

3.1. Interacciones intermoleculares

Momento dipolar

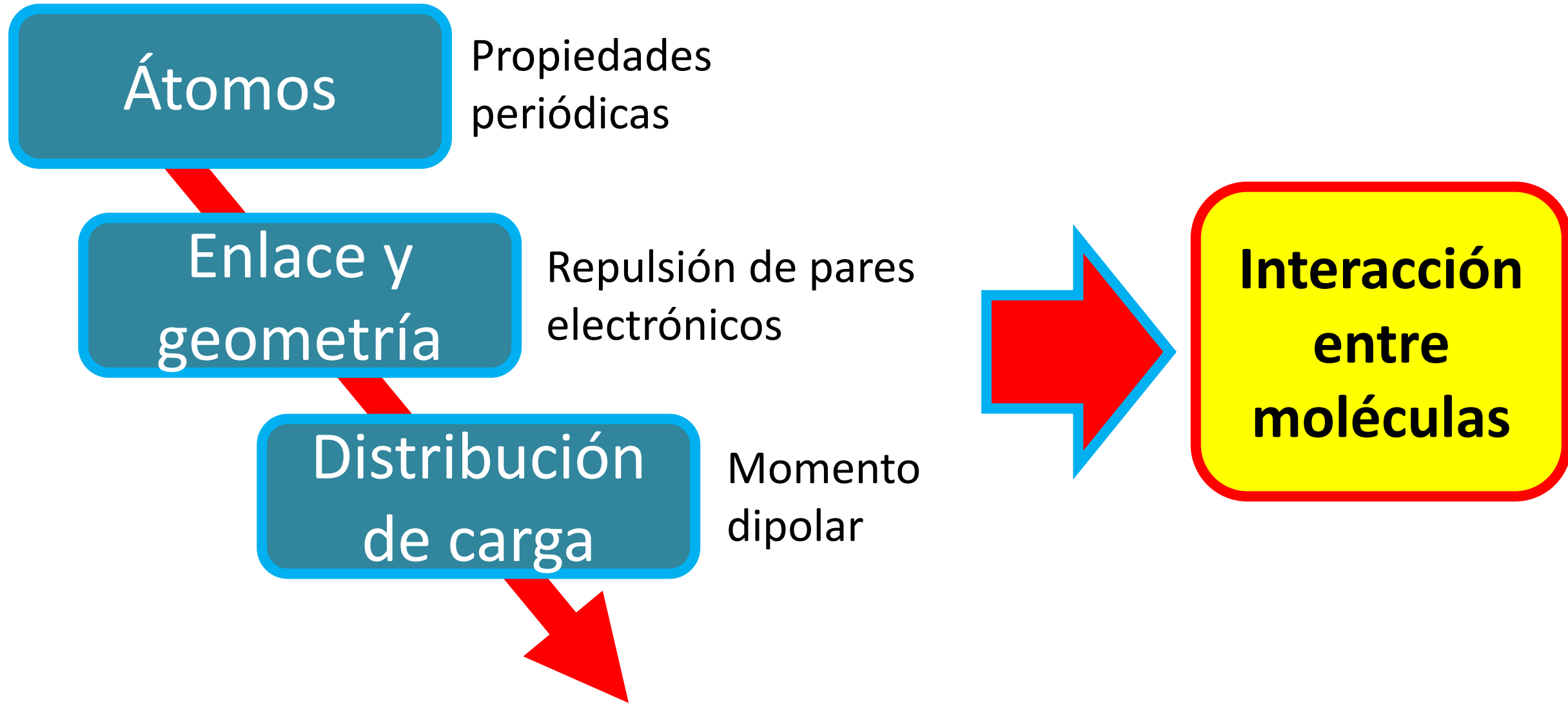
¿Qué define las propiedades de la molécula?

Propiedades de una molécula

- Momento dipolar*
- Punto de fusión y ebullición
- Constante dieléctrica
- Presión de vapor
- Solubilidad
- Reactividad

Distribución electrónica
alrededor de los átomos

Interacciones intermoleculares



...distribución electrónica...

Repulsión de los pares electrónicos

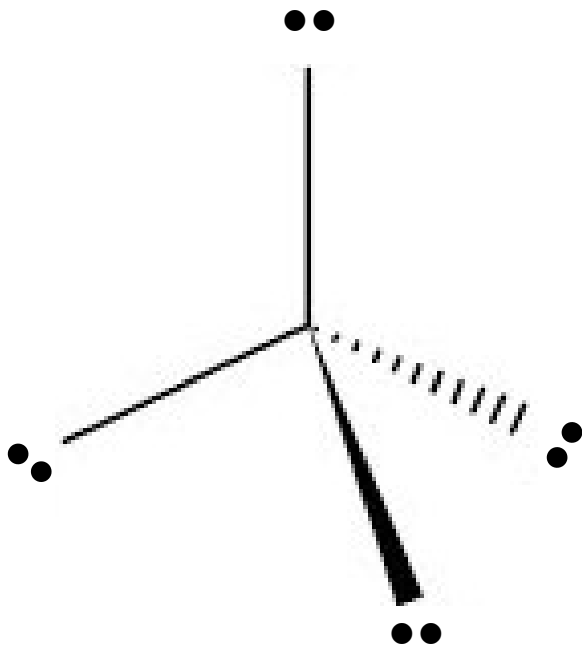
Pares electrónicos alrededor de un átomo:

2	<ul style="list-style-type: none">• Lineal
3	<ul style="list-style-type: none">• Trigonal
4	<ul style="list-style-type: none">• Tetraédrico
5	<ul style="list-style-type: none">• Bipiramide trigonal• Pirámide de base cuadrada
6	<ul style="list-style-type: none">• Octaédrico

Disposición electrónica

Acomodo de los electrones alrededor de un átomo

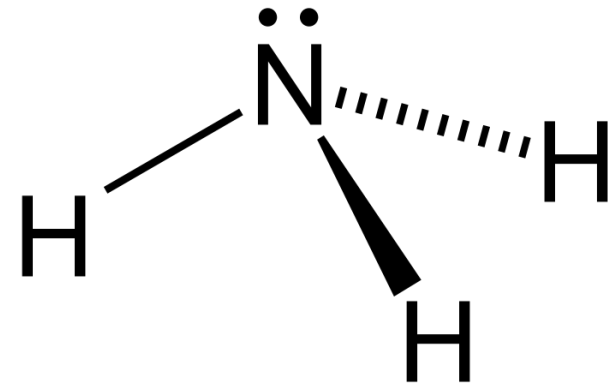
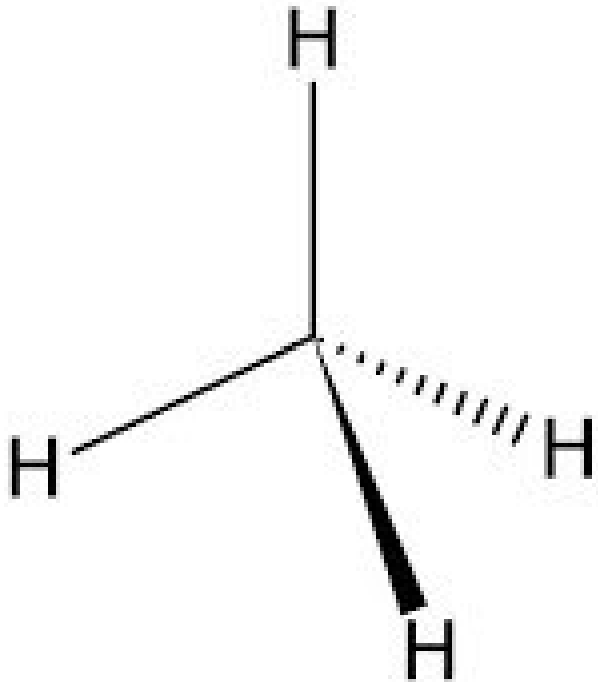
...generalmente se acomodan por pares y pueden estar libres o enlazados



Geometría

Acomodo de los átomos en el espacio, considerando las repulsiones de los electrones en la molécula

Se puede conocer por difracción de Rayos X

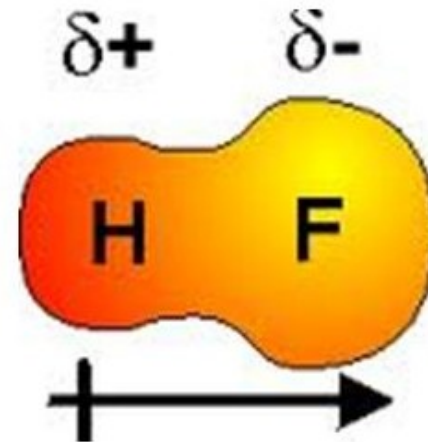
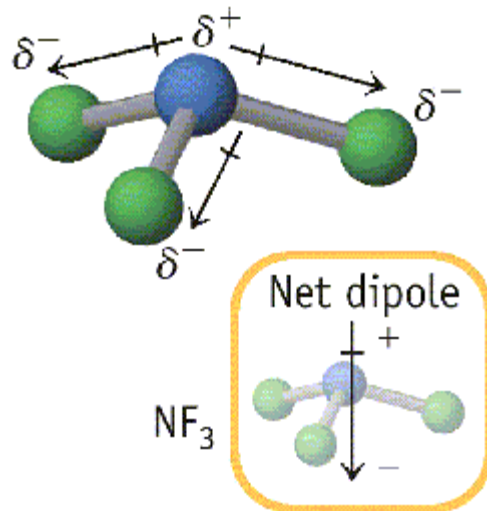


Momento dipolar

Calculada, conociendo la carga de cada átomo en la molécula

Estimada, relacionando la electronegatividad de los átomos presentes

- Es el vector que aparece entre las cargas formadas en una **molécula**



$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{l}$$

Ejercicio

Ordena de mayor a menor, la magnitud del momento dipolar de las siguientes moléculas:

- Fluoruro de hidrógeno
- Éter etílico
- Agua
- Fosfina (PH_3)
- Dibromodichlorometano

Ejercicio

Ordena de mayor a menor, la magnitud del momento dipolar de las siguientes moléculas:

- μ ↑
1. Fluoruro de hidrógeno
 2. Agua
 3. Dibromodichlorometano
 4. Éter etílico
 5. Fosfina

Interacciones Intermoleculares

Interacciones débiles
(0.17 - 4.0 kcal/mol)

- Puente de Hidrógeno
- Polarizabilidad (Van der Waals, efectos hidrofóbicos, interacciones de halógeno)
- Interacciones electrostáticas

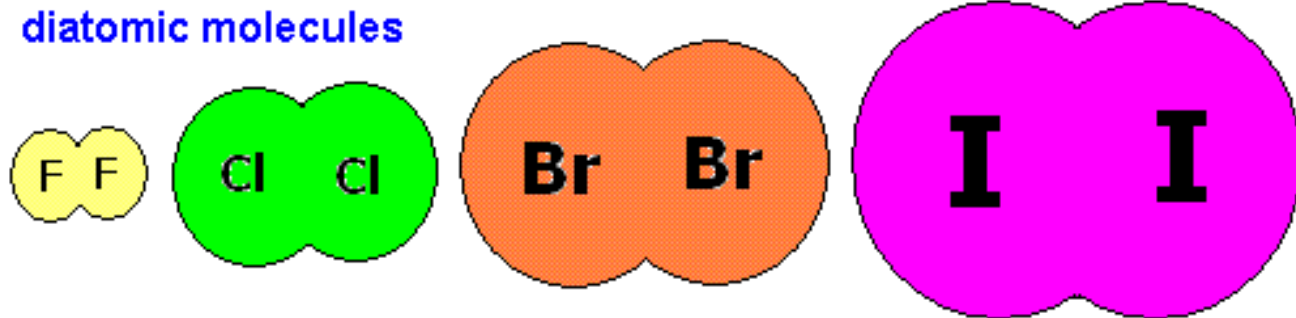
Interacciones Intermoleculares

-punto de vista electrostático-

Tipo	Intensidad	Efecto energía - distancia
Covalente	Muy fuerte	De largo alcance
Iónica (ión-ión)	Muy fuerte	De largo alcance ($1/r$)
Ión-dipolo	Fuerte	De corto alcance ($\sim 1/r^2$)
Dipolo-dipolo	Moderadamente Fuerte	De corto alcance ($\sim 1/r^3$)
Ión-dipolo inducido	Débil	De muy corto alcance ($\sim 1/r^4$)
Dipolo – dipolo inducido	Muy débil	De mucho menor corto alcance ($\sim 1/r^5$)
Dipolo instantáneo – dipolo inducido	Extremadamente débil	Extremadamente de corto alcance ($\sim 1/r^6$)

Comparación de Interacciones Intermoleculares con fuerzas similares

dipolo instantáneo – dipolo inducido



Puntos de ebullición	-188 °C	-34.4 °C	58.8 °C	184.3 °C
X_2	F_2	Cl_2	Br_2	I_2

Polarizabilidad

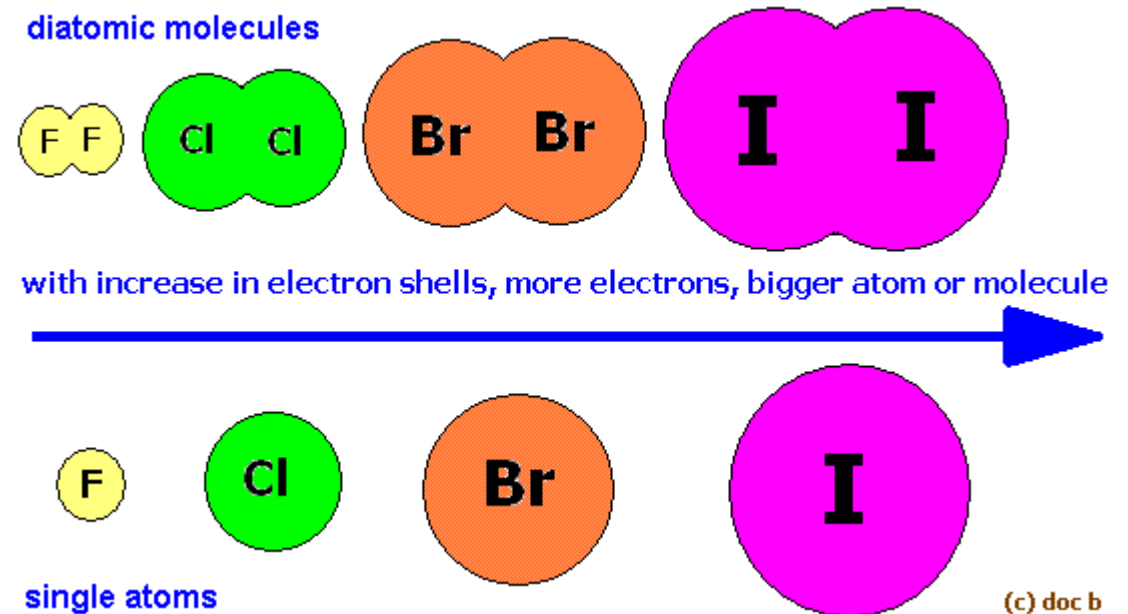
Capacidad o habilidad de un átomo o molécula para generar dipolos.

Los términos:

Polarizable

Polarizante

ayudan a entender la interacción entre moléculas y sirven para predecir fenómenos desde la perspectiva covalente o iónica



Comparación de Interacciones Intermoleculares con fuerzas similares

dipolo – dipolo

HX	Punto de ebullición	H ₂ A	Punto de ebullición
HF	19.5 °C	H ₂ O	100 °C
HCl	-85 °C	H ₂ S	-60 °C
HBr	-66.8 °C	H ₂ Se	-41 °C
HI	-35.36 °C	H ₂ Te	-2.2 °C

Puente de Hidrógeno

Tradicional:

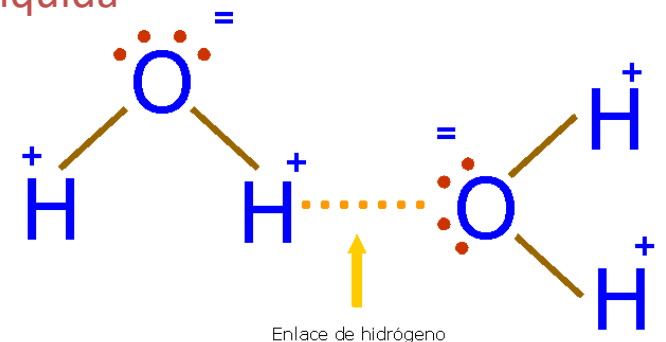
Interacción direccional que ocurre entre un átomo de hidrógeno (unido a un átomo electronegativo) y el par electrónico de otro átomo electronegativo



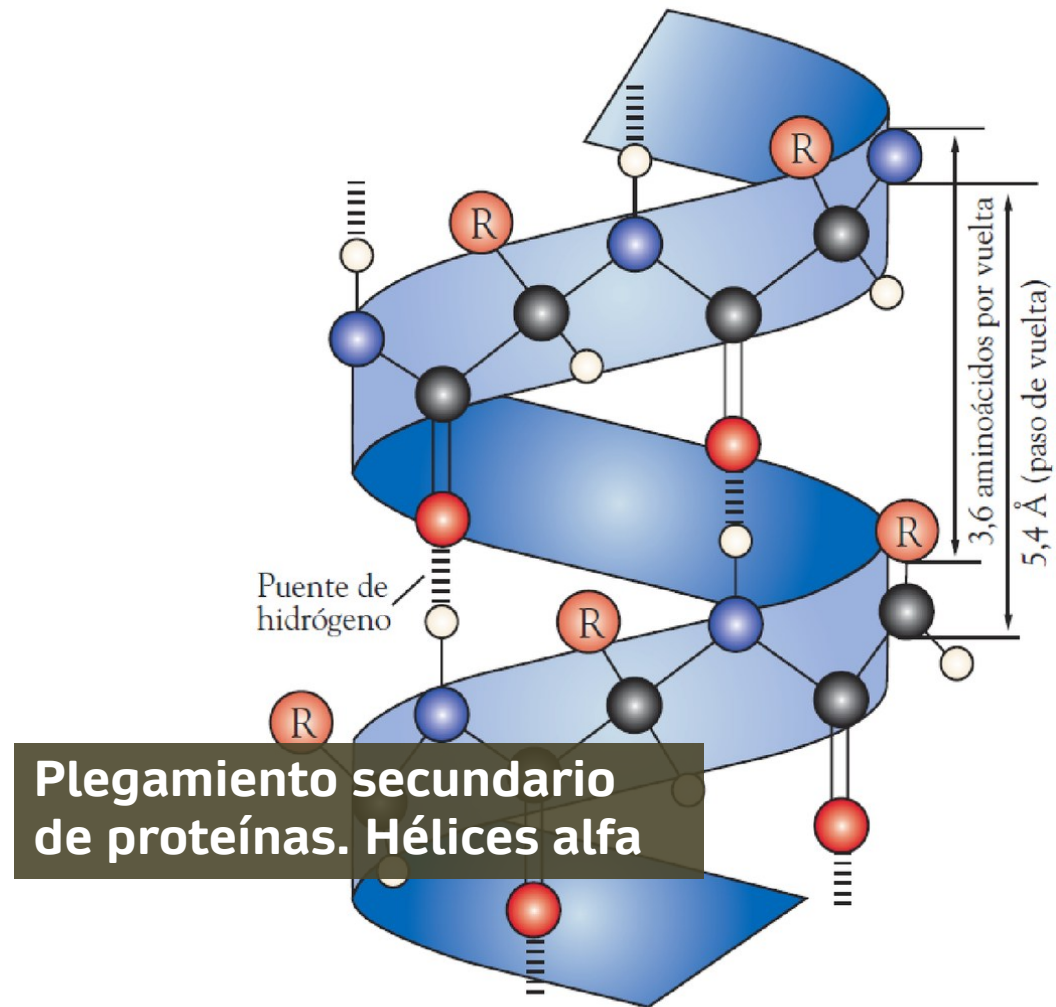
Nu = átomo electronegativo

tradicionalmente **N, O y F**
pero también hay interacciones más débiles con S, P y Cl

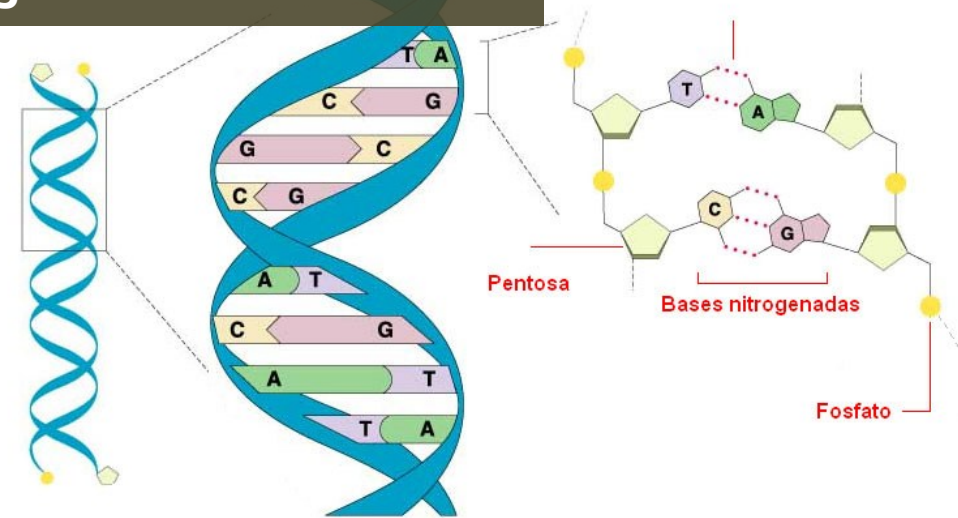
Ejemplo: La interacción de moléculas de agua en fase líquida



Ejemplos de puentes de hidrógeno



**Formación de la doble hélice en el ADN.
Interacción de las bases nitrogenadas**



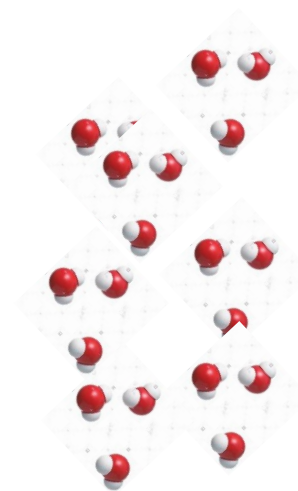
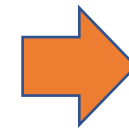
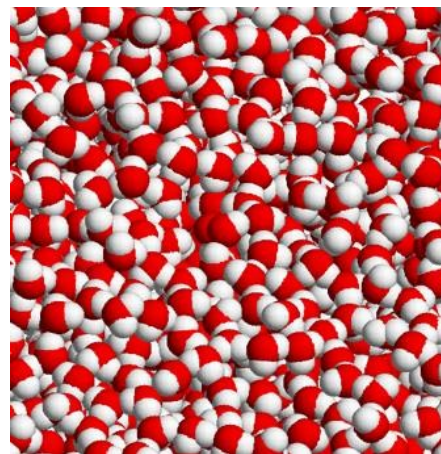
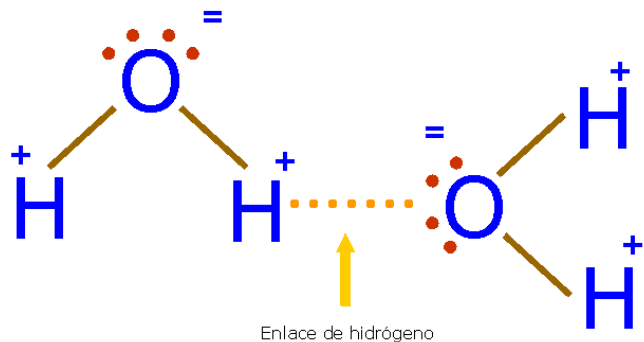
Parámetros de enlace

- Distancia entre átomos
 - » 1.54 Å (para un enlace C-C sencillo)
 - » 2.80 Å (para un enlace metal-ligante promedio)
 - » 2.5 - 3.5 Å (para un puente de hidrógeno promedio)
- Energía necesaria para separarlos (aproximada)
 - » 50 - 170 kcal/mol para enlaces covalentes
 - » 4.7 - 6.0 kcal/mol para puentes de hidrógeno
 - » 2.4 - 3.6 kcal/mol para ión-dipolo
 - » 0.5 - 1.2 kcal/mol para dipolo-dipolo
 - » 0.17 - 0.6 kcal/mol para dipolo instantánea-dipolo inducido

Punto de fusión / punto de ebullición

La predicción de puntos de fusión y de ebullición depende enteramente de interacciones entre moléculas de una misma sustancia entre si.

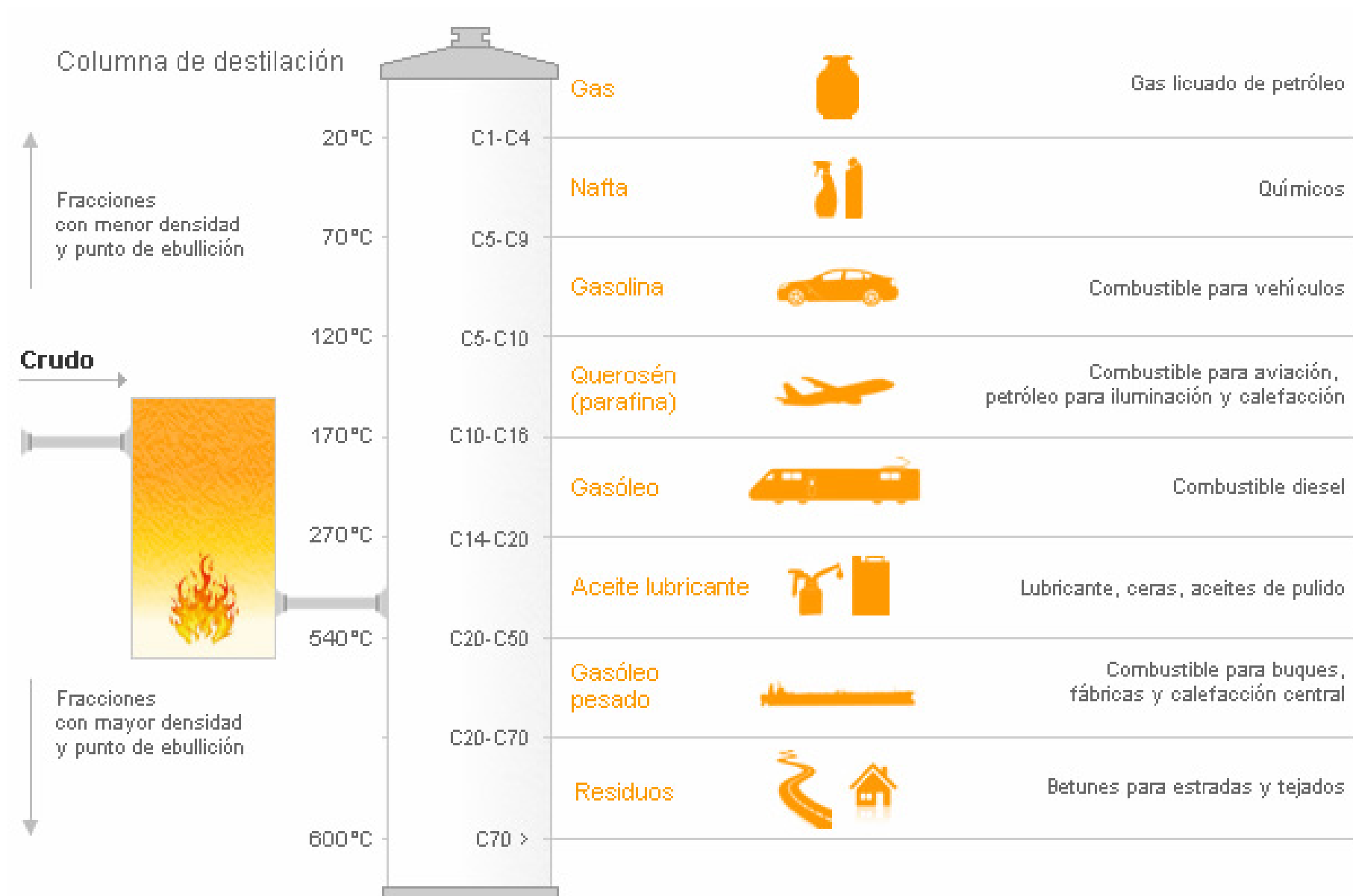
- Interacción de una molécula con otras moléculas del mismo compuesto



Cracking del petróleo

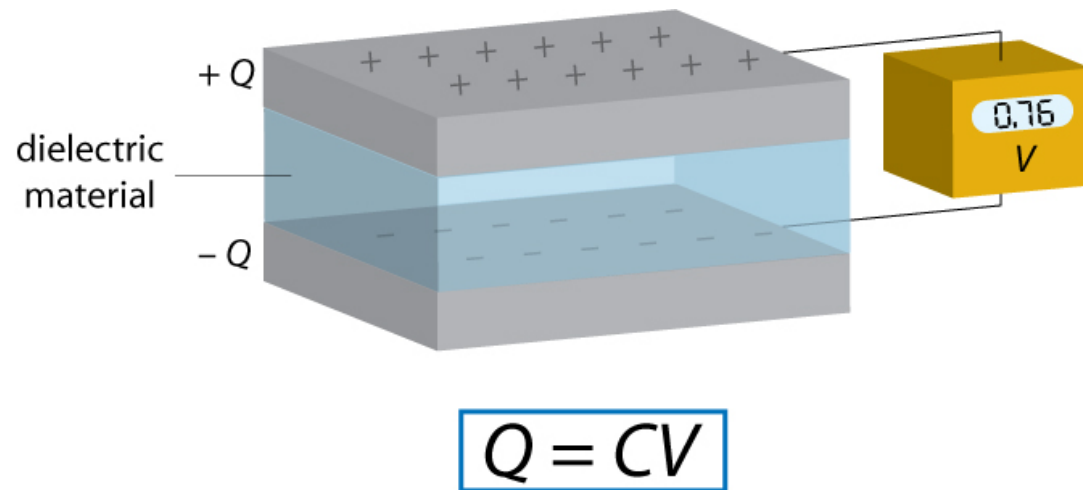
*polarizabilidad

*dipolo instantáneo-
dipolo inducido



Constante dieléctrica (experimental)

$$\epsilon = \frac{C_f}{C_i} =$$



Solvente	ϵ_r
Agua	80.4
Dimetilsulfoxido	45.0
Dimetilformamida	37.7
Etilenglicol	37.0
Metanol	32.6
Etanol	24.3
Cloroformo	4.8
Tolueno	2.4
Hexano	1.9