

The background features a complex molecular structure, possibly a protein or a large organic molecule, rendered in a dark blue and grey color scheme. The structure is composed of numerous atoms (represented as spheres) connected by bonds (represented as lines). A bright, glowing light source is positioned at the center of the structure, creating a strong lens flare and illuminating the surrounding molecules, giving the impression of a tunnel or a pathway through the molecular framework.

FUERZAS INTERMOLECULARES

¿QUÉ MANTIENE A LA
NATURALEZA UNIDA?

LIQUIDO-SÓLIDO-GASEOSO

- Cuando una sustancia se encuentra en **estado gaseoso**, *la energía cinética de sus moléculas es mayor que las atracciones entre las mismas*. Esto permite que las moléculas se muevan libremente (se expande el gas y ocupa el recipiente)
- En los **líquidos** las fuerzas intermoleculares son lo bastante fuertes como para mantener las moléculas muy cerca unas de las otras, por ello los líquidos tienen volumen constante a una temperatura dada, no son compresibles y son mucho más densos. No obstante las atracciones intermoleculares no son tan fuertes como para que las moléculas no puedan moverse unas con respecto a otras y por eso los líquidos adquieren la forma del recipiente y son fluidos (se vierten y esparcen).
- En los sólidos las fuerzas de atracción entre las moléculas son tan fuertes que las moléculas quedan prácticamente fijas (excepto movimientos vibracionales). Las energías de atracción de las moléculas no dependen sustancialmente de la temperatura, mientras que su energía cinética sí, por lo tanto en la medida en que disminuye la temperatura el papel de las atracciones moleculares se hace mayor y las sustancias pasan de gas a líquido y de líquido a sólido.

Existen cuatro tipos de enlaces químicos:

1. enlace metálico, que proviene de la interacción coulombiana electrostática entre los núcleos positivos de los átomos y una carga negativa debido al desplazamiento de los electrones de valencia.
2. Enlace covalente, resulta de compartir un par electrónico por dos átomos.
3. Enlace iónico, se debe a fuerzas atractivas y repulsivas entre iones y a las fuerzas repulsivas de corto alcance entre capas electrónicas.
4. Enlace molecular, están condicionadas por la existencia de interacciones electrostáticas dipolo-dipolo de diferentes orígenes, que se describen como de Keesom, Debye y London.
5. Enlace hidrógeno, es creado por la interacción entre un átomo de hidrógeno ligado a un átomo electronegativo A ($A=N, O, F, \dots$) y un átomo electronegativo B portador de un par libre ($B=N, O, \text{halógeno}, \dots$).

Enlace covalente

Algunos valores:

P-P 200 kJ/mol C-C 346 kJ/mol,
H-H 432 kJ/mol Si-F 565 kJ/mol

“fuerza que opera a distancias cortas”

“son totalmente direccionales”

Enlace iónico

$$E \sim 1/r$$

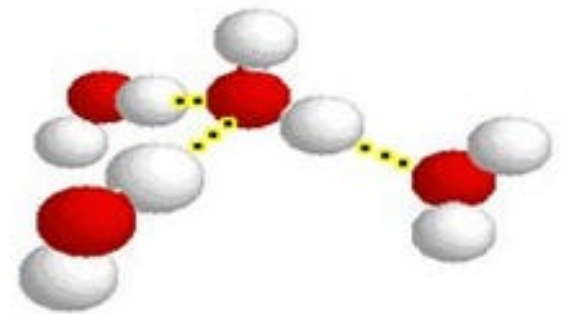
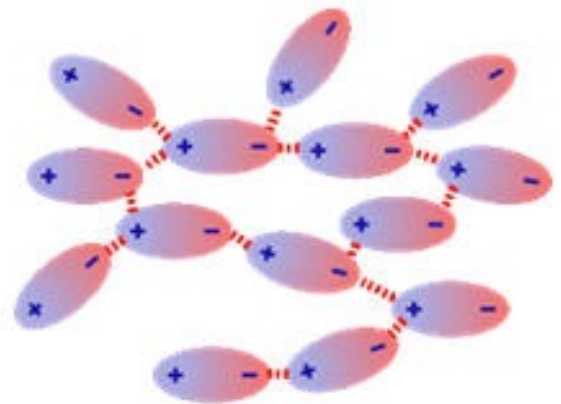
Para los iones Li^+ y F^- se puede estimar una energía de 665 kJ/mol.

“el tamaño y número de iones determina la estructura cristalina”

Clasificación

Se dividen en dos grandes grupos:

- Fuerzas ión dipolo (electrotática)
- Fuerzas de van der Waals
 - ✓ dipolo - dipolo
 - ✓ Puente de Hidrógeno
 - ✓ dipolo - dipolo inducido
 - ✓ Fuerzas de dispersión (fuerzas de London)



FUERZAS ION-DIPOLO

Puede pensarse a un dipolo molecular como dos cargas iguales y opuestas (q_{\pm}), separadas por una distancia r' . El momento dipolar, μ , está dado por:

$$\left| \vec{\mu} \right| = qd$$

y la unidad es el Debye = 3.34×10^{-30} C.m.

La energía de una interacción ión-dipolo está dado por:

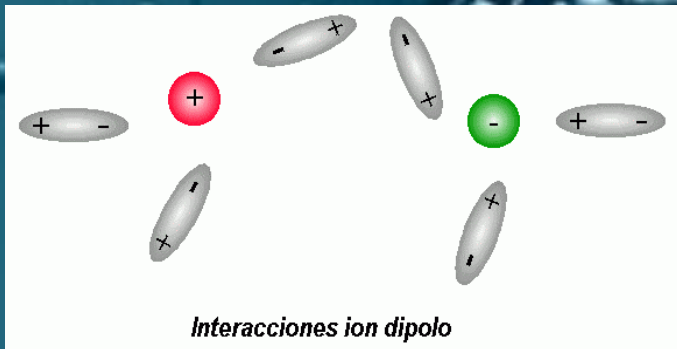
$$E = -\frac{q p}{4\pi\epsilon d} \cos\theta$$

donde

$$\theta = (\vec{p}, \vec{d})$$

y d es la distancia del ión al centro del dipolo.

Estas interacciones son semejantes a las ion-ion, excepto porque son más sensibles a la distancia ($1/r$) y tienden a ser más débiles ya que las cargas q_+ y q_- son menores que una carga eléctrica completa. Las fuerzas ion-dipolo son importantes en las soluciones de compuestos iónicos en disolvente polares.



•DIPOLO-DIPOLO

La energía de interacción entre dos dipolos se puede expresar de la siguiente manera:

$$E = -k \frac{\mu_1 \mu_2}{r^3}$$

A temperaturas elevadas y en fase gaseosa, habrá una tendencia a que el movimiento por energía térmica disponga sin orden la orientación de los dipolos y con ello se reducirá considerablemente la energía de interacción. Estas interacciones disminuyen rápidamente con la distancia,

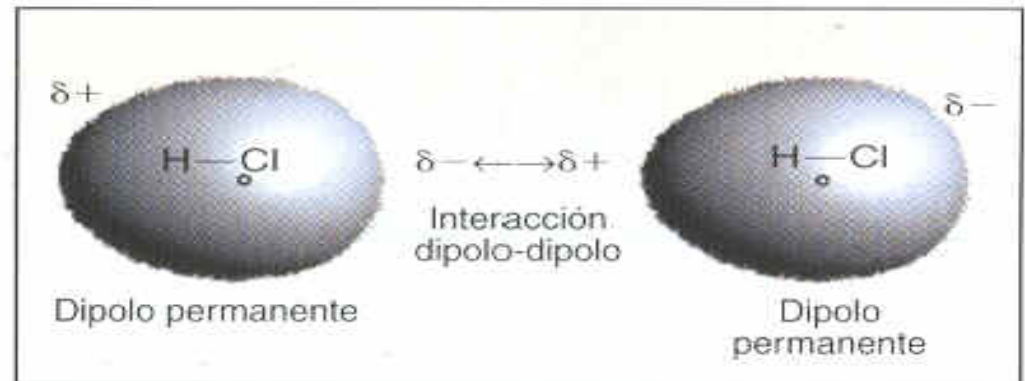
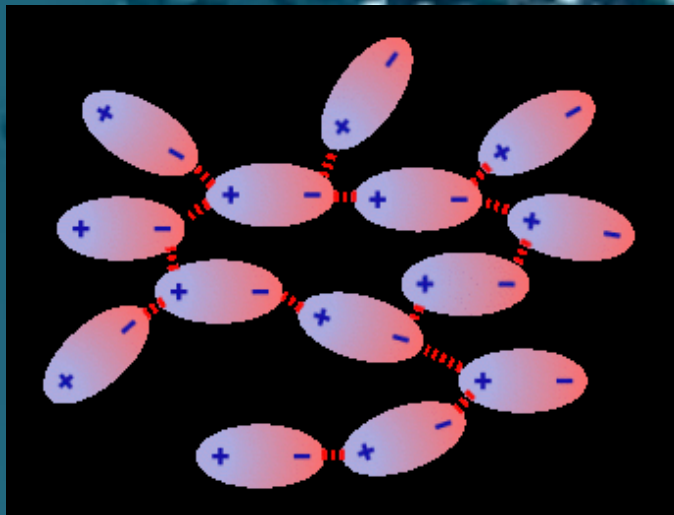
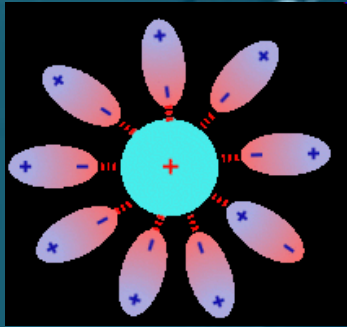


Fig. 12. Fuerzas entre dipolos.

- Ion -DIPOLO INDUCIDO



Si un ion se acerca a una molécula no polar deformara la nube electrónica. La polarización dependerá de su capacidad de la especie y del campo polarizante producido por el ion

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 \alpha e^2}{r^4}$$



Fig. 13. Fuerzas entre dipolo y dipolo inducido.

Si se trata de un dipolo que induce el dipolo de una especie no polar, entonces la energía es:

$$E = -\frac{\mu^2 \alpha}{r^6}$$

Estas fuerzas son eficaces a distancias muy cortas. Su estudio es principalmente en soluciones de compuestos iónicos o polares en disolventes no polares

FUERZAS DE VAN DER WAALS

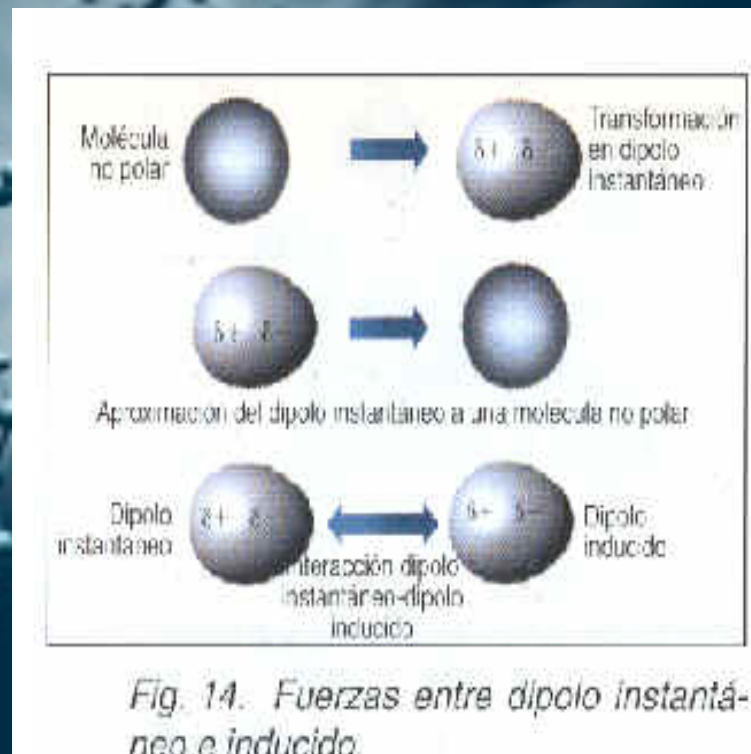
FUERZAS DE DISPERSIÓN DE LONDON

•DIPOLO INSTANTÁNEO

Como causa de un desequilibrio instantáneo en la distribución electrónica puede provocarse un dipolo. Entonces esto también provoca un dipolo en las moléculas adyacentes.

Las *fuerzas de London* ejercen su acción a distancias muy cortas, y son las más débiles de todas las atracciones. Estas aumentan rápidamente con el volumen molecular y el número de electrones polarizables.

$$E = -\frac{1}{r^6}$$



H₂, pm=2; p. eb.=20K

D₂, pm=4; p, eb.=23K

T₂, pm=6; p. eb.=25K

4. El conjunto de energías de atracción se pueden escribir de la forma

$$E_a = -\frac{A}{d^6}$$

y el conjunto de energías de repulsión se pueden escribir de la forma:

$$E_r = +\frac{B}{d^{12}}$$

Todas las interacciones se llaman genralmente *interacciones de Van der Waals*. La energía potencial de Van der Waals se escribe:

$$E_W = E_a + E_r = -\frac{A}{d^6} + \frac{B}{d^{12}}$$

5. El llamado *potencial de Lennard-Jones*, es una expresión para la energía potencial de interacción de dos átomos o moléculas no polares:

$$V_{L-J}(d) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{d} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{d} \right)^6 \right]$$

ε es la distancia al mínimo y σ es la distancia donde $V(d)$ pasa por cero.

1.4. Énergie de Van der Waals

Mis à part le cas de molécules très polaires (H_2O , NH_3 , ...) où l'énergie de Keesom est forte, c'est l'énergie de London qui est le terme prépondérant dans l'expression de l'énergie de Van der Waals E_{VW} .

$$E_{\text{VW}} = E_{\text{K}} + E_{\text{D}} + E_{\text{L}}$$

$$E_{\text{VW}} = - \left[\frac{2}{3} \frac{\mu^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{kT} + \frac{2\alpha\mu^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} + \frac{3}{4} \frac{\alpha^2 E_i}{(4\pi\epsilon_0)^2} \right] \cdot \frac{1}{r^6}$$

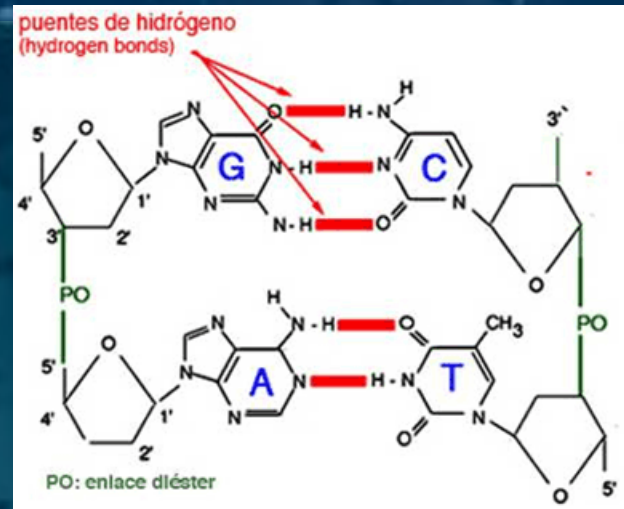
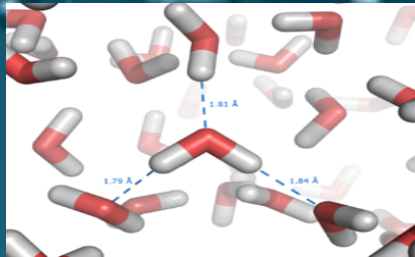
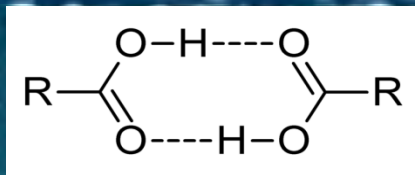
Atomes ou molécules	E_{K} (kJ · mol ⁻¹)	E_{D} (kJ · mol ⁻¹)	E_{L} (kJ · mol ⁻¹)	E_{VW} (kJ · mol ⁻¹)
Ar	0	0	8,50	8,50
Cl ₂	0	0	30,80	30,80
CO	0,005	0,01	8,70	8,71
HCl	3,30	1,00	16,80	21,10
H ₂ O	36,32	1,92	9,00	47,24

Si l'énergie de Van der Waals est très faible, les températures de changement d'état (T_{fus} et $T_{\text{éb}}$) sont basses et la différence $T_{\text{éb}} - T_{\text{fus}}$ faible, comme le montre le tableau suivant :

Atomes ou molécules	H ₂	Ne	Ar	O ₂	N ₂	CO	HCl	Cl ₂
E_{VW} (kJ · mol ⁻¹)	1,0	2,5	8,5	8,6	7,8	8,7	21,1	30,8
T_{fus} (K)	14	24	84	54	63	74	158	172
$T_{\text{éb}}$ (K)	20,5	27	87	64	77	81,5	188	238,5

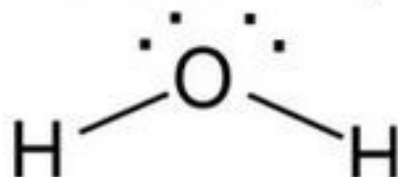
• PUENTES DE HIDROGENO

El **enlace de hidrógeno** ocurre cuando un átomo de hidrógeno es enlazado a un átomo fuertemente electronegativo como el N, el O o el F. De esta manera el hidrógeno parcialmente positivo interactúa con otros átomos electronegativos de otra molécula (vgr N, O o F). Por otra parte, cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre el H y el átomo interactuante, más fuerte será el enlace. Estos fenómenos resultan en una interacción estabilizante que mantiene ambas moléculas unidas. Un ejemplo claro del enlace de hidrógeno es el agua. Los enlaces de hidrógeno proveen también la fuerza intermolecular que mantiene unidas ambas hebras en una molécula de ADN.

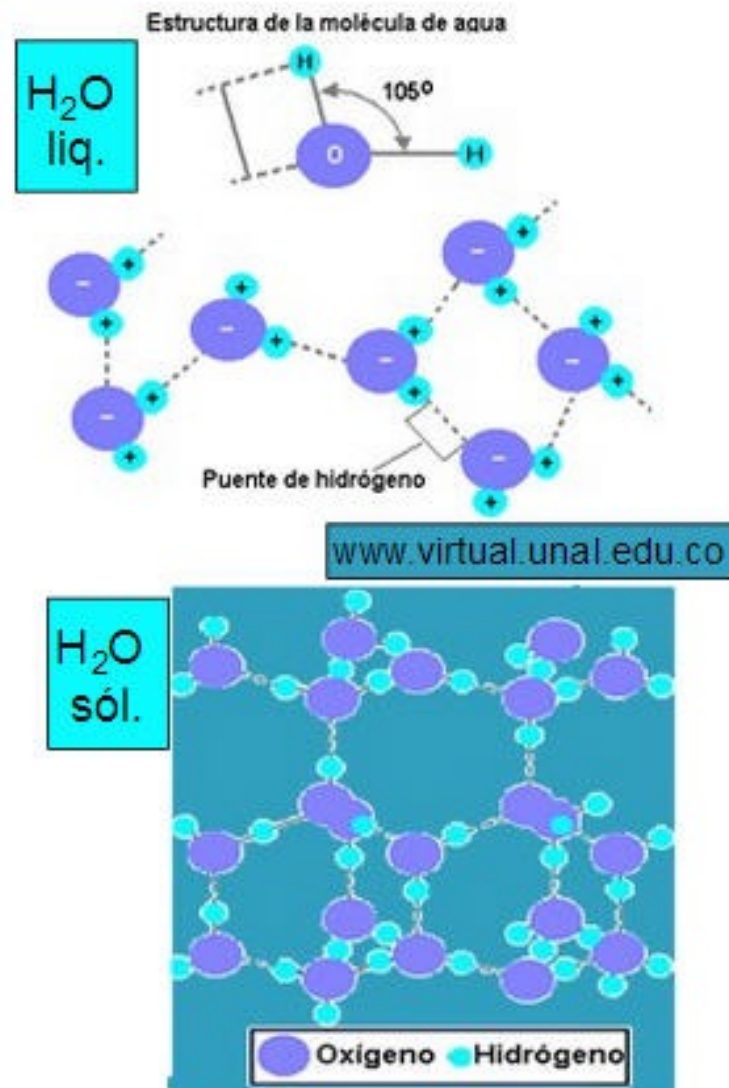


PUENTE DE HIDRÓGENO

- ▶ Son un tipo especial de atracción dipolo-dipolo.
- ▶ Ocurre en moléculas muy polares que poseen átomos muy electronegativos (F, O, N) unidos a hidrógeno. Ejemplos: HF; H₂O y NH₃.
- ▶ La unión se establece entre los pares de e⁻ libres y el átomo de H.



- ▶ Son fuerzas intermoleculares muy intensas y permanentes.



Ejemplo en el DNA

