

Czesław Puchała

Wyższa Szkoła Pedagogiczna, Częstochowa

MOMENTY DIPOŁOWE MOLEKUŁ W NAUCZANIU CHEMII

Streszczenie: W pracy przedstawiono możliwości wykorzystania momentów dipolowych molekuł do rozwiązywania problemów strukturalnych w chemii. Zwrócono uwagę na te elementy, które mogą być pożyteczne w nauczaniu chemii na poziomie szkoły średniej.

Jedną z metod badania struktury molekuł są pomiary i analiza wartości ich momentów dipolowych. Trwały moment dipolowy molekuły wynika przede wszystkim z różnicy elektroujemności jej składowych atomów i charakteryzuje rozmieszczenie ładunków w molekuale. Elektryczny moment dipolowy p_e (oznaczany także symbolem μ) definiuje się jako iloczyn ładunku wypadkowego jednego znaku q i odległości środków ładunków wypadkowych przeciwnych znaków l :

$$p_e = q \cdot l$$

Moment dipolowy jest wektorem skierowanym zgodnie z obecnie obowiązującą umową od środka ciężkości ładunków ujemnych do środka ciężkości ładunków dodatnich.

Dla substancji polarnych w stanie gazowym i ciekłym występuje przypadkowy rozkład orientacji dipoli molekularnych. Umieszczenie takich substancji w statycznym polu elektrycznym powoduje częściowe uporządkowanie dipoli wzdłuż linii sił pola. Orientacja dipoli molekularnych jest bardzo nieznaczna, ponieważ przeciwdziała jej ruch termiczny.

W niektórych podręcznikach błędnie przedstawia się orientację dipoli w polu elektrycznym jako zachodzącą prawie zupełnie (np. [1]). Stopień uporządkowania dipoli zależy od natężenia pola elektrycznego i temperatury. Jeśli natężenie pola elektrycznego wynosi nawet 100000 V/cm, to dla temperatur w pobliżu temperatury pokojowej (tj. ok. 300 K) orientację zgodną z kierunkiem pola przyjmie zaledwie ok. 2 % dipoli [2]. Zatem przyłożone pole elektryczne zwiększa prawdopodobieństwo takich orientacji, kiedy moment dipolowy molekuly będzie zgodny z kierunkiem pola. Natomiast wzrost temperatury zmniejsza stopień uporządkowania orientacji wektorów momentów dipolowych.

Wyznaczanie momentów dipolowych należy prowadzić w takich warunkach, w których wykluczone są oddziaływania molekularne i molekula ma swobodę orientacji w przyłożonym polu elektrycznym. Warunki takie spełniają pomiary w fazie gazowej pod niskimi ciśnieniami oraz w pewnym stopniu w roztworach rozcieńczonych. W przypadku pomiarów dla roztworów rozcieńczonych zachodzi konieczność ekstrapolacji danych doświadczalnych do stężenia zerowego. Konieczność ta wynika z faktu, że wówczas można zaniedbać oddziaływania między molekulami dipolowymi. Ekstrapolacyjne metody wyznaczania momentów dipolowych polegają na pomiarze przenikalności elektrycznej (używany często w podręcznikach chemii termin „stała dielektryczna” nie jest poprawny), współczynnika załamania światła i gęstości (w zależności od zastosowanej metody). Pomiary tych wielkości pozwalają na obliczenie polaryzacji dipolowej (orientacji) P_{dip} , a następnie momentu dipolowego:

$$p_e = 0,0128 \cdot \sqrt{P_{\text{dip}} \cdot T} \quad (\text{w układzie CGS wynik w debajach})$$

Jednostką momentu dipolowego w układzie jednostek SI jest kulombometr (Cm). Jednak w dalszym ciągu częściej używana bywa poprzednia jednostka debaj (D); uzasadnienie używania jednostek elektrycznych w układzie CGS podano w [2].

$$1 \text{ D} \cong 3,33 \times 10^{-30} \text{ Cm}$$

Wartość momentu dipolowego molekuly dostarcza istotnych informacji o jej strukturze.

Momenty dipolowe molekul złożonych z dwóch jednakowych atomów o wiązaniach czysto kowalencyjnych (np. N_2 czy Cl_2) są równe zeru. Molekuly te są dokładnie symetryczne.

Molekuły złożone z dwóch różnych atomów mają z reguły pewien moment dipolowy. Występuje w nich wiązanie jonowe lub kowalencyjne spolaryzowane. W pierwszym przypadku molekula składa się z dwóch jonów o przeciwnych ładunkach. Moment dipolowy dla tego rodzaju molekul ma dużą wartość (np. dla KF wynosi 8,52 D). W drugim przypadku wartości momentów dipolowych są mniejsze (np. moment dipolowy dla HF wynosi 1,91 D).

Wartość momentu dipolowego stanowi miarę polarnego charakteru wiązania. Dla molekuly HCl moment dipolowy wynosi 1,03 D, a więc mniej niż gdyby wiązanie między atomami H i Cl miało charakter całkowicie jonowy (wówczas wartość ta powinna być równa 6,16 D). Porównanie tych wartości pozwala określić procentowy charakter jonowy wiązania, w tym przypadku wiązanie jest jonowe w ok. 17%, ponieważ $1,03/6,16 \approx 0,17$. Dla molekul dwuatomowych moment dipolowy ich wiązań jest jednocześnie momentem dipolowym molekuly.

Wartość momentu dipolowego molekul wieloatomowych zależy nie tylko od momentów dipolowych poszczególnych wiązań, lecz również od przestrzennego rozmieszczenia wiązań. Możliwa jest wzajemna kompensacja momentów dipolowych polarnych wiązań w molekule, co prowadzi w konsekwencji do jej zerowego momentu dipolowego; przykładem może być molekula CCl_4 .

Analiza problemów strukturalnych na podstawie danych dotyczących momentów dipolowych molekul polega na porównywaniu wartości eksperymentalnej momentu dipolowego z jego wartością obliczoną przez wektorowe zsumowanie momentów dipolowych wiązań, gdyż moment dipolowy molekuly wieloatomowej traktuje się jako sumę wektorową momentów dipolowych poszczególnych jej wiązań. W niektórych przypadkach zamiast momentów dipolowych wiązań można posługiwać się momentami oddzielnych grup funkcyjnych. Dane do obliczeń można czerpać z tablic (np. [3], [4]).

Metoda geometrycznego (tj. wektorowego) sumowania momentów dipolowych wiązań rodzi pewne wątpliwości. Zestawione w tablicach wartości momentów dipolowych wiązań pochodzą z pomiarów dla różnych molekul. Momenty wiązań między określonymi atomami zależą również od innych wiązań, w których dane atomy biorą udział. Stosując przedstawiony tu addytywny model wektorowy do obliczeń momentu dipolowego danej molekuly należy posługiwać się momentami wiązań dla podobnych molekul.

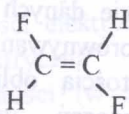
Dla molekul z dwiema sztywno związanymi grupami polarnymi obliczenie wypadkowego momentu dipolowego sprowadza się do złożenia dwóch wektorów, których kierunki tworzą kąt φ . Znajac wartości p_{e1} i p_{e2} momentów grup oraz wspomniany kąt φ można skorzystać z wzoru:

$$p_e = (p_{e1}^2 + p_{e2}^2 + 2p_{e1} \cdot p_{e2} \cdot \cos\varphi)^{1/2}$$

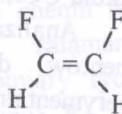
W ten sposób prowadzi się obliczenia wypadkowego momentu dipolowego dwupodstawionych pochodnych benzenu. Dla dinitrobenzenu obliczone wartości momentu dipolowego wynoszą dla izomeru orto 6,93 D, dla meta 4,01 D, a dla para 0. W przypadku o-dinitrobenzenu wartość obliczona różni się od wyznaczonej eksperymentalnie, która wynosi 6,00 D. Spowodowane to jest wzajemnym odpychaniem podstawników, wskutek tego kąt φ rośnie, a wartość p_e maleje.

Przez porównanie momentów dipolowych wyznaczonych eksperymentalnie z momentami obliczonymi na zasadzie wektorowej addytywności momentów wiązań i grup można wyciągnąć wnioski o występujących oddziaływaniach.

Na podstawie znajomości wartości momentów dipolowych można określić konfigurację izomerów Z - E (cis-trans) dla halogenopochodnych alkenów. Np. dla trans-1,2 - difluoroetenu moment dipolowy równa się zero, gdyż molekula ma środek symetrii, a więc momenty dipolowe wiązań kompensują się. Natomiast izomer cis ma moment dipolowy równy 2,42 D, co jest zgodne z wartością obliczoną na podstawie schematu wektorowego:



$$p_e = 0$$



$$p_e = 2,42 \text{ D}$$

Z pojęciem momentu dipolowego molekuly (tj. cząsteczki chemicznej) uczniowie szkoły średniej spotykają się przy omawianiu wiązań kowalencyjnych spolaryzowanych. Ponadto znajomość momentu dipolowego wykorzystuje się przy wyjaśnianiu budowy molekuly wody. Z polarną budową molekuł wody związane są liczne zjawiska przebiegające z jej udziałem (np. hydratacja, dysocjacja jonowa, asocjacja). W nauczaniu chemii organicznej interpretację zjawisk asocjacji alkoholi i kwasów karboksylowych (konkretnie CH_3COOH) prowadzi się biorąc pod uwagę dipolowy charakter ich molekuł. Dla zainteresowanych (np. uczestników kółka chemicznego) tematykę można rozszerzyć o zagadnienia, które wcześniej zostały tu zasygnalizowane.

Momenta dipolowe wykorzystywane są w zadaniach testowych z chemii (szczególnie przy egzaminach wstępnych na akademie medyczne).

Od rozwiązującego wymaga się najczęściej dokonania wyboru pomiędzy molekułami o zerowym momencie dipolowym i różnym od zera. Udzielenie prawidłowej odpowiedzi wymaga od ucznia znajomości struktury rozważanych molekuł. Oto przykład takiego zadania testowego.

W których molekułach moment dipolowy jest równy zero?

I HCl II H₂O III CH₄ IV CCl₄

1) I i II, 2) I i III, 3) II i III, 4) III i IV.

Zadania testowe korzystające z pojęcia momentu dipolowego mogą dotyczyć także wyjaśnienia struktury konkretnej molekuły, np.:

Molekuła CO₂ ma moment dipolowy równy zero, ponieważ:

- 1) atomy węgla i tlenu połączone są wiązaniem kowalencyjnym,
- 2) składa się z atomów różnych pierwiastków,
- 3) węgiel i tlen nie różnią się elektroujemnością,
- 4) ma symetryczną strukturę liniową.

Trzeci typ zadań testowych polega na porównaniu struktury dwóch molekuł, jak w poniższym przykładzie.

Moment dipolowy molekuły CO₂ wynosi 0, a molekuły SO₂ 1,6 D. Elektroujemności pierwiastków tworzących te molekuły wynoszą: C - 2,5, S - 2,6 i O - 3,5 (wg Paulinga). Różnice momentów dipolowych CO₂ i SO₂ można wyjaśnić następująco:

- 1) siarka ma wyższą elektroujemność niż węgiel, dlatego też SO₂ ma większy moment dipolowy,
- 2) w molekułe CO₂ zachodzi kompensacja momentów dipolowych wiązań, ponieważ ma środek symetrii, natomiast w molekułe SO₂ momenty dipolowe wiązań nie znoszą się, bo nie ma ona środka symetrii,
- 3) SO₂ ma silniej kwasowy charakter niż CO₂, dlatego ma moment dipolowy różny od zera,
- 4) w molekułe SO₂ powstają na atomach cząstkowe ładunki dodatnie i ujemne, których brak w molekułe CO₂.

Moment dipolowy omawia się także na lekcjach fizyki. Niestety brak tu wyraźnej korelacji międzyprzedmiotowej. Korelacja taka polegałaby na tym, że na lekcjach chemii należy odnieść się do fizycznych podstaw pojęcia momentu dipolowego, a na lekcjach fizyki podkreślić znaczenie tej wielkości w chemii.

LITERATURA

1. K. M. Pazdro, Chemia dla licealistów. Budowa materii w oczach chemika, Oficyna Edukacyjna - Krzysztof Pazdro, Warszawa 1996
2. M. I. Szachparonow, Mechanizmy быстрых процессов в жидкостях, Wyższ. Szkoła, Moskwa 1980
3. A. L. Mc Clellan, Tables of Experimental Dipole Moments, vol. 2, Rahara Enterprises 1974
4. W. I. Minkin, O.A. Osipow, J.A. Żdanow, Momenty dipolowe w chemii organicznej, PWN, Warszawa 1970

Czesław Puchała

**Dipole moments of molecules
in the teaching of chemistry**

Abstract: Possibilities of using dipole moments of molecules to solve structural problems in chemistry are presented in the paper. Elements that might prove useful for teaching chemistry at secondary school level are pointed out.