.ox è più alto

Altra particolarità è il carbonato e l'idrogeno carbonato

Qui si parte dal fatto che il carbonato ha una struttura  $\text{CO}_3^{2-}$

Significa che è doppiamente carica negativamente e ha 3 ossigeni

Il suo composto neutro sarebbe  $\text{H}_2\text{CO}_3$

Se vengono sottratti 2 idrogeni abbiamo  $\text{CO}_3^{2-}$

Possiamo trovare anche il composto a cui è stato sottratto un solo idrogeno cioè  $\text{HCO}_3^-$

Discorso analogo per il fosfato

Si parte dall'acido fosforico: se vengono tolti 3 idrogeni abbiamo lo ione fosfato;

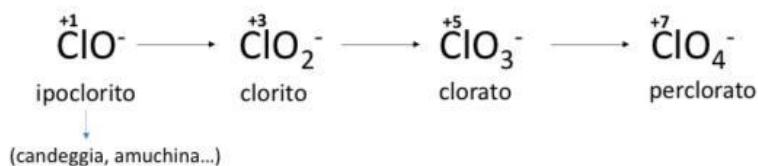
Aggiungendo un idrogeno alla volta abbiamo l'idrogeno fosfato, il didrogeno fosfato ecc..

Per quanto riguarda la nomenclatura del cloro quando si trova in composti poliatomici

Abbiamo diverse possibilità :

- Acido ipocloroso (suffisso -oso + prefisso ipo)
- Acido cloroso (suffisso -oso)
- Acido clorico (suffisso -ico)
- Acido perclorico (suffisso -ico + prefisso -per)

### Stadi di ossidazione del Cl negli ossianioni



Altri alogeni formano serie simili con nomi simili. Pertanto  $\text{IO}_3^-$  è lo ione **iodato** e  $\text{BrO}_3^-$  è lo ione **bromato**.

Questo tipo di nomenclatura è disponibile per tutti gli alogeni

#### Esempio

Quando l'azoto si lega all'ossigeno forma 2 composti

- Nitrito
- Nitrato

La desinenza viene dai corrispettivi acidi che sarebbero

- Acido nitroso  $\text{HNO}_2$
- Acido nitrico  $\text{HNO}_3$

Ciò che cambia tra i 2 è il numero di ossidazione

Alcuni composti ionici presentano nella loro struttura dell'acqua; questo dipende com'è organizzato il reticolo cristallino;

Si tratta di acqua strutturale caratteristica dei composti ionici;

siccome sono un numero di molecole fisse, bisogna indicare il numero di molecole usando vari prefissi:

#### Prefissi:

|           |           |
|-----------|-----------|
| Mono = 1  | Esa = 6   |
| Di = 2    | Epta = 7  |
| Tri = 3   | Otta = 8  |
| Tetra = 4 | Nona = 9  |
| Penta = 5 | Deca = 10 |

per esempio, nel cloruro di cobalto

Abbiamo 6 molecole d'acqua  $\rightarrow$  cloruro di cobalto (II) **esaidrato**

Nel sulfato di rame

abbiamo 5 molecole d'acqua  $\rightarrow$  sulfato di rame (II) **pentaidrato**



## COMPOSTI MOLECOLARI

Prima di tutto bisogna capire quando un composto è molecolare. A differenza dei composti ionici che avevano un metallo e un non metallo, qui abbiamo due o più non metalli. L'idrogeno, insieme al boro, non è considerato metallo. Gli altri elementi del primo e secondo periodo invece sì.

Se andiamo a legare l'idrogeno con l'ossigeno, vediamo che la struttura è  $H_2O$ .

L'elemento a carattere metallico viene messo prima del non metallo. L'ammoniaca invece è  $NH_3$ .

### Scrivere la formula di un composto molecolare

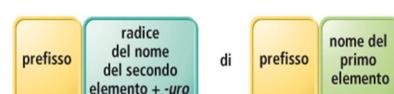
- 1) Il primo elemento è quello a carattere più metallico (a sinistra e in basso nella tavola periodica) es.  $H_2O$
- 2) Se i due elementi si trovano nello stesso gruppo, l'elemento nel periodo più in basso va scritto per primo.

### Prefissi

Il prefisso non si mette sempre, ma solo dagli atomi binari in poi.

Es. 1)  $NO_2$  diossido di azoto

2)  $NO_2$  monossido di diazoto



| Prefissi: |           |
|-----------|-----------|
| Mono = 1  | Esa = 6   |
| Di = 2    | Epta = 7  |
| Tri = 3   | Otta = 8  |
| Tetra = 4 | Nona = 9  |
| Penta = 5 | Deca = 10 |



Gli ossidi: basici e acidi

Abbiamo due tipi di ossido: ossido basico e ossido acido (o anidridi per la nomenclatura tradizionale).

## OSSIDI BASICI



L'ossido è **basico** quando l'ossigeno è legato a un metallo.

Nomenclatura: ossido di *nome del catione*.

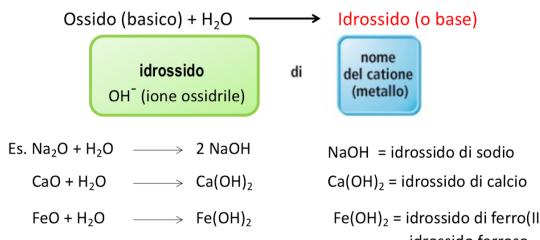
Esempi:

$Li_2O \rightarrow$  ossido di Litio  
 $Na_2O \rightarrow$  ossido di sodio  
 $K_2O \rightarrow$  ossido di potassio

$MgO \rightarrow$  ossido di magnesio  
 $CaO \rightarrow$  ossido di calcio  
 $BaO \rightarrow$  ossido di bario  
 $Al_2O_3 \rightarrow$  ossido di alluminio

Perché si definiscono ossidi basici? Se mettiamo un **ossido basico** in **acqua** si forma un idrossido. Un idrossido si dissocia e si creano metallo e **ioni idrossido** e il ph diventa basico, cioè aumenta rispetto al ph ideale di 7.

## IDROSSIDI



Gli idrossidi sono composti ionici ternari, costituiti da un catione metallico, O e H  
 Nella formula chimica, lo ione OH<sup>-</sup> (ossidrile) va scritto dopo il metallo

La differenza di elettronegatività è più bassa rispetto agli ossidi basici, quindi si parla di condivisione degli elettroni. Qui bisogna indicare i prefissi sia per l'ossido che per gli atomi di metallo. Il numero di ossidazione dell'ossigeno è sempre -2 in questi casi.

NON Metallo + Ossigeno → Ossido Acido (o Anidride)

Composti moleculari formati mediante **legami covalenti**: modesta differenza di elettronegatività tra gli elementi coinvolti

|          |        |    |          |                             |
|----------|--------|----|----------|-----------------------------|
| prefisso | Ossido | di | prefisso | Nome dell'altro non metallo |
|----------|--------|----|----------|-----------------------------|

Es: SO<sub>2</sub> → diossido di zolfo  
 SO<sub>3</sub> → triossido di zolfo  
 P<sub>2</sub>O<sub>3</sub> → triossido di difosforo  
 P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> → pentossido di difosforo

|                                 |
|---------------------------------|
| Prefissi:                       |
| (Mono = 1)      Esa = 6         |
| Di = 2              Epta = 7    |
| Tri = 3              Ottava = 8 |
| Tetra = 4           Nona = 9    |
| Penta = 5           Deca = 10   |

Oppure, usando la nomenclatura tradizionale...

NON Metallo + Ossigeno → Ossido Acido (o Anidride)

... oppure nomenclatura tradizionale:

|          |  |          |
|----------|--|----------|
| Anidride | Radice del nome del non metallo diverso da O | suffisso |
|----------|--|----------|

+4-2      SO<sub>2</sub>      anidride solfor-**osa**  
 +6-2      SO<sub>3</sub>      anidride solfor-**ica**

|   |
|---|
| Suffissi  |
| - <b>oso</b> per il numero di ossidazione più basso |
| - <b>ico</b> per il numero di ossidazione più alto  |

N.B. Il numero di ossidazione più alto coincide con il numero del gruppo a cui appartiene l'elemento

Lo ione ossidrile ha sempre carica negativa.

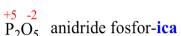
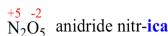
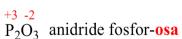
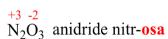
Nomenclatura: idrossido di *nome del catione*.

## OSSIDI ACIDI O ANIDRIDI

La nomenclatura cambia nel caso degli ossidi acidi: l'ossigeno si lega a un non metallo. Il nome tradizionale è anidride.

NON Metallo + Ossigeno  $\longrightarrow$  Ossido Acido (o Anidride)

Altri esempi con nomenclatura tradizionale:



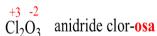
$\begin{array}{c} \text{+2 -2} \\ \text{CO} \end{array}$  monossido di carbonio  $\rightarrow$  Chiamato così anche secondo la nomenclatura tradizionale (non anidride carboniosa)

$\begin{array}{c} \text{+4 -2} \\ \text{CO}_2 \end{array}$  anidride carbon-**ica**

### Casi particolari:



- Nella tavola periodica, per Cl troviamo 4 numeri di ossidazione positivi.



## OSSIACIDI

Anidride + H<sub>2</sub>O  $\longrightarrow$  Ossiacido (con proprietà acide)

**Formula dell'ossiacido:** H<sub>x</sub> non-metallo, O<sub>z</sub>

**Nome dell'ossiacido:** stessi suffissi e prefissi dell'anidride corrispondente perché il numero di ossidazione del non metallo NON cambia



Si può scrivere la formula dell'acido direttamente dal suo nome anche se la reazione anidride + acqua.

Esempio: acido solforico

Contiene gli elementi H, S e O che vanno scritti in questo ordine nella formula. Suffisso -ico => numero più alto di ossidazione => +6.

### Casi particolari

Acido metafosforico, acido pirofosforico, acido ortofosforico. La differenza è in base a quante molecole d'acqua vengono legate all'anidride fosforica.

## IDRACIDI

Sono solo 5 e si formano a partire dagli alogeni. Nomenclatura: acido *nome dell'alogeno* +idrico.

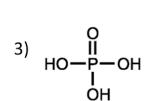
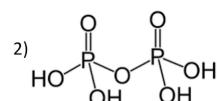
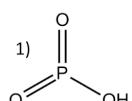
Se inserisco l'ossido acido in acqua si forma un ossiacido.

La differenza dagli idrossidi è prima di tutto nella nomenclatura.

### Caso particolare:

L'anidride fosforica può addizionare una, due o tre molecole di acqua. Gli acidi risultanti mantengono il suffisso -ico nel nome (per indicare che il numero di ossidazione del P resta +5), ma hanno prefissi particolari:

- 1)  $\text{P}_2\text{O}_5 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2 \text{HPO}_3$  acido **meta-fosfor-ico**
- 2)  $\text{P}_2\text{O}_5 + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$  acido **piro-fosfor-ico**
- 3)  $\text{P}_2\text{O}_5 + 3\text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2 \text{H}_3\text{PO}_4$  acido **orto-fosfor-ico**



Gli alogenri hanno numero di ossidazione -1, tranne nello zolfo che è -2.

**HF** → acido fluoridrico

**HCl** → acido cloridrico

**HBr** → acido bromidrico

**HI** → acido iodidrico

**H<sub>2</sub>S** → acido solfidrico

### MASSA MEDIA

Si definisce la massa media di un composto come la sua **massa formula**.

La somma di tutte le masse dà la massa formula (massa molecolare o peso molecolare). Quando si parla di chimica si lavora con le moli.

Ese: La massa formula della CO<sub>2</sub> è data dalla massa atomica di C + la massa atomica di O = 44.01u (uma).

$$\text{Massa formula} = \left( \begin{array}{c} \text{numero di atomi} \\ \text{del primo elemento} \\ \text{della formula chimica} \end{array} \times \begin{array}{c} \text{massa atomica} \\ \text{del primo} \\ \text{elemento} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{numero di atomi} \\ \text{del secondo elemento} \\ \text{della formula chimica} \end{array} \times \begin{array}{c} \text{massa atomica} \\ \text{del secondo} \\ \text{elemento} \end{array} \right) + \dots$$

Esempi:

✓ Massa formula CO<sub>2</sub> = (massa atomica di C) + 2(massa atomica di O)  
= 12.01 u + 2(16 u) = 44.01 u

✓ Massa formula H<sub>2</sub>O = 2(massa atomica di H) + (massa atomica di O)  
= 2(1.01 u) + 16 u = 18.01 u

La massa molare di un elemento, cioè la massa in grammi di una mole dei suoi atomi, è numericamente equivalente alla sua massa atomica. A partire dalla massa molare possiamo sapere quanto è la massa di una mole di sostanza.

Una mole è equivalente alla dozzina.

**Esempio 3.12 Calcolo della massa formula**Calcolare la massa formula del glucosio,  $C_6H_{12}O_6$ .**RISULTATO**

Per trovare la massa formula, sommiamo la massa atomica di ogni atomo nella formula chimica.

$$\begin{aligned}\text{Massa formula} &= 6 \times (\text{massa atomica C}) + 12 \times (\text{massa atomica H}) + 6 \times (\text{massa atomica O}) \\ &= 6(12.01 \text{ u}) + 12(1.008 \text{ u}) + 6(16.00 \text{ u}) \\ &= 180.16 \text{ u} \quad (\text{Massa molare} = 180.16 \text{ g mol}^{-1})\end{aligned}$$
**ESERCIZIO DI PROVA 3.12** Calcolare la massa formula del nitrato di calcio.Metallo =  $Ca^{2+}$ Non metallo = ione nitrato  $NO_3^-$ 

Composto ionico

 $Ca(NO_3)_2$ 

Unità formula

Massa formula di  $Ca(NO_3)_2$  = 40.078 u + 2[14 u + 3(16 u)] = 164.078 u**Uso della massa molare per contare le molecole di un campione di massa nota***Esempio:*Calcolare il numero di molecole ( $n$ ) in 10.8 g di  $CO_2$  (massa molare 44 g  $mol^{-1}$ )*Risoluzione:*Calcolare il numero di moli totali: 10.8 g (massa) / 44 g  $mol^{-1}$  (massa molare) = 0.245 mol di  $CO_2$ 1 mol di  $CO_2$  contiene  $6.022 \times 10^{23}$  molecole di  $CO_2$  quindi imposto la proporzione:

$$1 : 6.022 \times 10^{23} = 0.245 : n$$

$$n = 0.245 \times 6.022 \times 10^{23} = 1.48 \times 10^{23} \text{ molecole di } CO_2$$

Si utilizza il numero di Avogadro:  $6.022 \times 10^{23}$ 

Per calcolare le moli totali si imposta la proporzione:

$$n_{\text{molecole}} = n_{\text{moli}} \times N_{\text{Avogadro}}$$

Esempio:

massa (in grammi) di  $\text{H}_2\text{O}$  = ??

$n_{\text{molecole}} = 3.5 \times 10^{22}$  molecole di  $\text{H}_2\text{O}$ ; sappiamo:  $\text{MM}(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g mol}^{-1}$

$N_A = 6.02 \times 10^{23}$

$$n_{\text{molecole}} = n_{\text{moli}} \times N_{\text{Avogadro}}$$

$$\rightarrow n_{\text{moli}} = n_{\text{molecole}} / N_{\text{Avogadro}}$$

$$\rightarrow \text{massa} = n_{\text{moli}} \times \text{MM}(\text{H}_2\text{O})$$

$$n_{\text{moli}} = 0.058 \text{ mol di H}_2\text{O}$$

$$\text{massa} (\text{H}_2\text{O}) = 1.04 \text{ g}$$

## COMPOSIZIONE DEI COMPOSTI

La composizione percentuale in massa di un elemento è la percentuale dell'elemento rispetto alla massa totale del composto.

$$\text{massa \% dell'elemento X in un composto} = \frac{\text{massa di X in 1 mol di composto}}{\text{massa di 1 mol di composto}} \times 100$$

Esempio:

calcolare la composizione percentuale in massa del Cl nel clorofluorocarburo



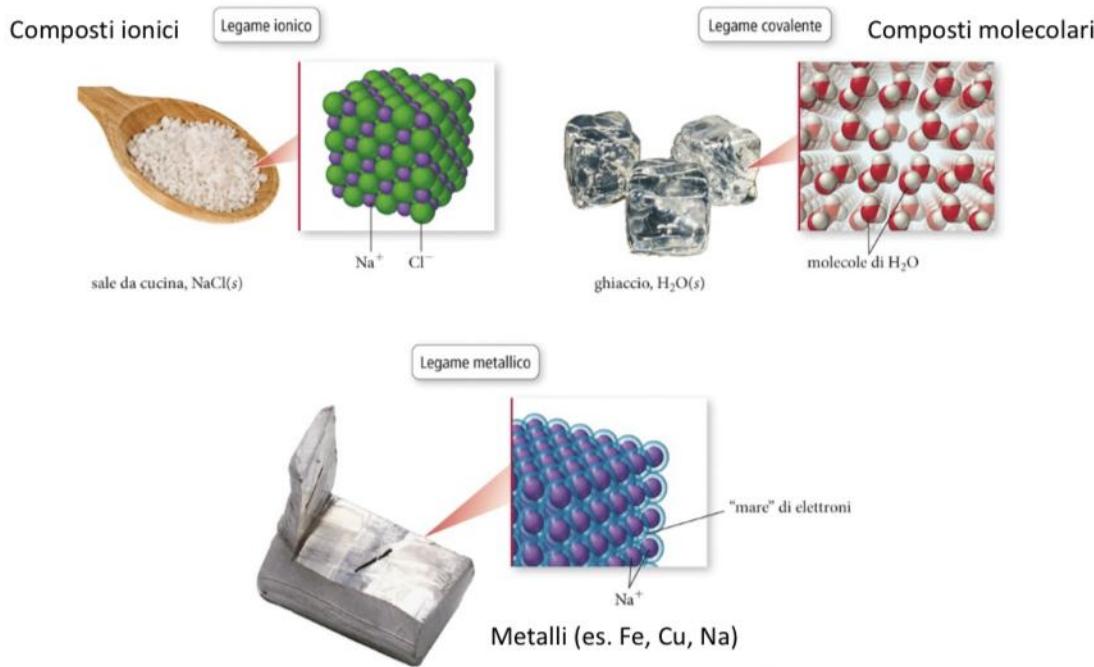
Risoluzione: 1 mol di  $\text{CCl}_2\text{F}_2 \longrightarrow (1 \text{ mol di C}) + (2 \text{ mol di Cl}) + (2 \text{ mol di F})$

$$\text{MM} = \text{MA}_C + 2\text{MA}_{\text{Cl}} + 2\text{MA}_F = 12 + 2(35.45) + 2(19) = 120.9 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\% \text{ Cl} = \frac{2(35.45) \text{ g mol}^{-1}}{120.9 \text{ g mol}^{-1}} \times 100 = 58.64 \%$$

## IL LEGAME CHIMICO

Nelle lezioni precedenti, abbiamo fatto una serie di considerazioni sul tipo di composti che esaminiamo e sulla loro nomenclatura, le caratteristiche che differenziano un tipo di composto da un altro è il tipo di atomo da cui è formato e dal modo in cui essi interagiscono tra loro.



Esistono vari tipi di composti:

- I composti ionici;
- I composti molecolari, che si suddividono in ossidi e composti inorganici più generici;
- I composti metallici;

La differenza tra questi composti è come gli atomi e in particolare modo gli elettroni interagiscono all'interno di questi sistemi. Nei composti ionici le interazioni sono principalmente di carattere coulombiano, nei composti molecolari le interazioni sono principalmente dati dalla condivisione di elettroni spaiati tra due atomi, mentre nei composti metallici gli ioni che formano il metallo si trovano all'incirca in posizioni fisse dove possono vibrare intorno alla posizione di riferimento e sono tenuti insieme da quello che viene definito "mare di elettroni" e gli ioni non sono connessi strettamente agli atomi ma possono muoversi all'interno di esso.

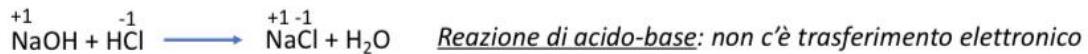
È possibile classificare e identificare per ogni composto delle differenze sul come avvengono le interazioni all'interno delle molecole.

| Tipo di atomi             | Tipo di legame | Caratteristica del legame     |
|---------------------------|----------------|-------------------------------|
| Metalli e non metalli     | Ionico         | Trasferimento di elettroni    |
| Non metalli e non metalli | Covalente      | Condivisione di elettroni     |
| Metalli                   | Metallico      | Delocalizzazione di elettroni |



*Reazione di ossido-riduzione:  
c'è trasferimento elettronico*

Nel legame ionico non è solo il trasferimento degli elettroni la caratteristica del legame ma anche la possibilità di interazione tra cariche elettrostatiche.

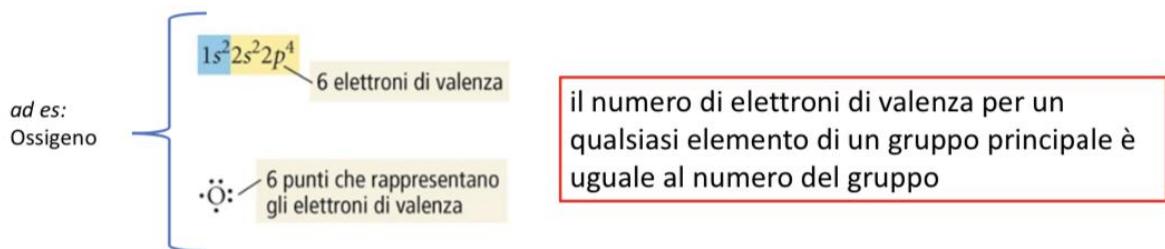


## LA TEORIA DI LEWIS

Serve a rappresentare la valenza degli atomi, a capire quale atomo è legato a chi.

Per ogni atomo bisogna rappresentare gli elettroni di valenza, ovvero quelli nel livello energetico più esterno e che quindi interagiscono maggiormente con l'altro atomo e formare legami.

Nella struttura di Lewis gli elettroni di valenza si rappresentano con dei puntini intorno al simbolo dell'elemento.



*I punti sono posizionati intorno al simbolo dell'elemento con un massimo di due punti per lato*

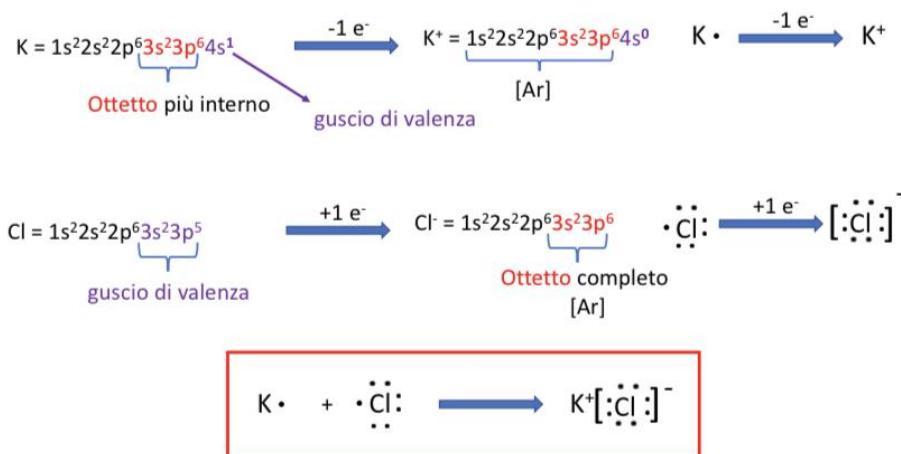


Nella teoria di Lewis, il legame chimico è la condivisione o il trasferimento di elettroni per ottenere configurazioni elettroniche stabili per gli atomi che si legano; se gli elettroni sono trasferiti il legame è ionico, se gli elettroni sono condivisi il legame è covalente.

La regola di Lewis segue la regola dell'ottetto.

## Legame ionico: strutture di Lewis ed energie reticolari

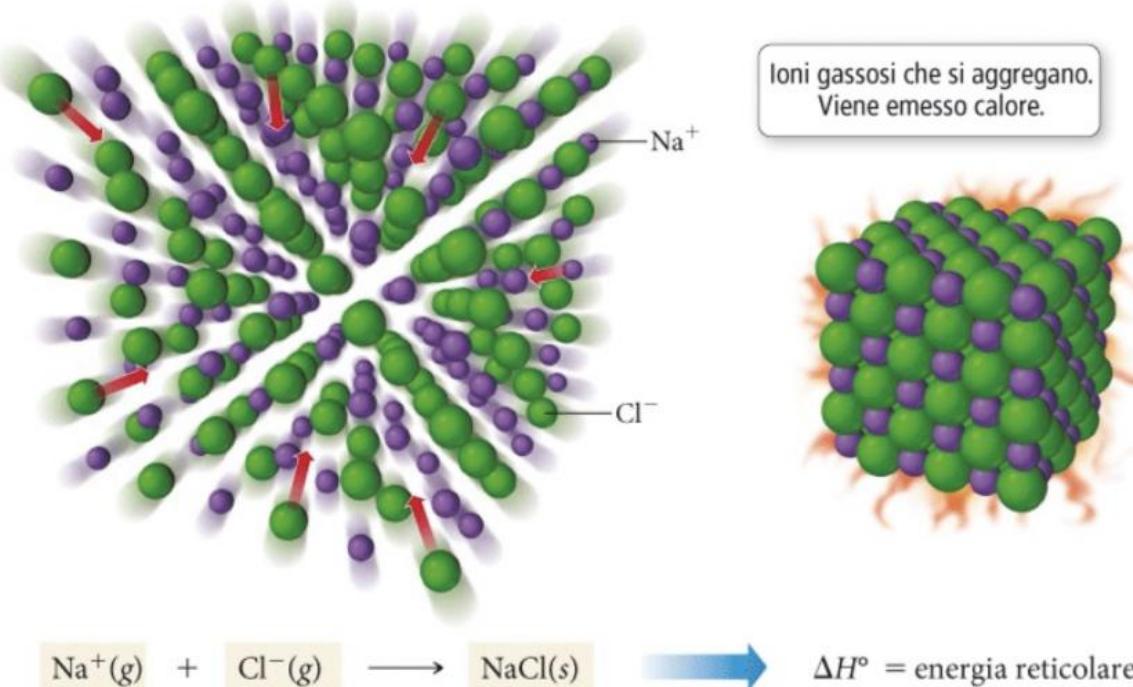
Si consideri il composto costituito da potassio e cloro



### ENERGIA RETICOLARE DI UN COMPOSTO IONICO

I composti ionici hanno una struttura “fissa” dove gli ioni possono muoversi intorno a delle posizioni di equilibrio oscillando ma rimanendo comunque fissi in quella posizione.

Questa struttura fa sì che ci sia una certa regolarità all’interno del composto che viene ripetuta nel reticolo cristallino del composto. L’energia reticolare di un composto ionico è l’energia associata alla formazione del reticolo cristallino a partire dagli ioni in fase gassosa.



L'energia di interazione tra due atomi all'interno del reticolo cristallino è possibile razionalizzare sotto

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{12}}$$

forma di energie di coulomb, attraverso l'equazione:

L'energia dipende dalla carica dei due atomi che vengono considerati e da quanto distano. Se aumenta la carica a parità di distanza aumenta l'energia di interazione tra gli atomi e quindi il reticolo si stabilizza.

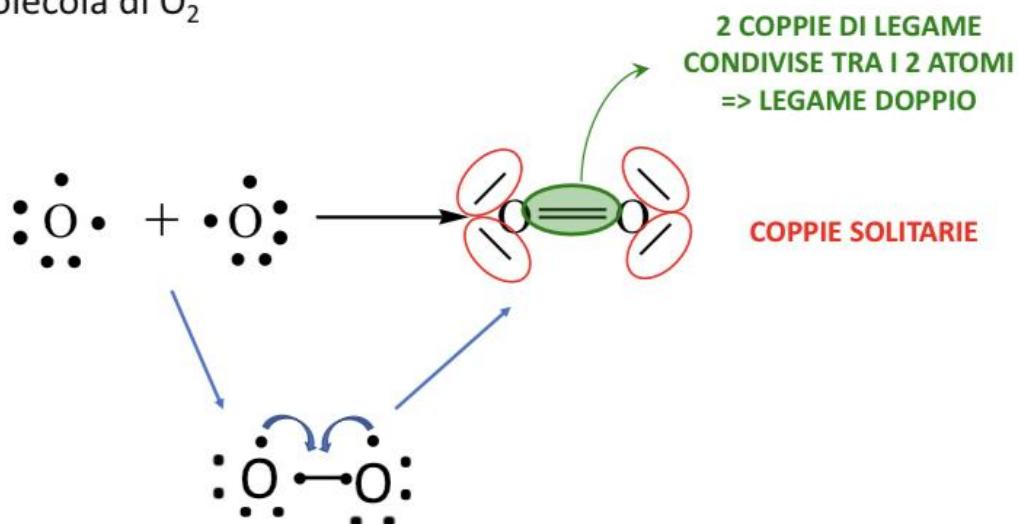
#### LEGAME COVALENTE: strutture di Lewis

In questo caso la teoria di Lewis ci permette di scrivere le interazioni covalenti come legami covalenti singoli o come legami covalenti doppi e tripli.

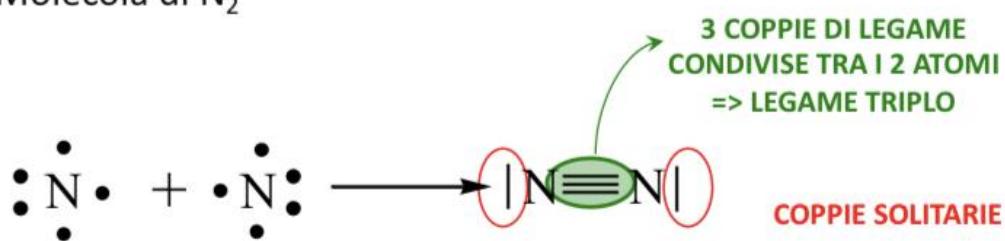
Si ha un legame covalente singolo quando i due non metalli condividono tra di loro un solo elettrone ciascuno.

Il raggiungimento dell'ottetto può richiedere la formazione di due o tre legami covalenti tra la stessa coppia di atomi.

#### • Molecola di O<sub>2</sub>



#### • Molecola di N<sub>2</sub>



#### STRUTTURE DI LEWIS PER I COMPOSTI MOLECOLARI

1. Scrivere la corretta struttura dello scheletro della molecola; (es. per l'acqua: H H O non è corretto, H O H è corretto)

2. Calcolare il numero totale di elettroni per la struttura di Lewis sommando gli elettroni di valenza di ciascun atomo della molecola;
3. Distribuire gli elettroni fra gli atomi, sistemando gli ottetti (o duetti nel caso dell'idrogeno) su quanti più atomi possibile;
4. Se qualche atomo non ha raggiunto l'ottetto, formare tanti legami doppi o tripli quanti sono necessari perché raggiunga l'ottetto;

### **SCRIVERE LE STRUTTURE DI LEWIS PER GLI IONI POLIATOMICI**

Le strutture di Lewis per gli ioni poliatomici si scrivono seguendo la stessa procedura, ma ponendo particolare attenzione alla carica dello ione quando si calcola il numero di elettroni; si aggiunge un elettrone per ciascuna carica negativa e si sottrae un elettrone per ciascuna carica positiva; la struttura di Lewis per uno ione poliatomico di solito viene scritta in parentesi quadre con la carica dello ione nell'angolo in alto a destra, fuori dalle parentesi.

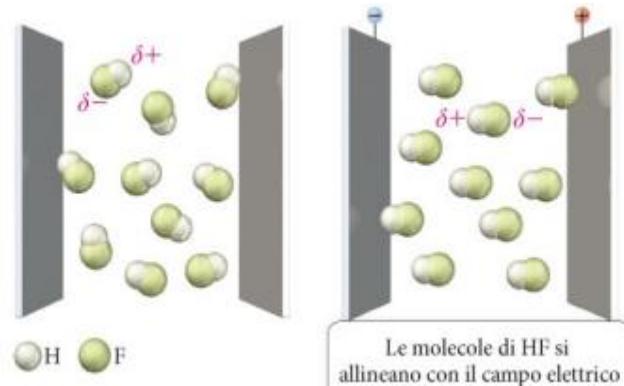
## Elettronegatività e polarizzazione del legame

Come visto precedentemente, nei composti molecolari (binari) gli elettroni sono condivisi tra i due atomi coinvolti. Quello che bisogna chiedersi è se questi e<sup>-</sup> (coinvolti nel legame equivalente) all'interno della molecola siano equamente condivisi.

Ad esempio nel composto HF (acido fluoridrico), i due elementi presentano una differenza di elettronegatività tale da formare un legame covalente. Seguendo la figura al lato, è possibile notare come normalmente le molecole nello spazio (a sinistra) siano orientate in maniera casuale, ma nel momento in cui vengono sottoposte ad un campo elettrico (generato tra due placche metalliche), si allineano/orientano con il campo elettrico.

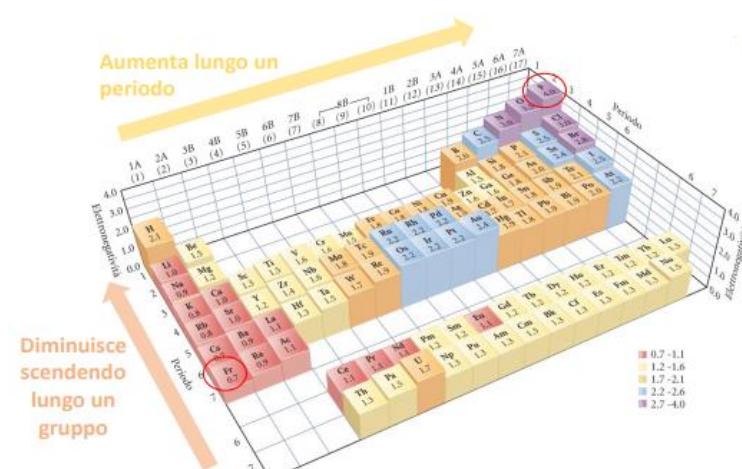
La placca sinistra è caricata negativamente, mentre la placca destra positivamente dunque il campo elettrico è uscente dalla piastra positiva: la molecola si orienterà in maniera opposta al campo (la carica parziale positiva dell'H verso sinistra e la carica parziale negativa F verso destra).

Ciò accade in tutti i composti molecolari (compresi i sali, teoricamente), con effetto maggiore per quelli polari.



Dunque quando si ha un composto con due atomi è necessario individuare quello con elettronegatività<sup>1</sup> maggiore che tenderà ad attrarre a sé gli elettroni, contrariamente all'altro che tenderà a "perderli".

Quando la condivisione non è equamente distribuita si parlerà di legame covalente polare, che si ha quando gli atomi coinvolti nella molecola hanno affinità elettronica e potenziale di ionizzazione differenti. Nell'immagine a sinistra è possibile osservare che nella tavola periodica l'elettronegatività aumenta da sinistra verso destra (lungo il periodo) e diminuisce dall'alto verso il basso (scendendo lungo i gruppi). L'elemento meno elettronegativo è il francio, mentre il fluoro è l'elemento più elettronegativo.

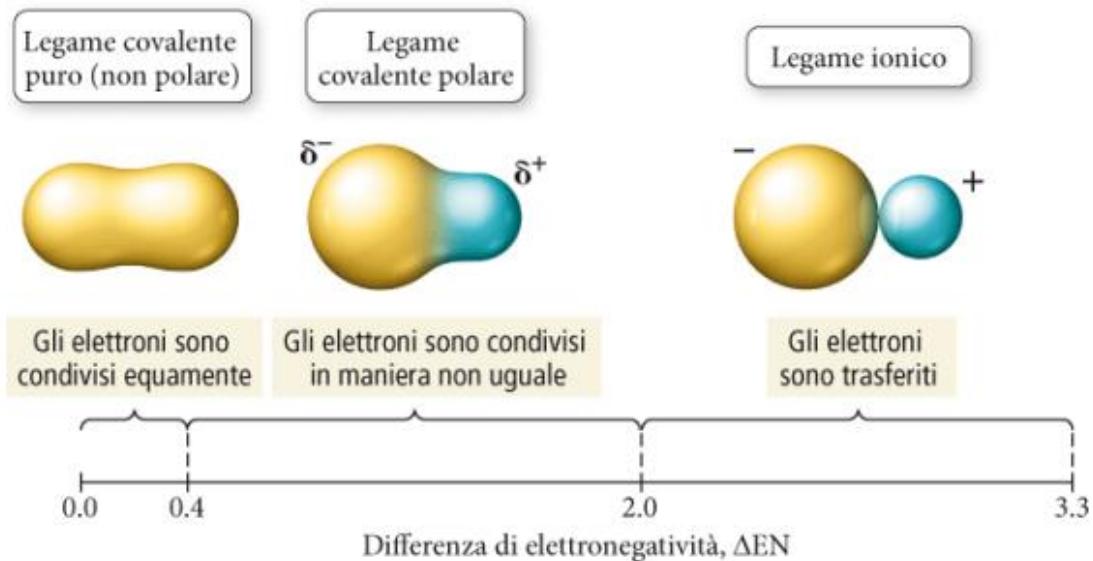


Perché ciò accade? Lungo i periodi l'elettronegatività aumenta perché gli elementi sono sempre più "vicini" alla configurazione elettronica del gas nobile di riferimento. Più ci si

<sup>1</sup> L'elettronegatività è la capacità di un atomo di una molecola di attrarre verso di sé elettroni di un legame covalente

sposta verso destra, più gli elementi tendono ad attrarre a sé elettroni. A sinistra invece l'elettronegatività è più bassa perché gli elementi sono più vicini al gas nobile che li precede e dunque hanno una configurazione elettronica più stabile; lungo i gruppi invece questa proprietà diminuisce poiché vi sono sempre più gusci a schermare la carica nucleare che attrae gli elettroni. Ad esempio: l'idrogeno ha elettronegatività elevata perché la carica negativa dell'elettrone è molto vicina a quella positiva del nucleo. Questo effetto è schermato nei livelli più in basso perché gli elettroni interni hanno un effetto di schermo.

Il grado di polarità di un legame chimico dipende dalla differenza di elettronegatività tra i due elementi considerati: la polarità aumenta con la differenza di elettronegatività ( $\Delta EN$ ) tra gli atomi coinvolti nel legame. Nell'immagine sottostante (una scala qualitativa) è riportata la classifica dei legami in base alla  $\Delta EN$ :



- Se la differenza è molto piccola (0-0,4) gli elettroni sono equamente condivisi e il tipo di legame covalente è puro (apolare). In questo range rientra il legame C-H (il carbonio ha EN pari a 2.5, mentre l'H 2.1 dunque la  $\Delta EN=0,4$ ), come nel caso degli alcani (composti organici).
- Se la  $\Delta EN$  è compresa tra 0.4 e 2.0, il legame si definisce covalente polare.
- Superata la soglia di 2.0, si inizia a parlare di legame ionico (l'elettrone non sarà più condiviso con l'atomo di partenza, ma si creerà una netta distinzione tra la carica dell'atomo più elettropositivo e quella dell'atomo più elettronegativo).

E' importante definire la polarità di un legame perché è possibile quantificarla considerando il suo **momento dipolare  $\mu$**  (o di dipolo). Si tratta di un **vettore** dato dal prodotto vettoriale tra la differenza di carica e la distanza tra due atomi.

$$\mu = q \times r$$

$r = 130 \text{ pm}$  (la lunghezza approssimativa di un legame chimico corto)

| molecola        | $\Delta EN$ | $\mu$ |
|-----------------|-------------|-------|
| Cl <sub>2</sub> | 0           | 0     |
| HF              | 1.9         | 1.82  |
| LiF             | 3.0         | 6.33  |

Il momento di dipolo si ha ogni volta che due cariche (uguali in modulo) di segno opposto vengono allontanate. Quando gli atomi coinvolti nel legame sono due, conoscere il momento di dipolo non risulta complesso ma se ad essi ne viene aggiunto un terzo, calcolare il loro prodotto vettoriale non è così immediato.

Come scritto nell'immagine, la polarità è rappresentata da una freccia orientata verso l'atomo più elettronegativo (in questo caso F).

Nella tabella blu è evidente che a  $\Delta EN$  maggiori corrisponde un momento dipolare maggiore (questo perché è aumentata la carica).

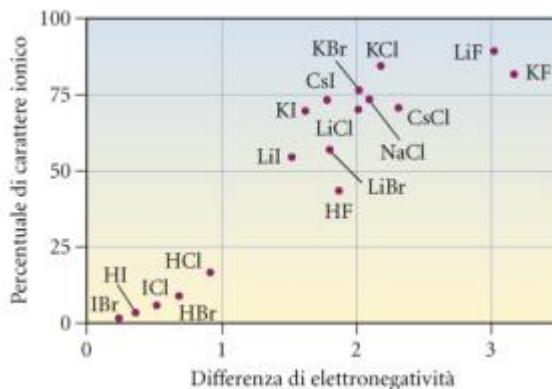
### Percentuale di carattere ionico

Per poter calcolare tale percentuale è necessario conoscere il  **$\mu$  misurato** (il momento dipolare misurato sperimentalmente) e il **calcolo teorico del prodotto vettoriale** (visto prima). Per ottenere tale percentuale:

$$\% \text{ carattere ionico} = \frac{100 \times \mu \text{ misurato}}{\mu \text{ teorico elettrone trasferito}}$$

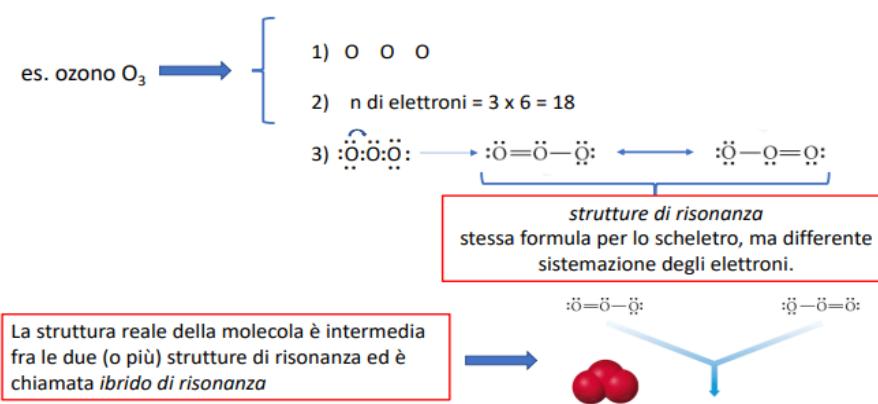
Nonostante sia possibile arrivare ad una  $\Delta EN=3$ , sperimentalmente non si raggiunge mai il 100% di carattere ionico e dunque rimane sempre una minima condivisione elettronica tra chi cede la carica negativa e chi la acquista.

A partire dal 50% i legami sono da considerarsi ionici.



### Risonanza e carica formale

Si immagini ad una situazione come quella dell'ozono  $O_3$ :



Nel caso di questa molecola è possibile scrivere più di una struttura di Lewis valida. L'ossigeno ha 6 elettroni di valenza. Prendendo tre atomi di questo elemento essi triplicheranno e dunque si avranno ben 18 elettroni. Legandosi, un primo ossigeno fa un doppio legame con il secondo che a sua volta fa un legame singolo con il terzo ossigeno (una possibile struttura stabile). Tuttavia se i legami venissero scambiati non accadrebbe nulla, la molecola sarebbe ugualmente stabile.

Quelle che abbiamo ottenuto sono **strutture di risonanza**, che però nella realtà non esistono: difatti la struttura reale molecolare è intermedia tra le due ed è definita **“ibrido di risonanza”**. I tre atomi sono legati da legami singoli, ma nessuno è in grado di mantenere il doppio legame che perciò viene equamente condiviso tra il primo e il terzo atomo. Tale teoria è stata sperimentalmente eseguendo delle misurazioni circa la lunghezza reale dei legami.

### Carica formale

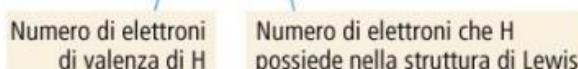
Quando se ne parla bisogna far riferimento alla carica formale di un atomo all'interno della molecola. Per poterla calcolare si ricorre all'equazione che segue:

$$\text{Carica formale} = \text{n}^{\circ} \text{ elettroni valenza} - (\text{n}^{\circ} \text{ elettroni di non legame} + \frac{1}{2} \text{ elettroni di legame})$$

Il risultato di tale formula ci indica se l'atomo in questione ha una carica neutra (come la maggior parte dei composti) oppure positiva/negativa.

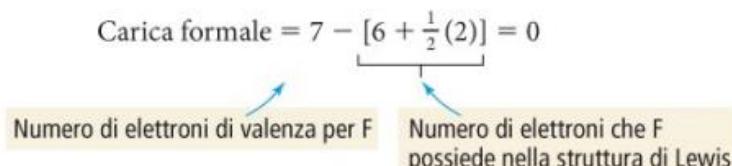
Esempio:

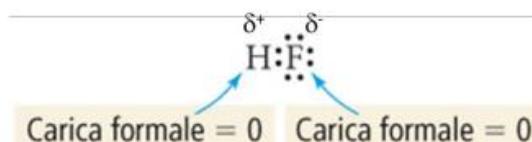
Molecola HF       $\text{Carica formale} = 1 - [0 + \frac{1}{2}(2)] = 0$



Allo stesso modo, si può calcolare la carica formale del fluoro in HF come segue:

$$\text{Carica formale} = 7 - [6 + \frac{1}{2}(2)] = 0$$





Allora il composto HF è sì altamente polarizzato, ma nella sua “interezza” è neutro e non c’è una carica netta positiva o negativa su entrambi gli atomi.

Il concetto di carica formale è utile poiché può aiutare a distinguere fra strutture dello scheletro o strutture di risonanza alternative. Ad esempio nel composto HCN (acido cianidrico) non sappiamo come disporre gli elementi in esame:

|   | Struttura A       |   |                   |   | Struttura B       |                   |   |                   |   |                   |
|---|-------------------|---|-------------------|---|-------------------|-------------------|---|-------------------|---|-------------------|
|   | H                 | - | C                 | = | N:                | H                 | - | N                 | = | C:                |
| numero di e <sup>-</sup> di valenza                 | 1                 |   | 4                 |   | 5                 | 1                 |   | 5                 |   | 4                 |
| -numero di e <sup>-</sup> di non legame             | -0                |   | -0                |   | -2                | -0                |   | -0                |   | -2                |
| $-\frac{1}{2}$ (numero di e <sup>-</sup> di legame) | $-\frac{1}{2}(2)$ |   | $-\frac{1}{2}(8)$ |   | $-\frac{1}{2}(6)$ | $-\frac{1}{2}(2)$ |   | $-\frac{1}{2}(8)$ |   | $-\frac{1}{2}(6)$ |
| Carica formale                                      | 0                 |   | 0                 |   | 0                 | 0                 |   | +1                |   | -1                |

In teoria è possibile costruire due strutture differenti A e B: l'H nella A fa un legame singolo con il C, in B con N (nelle due strutture C ed N vengono scambiati). Nella prima struttura il C si lega ad N con un legame triplo (con lone pair su N) nella seconda invece il contrario (lone pair su C). Applicando la formula precedente e seguendo la tabella sovrastante, sia la struttura A che quella B sono neutre ma quella favorita è quella con minor carica possibile (in questo caso la A).

Questo metodo ci è utile per comprendere se la struttura di una molecola ipotizzata sia corretta o meno (NON sono strutture di risonanza). Ecco alcune regole:

1. La somma delle cariche formali in una molecola neutra deve essere zero.
2. la somma delle cariche formali in uno ione deve essere uguale alla carica dello ione.
3. cariche formali piccole (o nulle) sui singoli atomi sono preferibili a cariche grandi.
4. quando la carica formale non può essere evitata, le cariche formali negative devono trovarsi sugli atomi più elettronegativi.

### **Eccezioni alla regola dell'ottetto**

1. Specie con elettroni dispari, cioè molecole o ioni con numero dispari di elettroni (si trovano spesso in natura) e sono dette radicaliche;
2. Ottetti incompleti, ossia composti che non completano i loro gusci elettronici di valenza;
3. Ottetti espansi, ossia molecole o ioni con più di otto elettroni intorno ad un atomo.

#### **Specie con elettroni dispari:**

Si definiscono **radicali** tutte quelle molecole (o ioni) che nella loro struttura di Lewis presentano un numero dispari di elettroni.

Uno dei composti che presenta numerosi radicali sono gli *ossidi dell'azoto*, prodotto di combustione delle vecchie marmitte (indicati in genere come NO<sub>x</sub>).

Nell'NO, l'O ha 6 elettroni di valenza ed N ne ha 5: il n di elettroni è 5+6=11



L'atomo di azoto però non ha completato il suo ottetto, mentre l'ossigeno sì.

Nel diossido di azoto NO<sub>2</sub>, il numero di elettroni è invece 5+6(2)=17

