

INFORME-SE SOBRE A QUÍMICA

Eduardo Leite do Canto

Autor de *Química na Abordagem do Cotidiano* – Editora Saraiva

Como avaliar o caráter iônico em HX?

Simple e engenhoso, método está em um dos livros escritos por Pauling.

Em *The nature of chemical bond*, Linus Pauling (1901-1994) aborda* um método simples para determinar a porcentagem de caráter iônico da ligação covalente entre hidrogênio e halogênio. O método, que apesar de aproximado é bastante engenhoso, emprega medidas experimentais de momento de dipolo elétrico e de comprimentos de ligação em haletos de hidrogênio (HX).

Um **dipolo elétrico** é constituído por duas cargas de sinais contrários e de mesmo valor em módulo, $+q$ e $-q$, separadas por uma distância d . O **vetor momento de dipolo elétrico** \vec{p} tem intensidade $= qd$. A unidade SI para \vec{p} é C·m, porém ainda é bastante utilizada a unidade debye (D), cujo nome homenageia Peter Debye (1884-1966), pioneiro no estudo de momentos dipolares. A relação entre ambas as unidades é $1 \text{ D} = 3,3 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$.

Imagine que uma carga elementar $+e$ (cujo valor é $1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$) esteja separada de uma carga $-e$ por uma distância de 100 pm (1 \AA), que é da ordem de grandeza do comprimento de ligações covalentes. Nesse caso, temos:

$$\begin{aligned} &= qd = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1,0 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ &= 1,6 \cdot 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m} = 4,8 \text{ D} \end{aligned}$$

Para avaliar a porcentagem de caráter iônico em HX, o método comentado por Pauling em seu

* Linus Pauling, *The nature of chemical bond*. Ithaca: Cornell University Press, 1960. p. 78-79.

livro parte da seguinte consideração. Um íon perfeitamente esférico equivale, do ponto de vista de interações elétricas, a uma carga puntiforme localizada em seu centro. Se a ligação HX fosse 100% iônica, e desconsiderando a polarização dos íons (isto é, a distorção da nuvem eletrônica no sentido do íon de carga oposta), o dipolo do par “H⁺X⁻” consistiria de uma carga $+e$ (no centro do “H⁺”) separada de uma carga $-e$ (no centro do “X⁻”) pela distância de ligação (d). O valor de \vec{p} seria ed .

A tabela contém dados atualizados. A primeira coluna numérica apresenta o valor experimental de \vec{p} , em debyes, para os haletos HF, HCl, HBr e HI. Na segunda aparece \vec{p} em unidades SI. A terceira coluna numérica mostra a distância de ligação. Na quarta, são listados os resultados da multiplicação da carga elementar pela distância de ligação, ed . Esse deveria ser o valor de \vec{p} caso a ligação fosse 100% iônica e caso os íons não se distorcessem (isto é, caso permanecessem perfeitamente esféricos).

A divisão de \vec{p} experimental por ed é um número inferior a 1, que expressa que fração de ed é representada por \vec{p} . Em outras palavras, tal resultado expressa que fração do caráter iônico puro (ed) se deve ao momento de dipolo experimental (\vec{p}), decorrente do deslocamento real da nuvem eletrônica no sentido de X. Convertendo essa fração para porcentual, temos a estimativa da porcentagem de caráter iônico da ligação covalente polar (última coluna). Note que a mais polar delas (HF) é 57% covalente!

Dados referentes a haletos de hidrogênio e estimativa da porcentagem de caráter iônico da ligação.

	d	ed	\vec{p}	\vec{p}/ed	caráter iônico	
	(D)	($10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$)	(pm)	($10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}$)		
HF	1,91	6,37	91,68	1,47	0,43	43%
HCl	1,08	3,60	127,45	2,04	0,18	18%
HBr	0,80	2,67	141,44	2,26	0,12	12%
HI	0,42	1,40	160,92	2,57	0,05	5%



E isso tem a ver com...

- Eletronegatividade e polaridade de ligações e de moléculas — v. 1, unidade F, v. 2, unidade C, v. 3, unidade D, e vu, cap. 9

Química na Abordagem do Cotidiano, 3 volumes.
Química na Abordagem do Cotidiano, volume único.