

Die Berechnung von Dipolen

Für eine Vielzahl von Stoffen wurden die Dipolmomente bereits gemessen und tabelliert. Mit der hier vorgestellten einfachen Methode lassen sich zwar Dipolmomente zumindest grob abschätzen. Jedoch geht es hier weniger darum, Messungen durch Berechnungen zu ersetzen, sondern die theoretischen Betrachtungen mit der Praxis zu vergleichen und daraus Erkenntnisse über die Molekülstruktur zu gewinnen.

Dipolmomente werden insbesondere bei der Berechnung von zwischenmolekularen Wechselwirkungen wie z.B. nach Lennard-Jones benötigt.

Die Beziehung des Dipolmoments lautet

$$\mu = ql$$

Darin ist μ das Dipolmoment in Cm oder Debye (D). l ist die Länge zwischen den Ladungen.

1 D = $3,33564 \cdot 10^{-30}$ Cm. 1 Debye ist das Dipolmoment von zwei Ladungen mit je $1 \cdot 10^{-18}$ elektrostatischen Einheiten und einer Länge von 1 cm. Unter elektrostatische Einheit versteht man 1 Fr (Franklin) = $3,33564 \cdot 10^{-30}$ Cm. Die Einheit Fr ist wie folgt definiert:

$$1Fr = \frac{1 \frac{m}{s}}{10c}$$

Darin ist c die Lichtgeschwindigkeit mit $c = 299792458,09$ m/s. Auf zwei Körper im Abstand 1 cm, die beide die Ladung 1 Fr besitzen, beträgt die Abstoßungskraft 1 dyn. Dyn ist eine dem Newton (mks-System) analoge Einheit der Kraft, allerdings im cgs-System.

$$1 \text{ dyn} = 1 \text{ g.cm.s}^{-2}$$

Soweit die Freude an alten Einheiten.

Als Referenzsystem gilt $l = 0,1 \text{ nm} = 100 \text{ pm} = 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA}$ ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$) und als Ladung gilt $q =$ die Ladung eines Elektrons = $1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$. Das entspricht einem Dipol, gebildet aus einem Proton und einem Elektron. Daraus errechnet sich ein Dipolmoment

$$\mu = 1,6022 \cdot 10^{-29} \text{ Cm} = 4,811 \text{ D.}$$

Bei der Berechnung des Dipolmoments nimmt man an, dass die Ladungen nicht der eines Elektrons betragen wie bei der Ionenbindung.

$$\mu = q \cdot l \cdot f,$$

Wie an den folgenden Beispielen gezeigt, ist dieser Faktor immer < 1 .

Dipolmoment HCl (1,109 D, $f = 0,178$)

$$q = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}, \quad f = 0,178, \quad l = 127 \text{ pm} = 127 \cdot 10^{-12} \text{ m. Ergibt } \mu = 0,362 \cdot 10^{-29} = 1,08 \text{ D.}$$

Mit dem Faktor = 4,8 D pro e /100 pm kann man in alten Einheiten rechnen.

In alten Einheiten

$$\mu = 0,178 \cdot 127 \cdot 4,8 / 100 = 1,08 \text{ D}$$

Dipolmoment HF (1,83 D, $f = 0,41$)

$$q = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}, f = 0,41, l = 92 \text{ pm} = 92 \cdot 10^{-12}. \text{ Ergibt } \mu = 6,043 \cdot 10^{-30} = 1,815 \text{ D}.$$

In alten Einheiten

$$\mu = 0,41 \cdot 92 \cdot 4,8 / 100 = 1,82 \text{ D}$$

Dipolmoment H₂O (1,834 D, $l = 95,8 \text{ pm}$, $f = 0,327$)

Das Dipolmoment setzt sich vektoriell additiv aus den beiden Dipolen der HO Bindung mit dem Winkel $104,5^\circ$ zusammen.

$\mu = 2 \mu_0 \cdot \cos(\vartheta/2)$. Jedes einzelne HO- Dipolmoment beträgt in alten Einheiten

$$\mu_0 = q \cdot f \cdot l = e \cdot 95,8 \cdot 0,3275 \cdot 4,8 / 100 = 1,506 \text{ D},$$

eingesetzt, ergibt dies das Dipolmoment des Wassers.

Zwischen H und O besteht ein Elektronegativitätsunterschied von 1,3 (nach Allred und Rochow)

Wolfgang Schmidt Okt. 2014

www.chemievt.de