Struttura Molecolare

- Calcolare il numero totale di elettroni **e** sommando gli elettroni di valenza di ciascun atomo
- Calcolare il numero di coppie elettroniche $\mathbf{c_e = e / 2}$
- Assegnare le coppie di legame
- Completare l'ottetto degli atomi periferici mediante coppie solitarie (ione pair)
- Assegnare le restanti coppie solitarie all'atomo centrale
- Calcolare la carica formale **FC** di ciascun atomo:

$$\mathbf{FC = e_v - e_s - e_l / 2}$$

Dove riferendosi all'atomo preso in considerazione:

$\mathbf{e_v}$ = elettroni di valenza dell'atomo

$\mathbf{e_s}$ = elettroni delle coppie solitarie

$\mathbf{e_l}$ = elettroni delle coppie di legame

Ora se la carica formale dell'atomo centrale risulta nulla oppure pari alla carica posseduta dalla specie chimica allora la struttura ottenuta è corretta altrimenti dobbiamo modificarla come segue:

a) Se l'atomo centrale è del 2° periodo aggiungiamo un legame multiplo tra un atomo periferico e quello centrale utilizzando una coppia solitaria presa dall'atomo periferico con la carica formale più negativa, ripetendo l'operazione fino al raggiungimento dell'ottetto dell'atomo centrale

b) Se l'atomo centrale fa parte del 3° periodo o di un periodo superiore aggiungiamo un legame multiplo tra un atomo periferico e quello centrale utilizzando una coppia solitaria presa dall'atomo periferico con la carica formale più negativa fino all'annullamento della carica formale dell'atomo centrale.