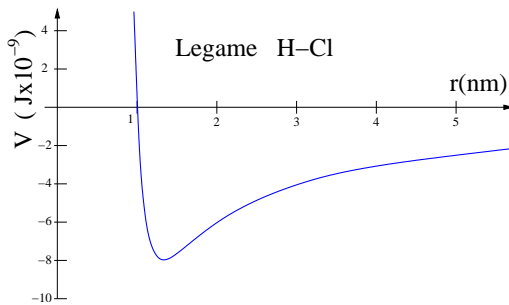


Molecole ioniche

Giuseppe Dalba

In questi appunti vogliamo valutare la frequenza di vibrazione per una molecola ionica come quella dell'acido cloridrico (HCl). Per fare questo è necessario conoscere la forma del potenziale $V(r)$ di attrazione fra i due atomi di questa molecola, mostrato in figura. Il potenziale è dato dalla somma di una attrazione coulombiana e di una repulsione che si manifesta a piccole distanze.



$$V(r) = - \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{forza attrattiva}} + \underbrace{\frac{B}{r^9}}_{\text{Forza repulsiva}}$$

$$\frac{dV}{dr} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - 9 \frac{B}{r^{10}}$$

Chiamiamo R la distanza per cui il potenziale è minimo, ovvero $0 = \frac{dV}{dr}|_{r=R}$, e determiniamo il parametro libero B in funzione di R :

$$0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} - \frac{9B}{R^{10}} \quad \Rightarrow \quad B = \frac{e^2}{36\pi\epsilon_0} R^8$$

Per piccoli spostamenti attorno a questa posizione di equilibrio ovviamente il sistema si comporta come un oscillatore armonico, la cui costante elastica è $k = \left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_{r=R}$:

$$\frac{d^2V}{dr^2} = -\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R^3} + \frac{90B}{R^{11}} = -\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R^3} + \frac{90e^2}{36\pi\epsilon_0 R^3} = \frac{2e^2}{\pi\epsilon_0 R^3} = \frac{1,84 \times 10^{-27}}{R^3} \text{Nm}^2$$

dove nell'ultima espressione R si intende misurato in metri. Quindi vediamo che k dipende solamente dalla lunghezza di legame della molecola, R , che si può dedurre da misure sullo spettro rotazionale. Per HCl si ottiene questo valore:

$$R = 1,3 \text{ \AA} \quad k = 840 \text{ N/m}$$

La costante elastica di legame ionico (fra il Cl^- ed il H^+) non è quindi qualcosa di fuori dall'ordinario. Per ricavare la frequenza di vibrazione dobbiamo calcolare la massa ridotta del sistema, tenendo presente che $m_{Cl} \sim 35m_H$ e che la massa dell'idrogeno è $m_H = 1,67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$:

$$\mu = \frac{m_H m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}} = \frac{35}{36} m_H \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = 1,1 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

Dunque, siccome la molecola di HCl ha un momento di dipolo elettrico che varia con la sua lunghezza r , dovremmo attenderci che quando vibra emetta luce a circa 10^{14} Hz , che si trova nella regione infrarossa dello spettro.