

1.14. La molécula de ácido clorhídrico tiene un momento dipolar de 1.02 D ($1 \text{ D} = 1 \text{ debye} = 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$) y la longitud del enlace es de $1.28 \text{ \AA}$. Calcula la transferencia de carga efectiva.

La molécula de agua tiene un momento dipolar de 1.84 D, la longitud del enlace O—H es $0.958 \text{ \AA}$ y el ángulo H—O—H es de 104.5° . Calcula la carga transferida por cada átomo de H.

15 a) La molécula de ácido clorhídrico tiene un momento dipolar de 1.02 D (1 Debye = 3.33×10^{-30} C.m) y la longitud del enlace es de 1.28 Å. Calcular la transferencia de carga efectiva. b) La molécula de agua tiene un momento dipolar de 1.84 D, la longitud del enlace O-H es 0.958 Å y el ángulo H-O-H es de 105° . Calcular la carga transferida por cada átomo de H.

a) ClH

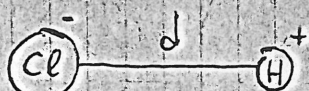
Comentar unidad de $\vec{p}$

$$p = 1.02 \text{ D} = 0.34 \cdot 10^{-29} \text{ C.m}$$

S.I. $\rightarrow$ C.m

$$1 \text{ D} = 3.33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

* Si la transferencia de carga fuera del 100% (enlace iónico)

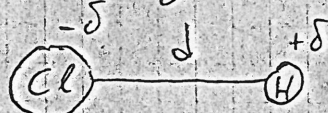


$$p = e \cdot d = 1.6 \cdot 10^{-19} \times 1.28 \cdot 10^{-10} = 2.05 \cdot 10^{-29} \text{ C.m}$$

$$Z_{\text{Cl}} = 17$$

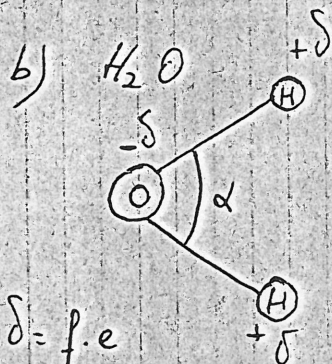
$$Z_{\text{H}} = 1$$

* Si la carga efectiva transferida es solo una fracción de la carga electrónica:



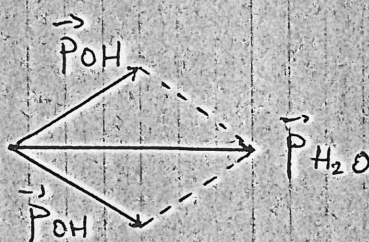
$$\delta = f \cdot e$$

$$0.34 \cdot 10^{-29} = f \cdot e \cdot d = f \cdot 2.05 \cdot 10^{-29} \Rightarrow f = 0.17 \rightarrow 17\%$$



$$\delta = f \cdot e$$

$\Rightarrow$



$$p_{\text{H}_2\text{O}} = 2 p_{\text{OH}} \cdot \cos \frac{\alpha}{2}$$

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = 1.84 \text{ D} = 6.13 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

$$\alpha = 105^\circ$$

$$d_{\text{OH}} = 0.958 \text{ Å} = 0.958 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$p_{\text{OH}} = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{2 \cos \frac{\alpha}{2}} = \frac{6.13 \cdot 10^{-30}}{2 \cdot 0.61} = 5.02 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

$$p_{\text{OH}} = f \cdot e \cdot d_{\text{OH}} \Rightarrow f = \frac{p_{\text{OH}}}{e \cdot d_{\text{OH}}} = 0.33$$

* Ver detalles

$$f = 33\%$$

$$Z_{\text{O}} = 8$$

$$Z_{\text{H}} = 1$$

Si consideramos que la transferencia de carga es del 100% entonces obteníamos un ángulo que no se corresponde con el medido experimentalmente.

$$p_{OH} = e \cdot d_{OH} = 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,958 \cdot 10^{-10} = 1,53 \cdot 10^{-29} \text{ C.m}$$

$$p_{H_2O} = 2 p_{OH} \cos \frac{\alpha}{2}$$

$$\Rightarrow \cos \frac{\alpha}{2} = 0.2 \Rightarrow \alpha = 156^\circ > \alpha_{exp}$$