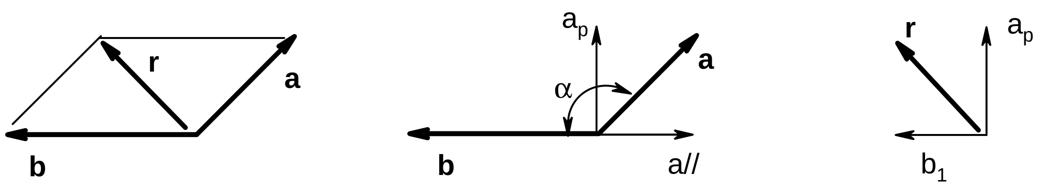
Problema 1 Polar and non-polar molecules

1. *Trova l'espressione generale che dà la risultante* **r** *di due vettori* ***a*** *e* ***b***.
Considero i due vettori a e b nella seguente figura.



Scompongo **a** in **a parallelo** (**a**//) e **a perpendicolare** (**a_p**). Trovo poi **b_1** la somma di **b** e **a//.** Infine sommo **b_1** e **a_p** per ottenere il vettore risultante **r**.
a// = **a** cos (180 - α) quindi **a**// = **-a** cos α **a_p** = **a** sen(180 - α) quindi **a_p** = **a** sen α
b_1 = b – a// (essendo vettori allineati) quindi **b_1** = **b** + **a** cos α
Infine applico il teorema di Pitagora per ottenere **r**: **r^2** = **b_1**^{2} + **a_p**^{2} **r^2** = (**a** sen α)^2 + (**b** + **a** cos α)^2
da cui si ottiene che il vettore risultante ha modulo $r = \sqrt{a^2 + b^2 + 2ab\cos a}$

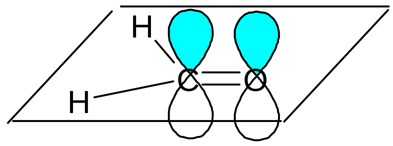
2. *Calcola i momento dipolare di CO_2 (180°) e H_2S (92°) sapendo che μ_{SH} = 2,61 ·10^{-30} C·m.*
Nella molecola CO_2 lineare, i due momenti C-O sono uguali e opposti e si annullano a vicenda.
Infatti, dato che a = b e che l'angolo α vale 180°, ottengo:

$\mu = r = \sqrt{2a^2 + 2a^2\cos a}$ $m = \sqrt{2a^2 + 2a^2(\cos 180)}$ $m = \sqrt{2a^2 + 2a^2(-1)} = 0$

Nella molecola H_2S l'espressione diventa $m = \sqrt{2a^2 + 2a^2\cos a}$ $m = a\sqrt{2(1+\cos a)}$

$$m = \frac{2{,}61\cdot 10^{-30}}{3.33\cdot 10^{-30}}\sqrt{2(1+\cos 92{,}0)} \quad \mu = 1{,}09 \cdot \mathrm{D}$$

3.1 *Assegna l'ibridazione a C e O nella formaldeide e mostra le sovrapposizione degli orbitali.*
L'ibridazione di C e O è sp^2 e la molecola può essere rappresentata nel piano con angoli di 120°.



3.2 *Calcola il momento dipolare della formaldeide sapendo che l'angolo di legame HCH è 120°, μCH = 0,4 D e μCO = 2,3 D.*
Data la simmetria della molecola, la risultante r_1 dei due dipoli μ_{CH} si trova allineata con il dipolo μ_{CO} e quindi il dipolo complessivo μ è la somma di r_1 e μ_{CO} cioè $\mu = r_1 + \mu_{CO.}$

$r_1 = a\sqrt{2(1+\cos a)}$ $r_1 = 0{,}4\sqrt{2(1+\cos 120°)}$ = 0,4 D $\mu = r_1 + \mu_{C=O}$ = 0,4 + 2,3 = 2,7 D

4. *Stimare l'angolo di legame C-O-H del metanolo sapendo che il suo momento dipolare è 1,69 D e sapendo che l'acqua ha dipolo 1,84 D e ha un angolo H-O-H di 105°, infine sapendo che il dimetil etere ha un dipolo di 1,29 D e un angolo C-O-C di 110°.*
Dal dato dell'acqua e del dimetiletere si ricavano i dipoli dei legami O-H e O-C. Infine da questi dati si può stimare l'angolo di legame C-O-H del metanolo.
Applicando la $m = a\sqrt{2(1+\cos a)}$ per l'acqua si ottiene un valore μ_{OH} = 1,51 D.
Applicando ancora le stessa equazione si ottiene per il dimetiletere μ_{CO} = 1,12 D.
Applicando infine l'equazione generale ricavata prima $m = \sqrt{a^2 + b^2 + 2ab\cos a}$ si ricava

$\cos a = \dfrac{m^2 - a^2 - b^2}{2ab}$ = -0,204 da cui si ottiene α = 102° (angolo C-O-H nel metanolo)

Soluzione proposta da Mauro Tonellato - ITI Marconi - Padova