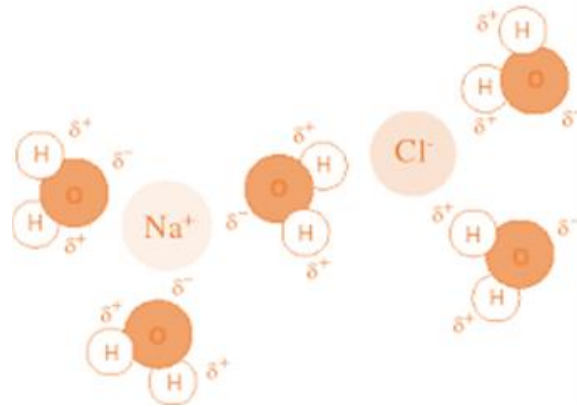


Fuerzas químicas: interacciones intermoleculares



1310 QUÍMICA INORGÁNICA I

PROFESOR: ZURISADAI PADILLA GÓMEZ

Tipos de especies

Para poder identificar la manera en que interactúan las especies químicas, es necesario identificarlas o clasificarlas.

- ❑ **Iones**: Son especies que tienen **cargas** eléctricas **completas** (positivas o negativas).
- ❑ **Moléculas polares**: Manifiestan **cargas parciales** debidas a los momentos dipolares que se presentan en la molécula.
- ❑ **Moléculas no polares**: La mayor parte del tiempo carecen de cargas eléctricas.

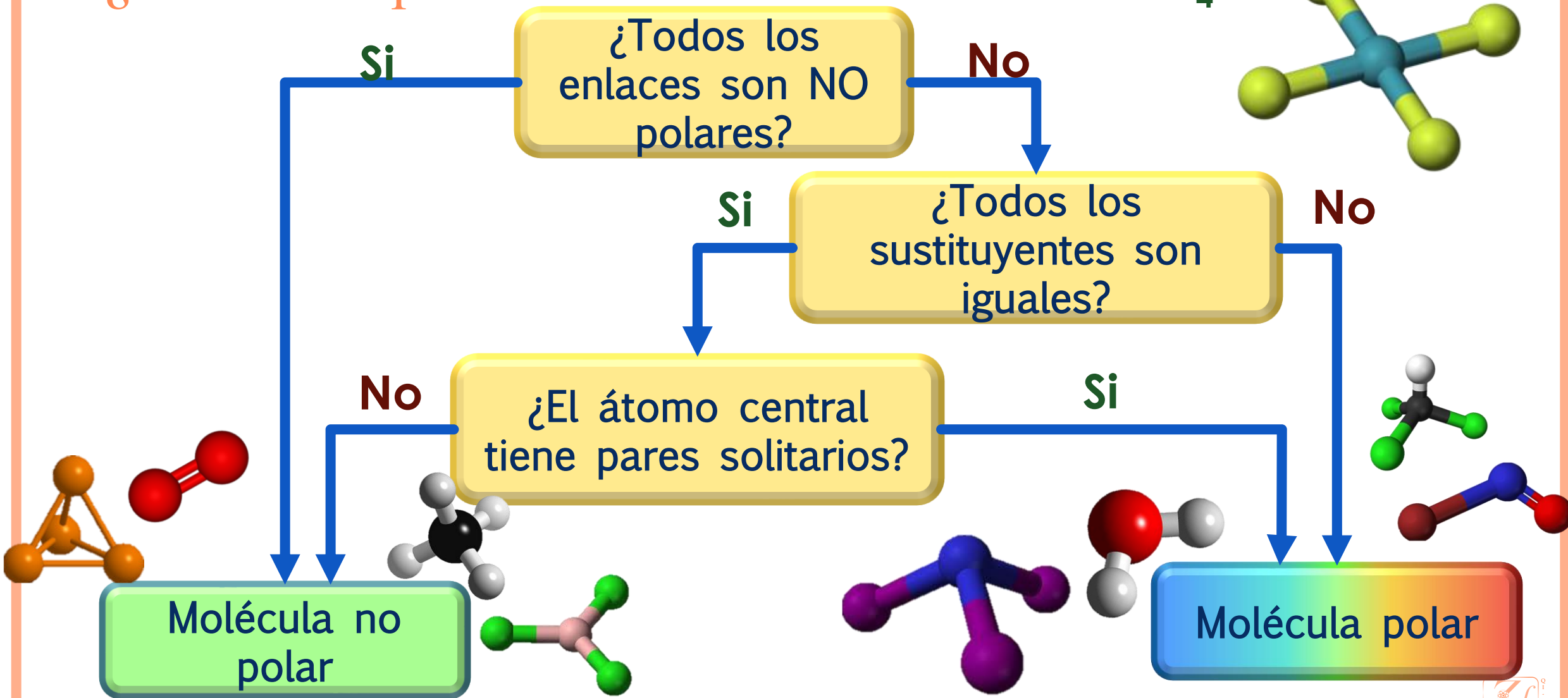
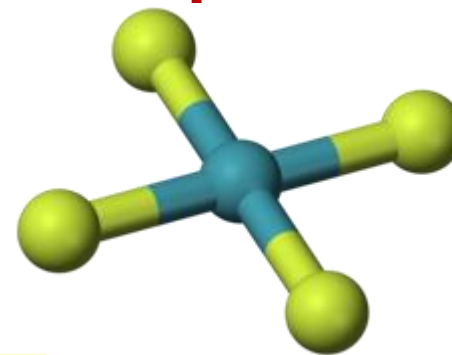
Tipos de especies

Identificar iones es muy sencillo. Basta con identificar la carga total que tiene.

Lo que a veces se complica es discernir si una molécula es polar o no polar.

¿Polar o no polar?

¡Hay excepciones!
 XeF_4



Tipos de interacciones

Una vez identificando el tipo de especies que interactúan, resulta sencillo conocer la interacción intermolecular (o *inter especie*) que presentan.

	Iónica	Polar	No polar
Iónica	Ion – ion (enlace iónico)	Ion - dipolo	Ion – dipolo inducido
Polar	*	Dipolo - dipolo	Dipolo – dipolo inducido
No polar	*	*	Dipolo instantáneo – dipolo inducido

Tipos de interacciones

¿Cuál de las interacciones es más fuerte?

Tabla 1. Interacciones entre átomos y moléculas.

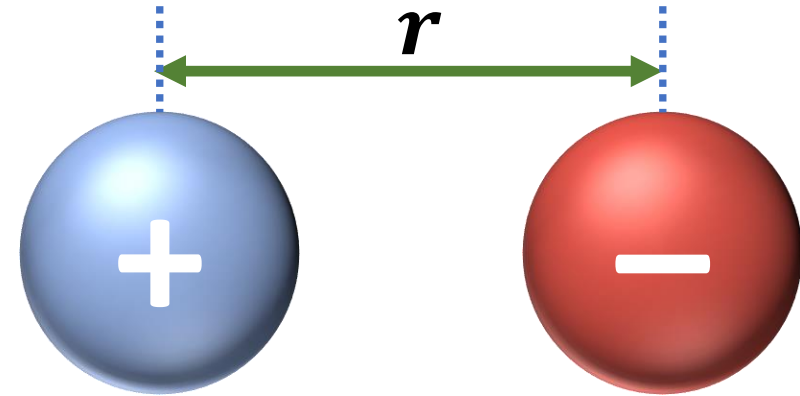
Tipo de interacción	Intensidad	Función energía-distancia
Covalente ^a	Muy fuerte	Compleja, pero comparativamente de largo alcance
Iónica ^a	Muy fuerte	$1/r$, comparativamente de largo alcance
Ion-dipolo	Fuerte	$1/r^2$, de corto alcance
Dipolo-dipolo	Moderadamente fuerte	$1/r^3$, de corto alcance
Ion-dipolo inducido	Débil	$1/r^4$, de muy corto alcance
Dipolo-dipolo inducido	Muy débil	$1/r^6$, de alcance extremadamente corto
Dipolo instantáneo-dipolo inducido	Extremadamente débil	$1/r^6$, extremadamente de corto alcance

^a Interacciones identificadas generalmente en enlaces interatómicos.

Energía de interacción

Ion - ion (enlace iónico).

$$E = \frac{z^+ z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



En donde:

z^+ y z^- son los **números de carga** de los iones.

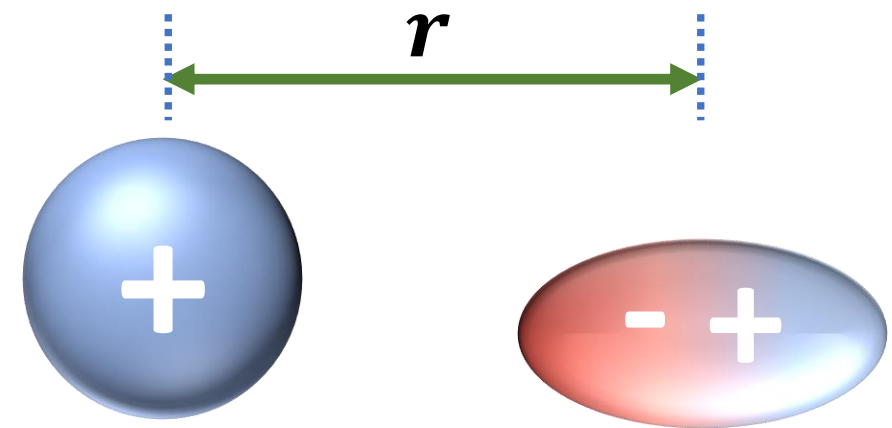
e es la carga fundamental

La carga eléctrica es la característica clave para los iones.

Energía de interacción

Ion - dipolo.

$$E = -\frac{|Z^{\pm}| \mu e}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$



En donde:

μ es la magnitud del **momento dipolar** de la molécula.

Dicho momento dipolar es la característica clave de las moléculas clave.

Energía de interacción

$$\mu = qd$$

En donde:

q es el tamaño de la carga.

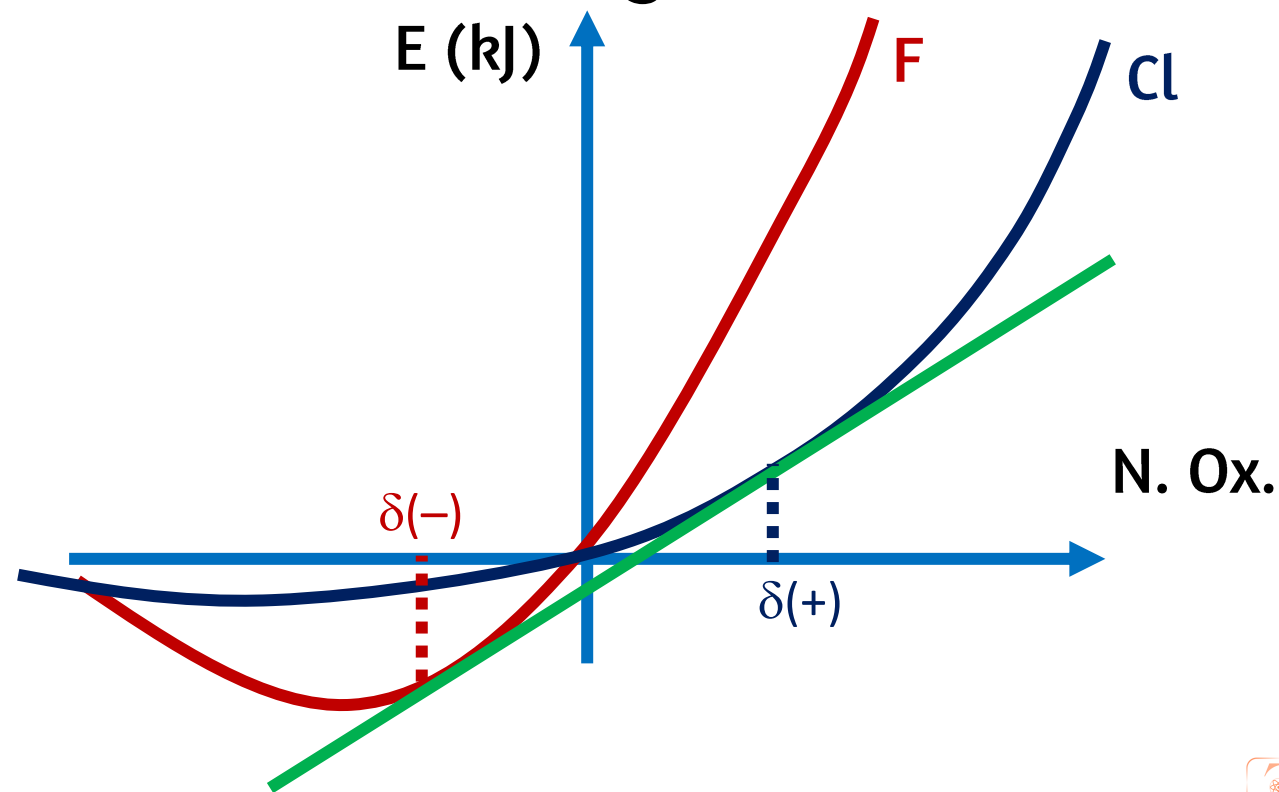
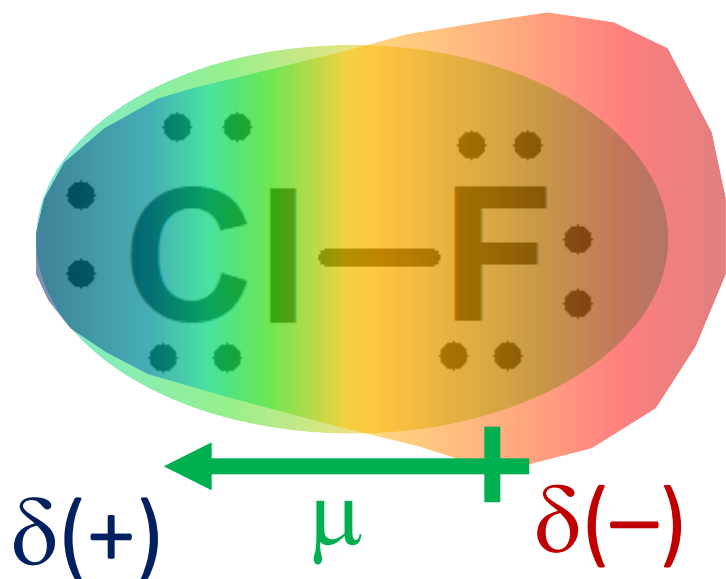
d es la distancia que separa las cargas.

De forma cualitativa:

- ✓ Dos átomos unidos de **diferente** electronegatividad manifestarán un dipolo eléctrico (enlace polar)
- ✓ Las cargas que se generan son **parciales**.

Energía de interacción

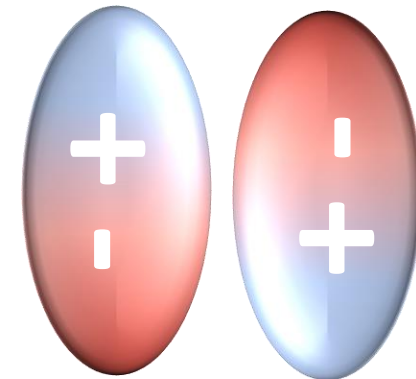
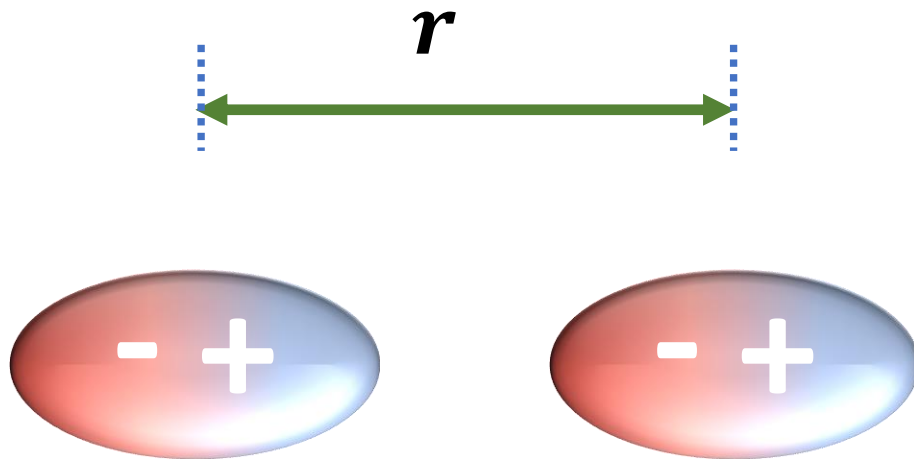
Una forma de estimar las cargas parciales en la molécula es encontrando una *electronegatividad común* de las especies enlazadas (retomando la estrategia de Jaffé)



Energía de interacción

Dipolo - dipolo

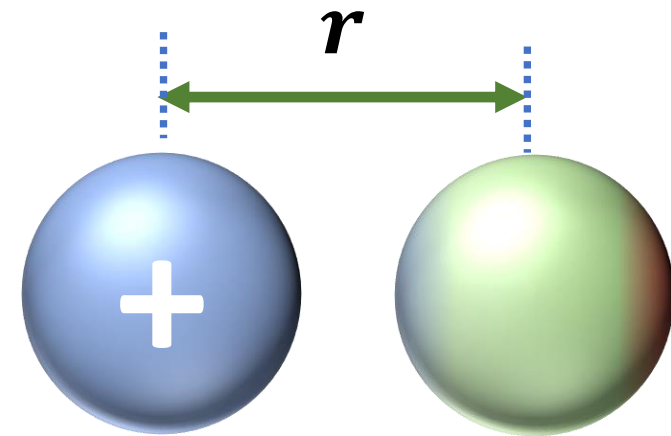
$$E = \frac{-2\mu_1\mu_2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$



Energía de interacción

Ion - dipolo inducido.

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



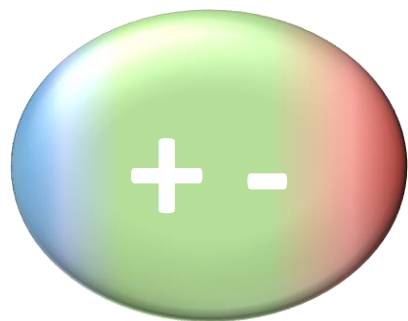
En donde:

α es la **polarizabilidad** de la especie no polar

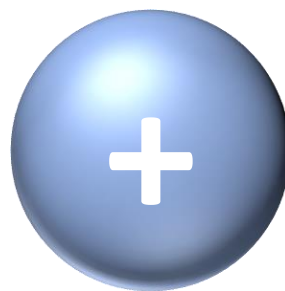
La polarizabilidad es la característica clave de las especies no polares

Energía de interacción

La polarizabilidad α es una medida de la **facilidad** con la que la densidad ("nube") electrónica de una especie se deforma al hacerla interactuar con cargas eléctricas.



Menos polarizable



Más polarizable

Energía de interacción

En general la polarizabilidad es **mayor** cuando:

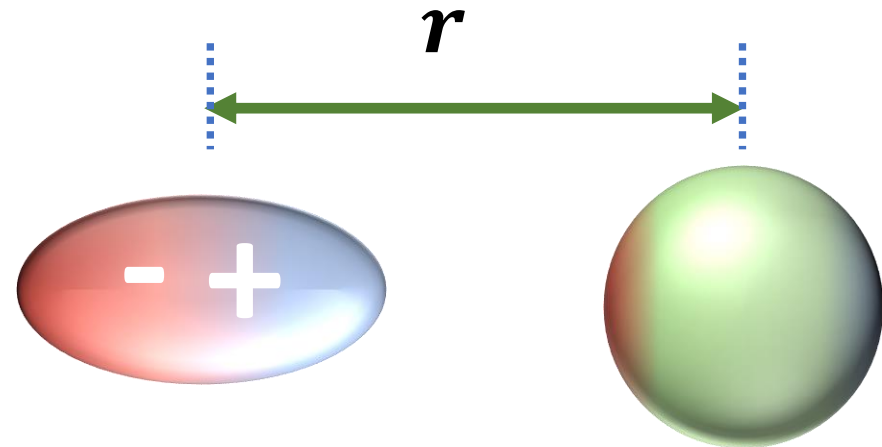
- La especie es de gran tamaño.
- La especie tiene átomos poco electronegativos.

- En especies iónicas, la polarizabilidad aumenta cuanto mayor sea la **carga negativa**.

Energía de interacción

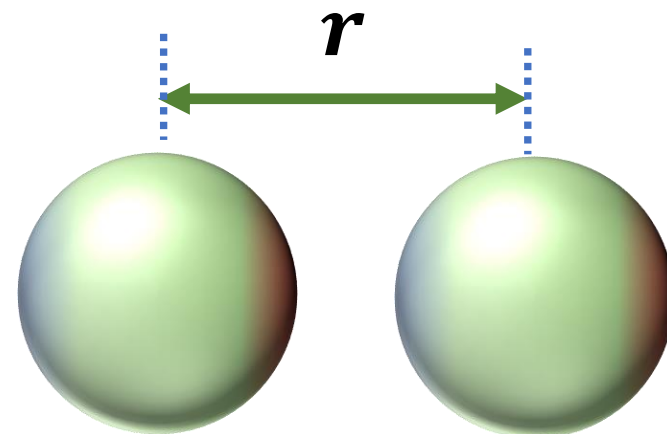
Dipolo - dipolo inducido.

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



Dipolo instantáneo - dipolo inducido.

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



Fuerzas de repulsión.

Fuerzas que se manifiestan cuando la distancia de separación es extremadamente corta.

$$E = \frac{k}{r^n}; n \in [6, 12]$$

A tal proximidad las interacciones repulsivas núcleo-núcleo y nube electrónica-nube electrónica son más eficientes.

Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

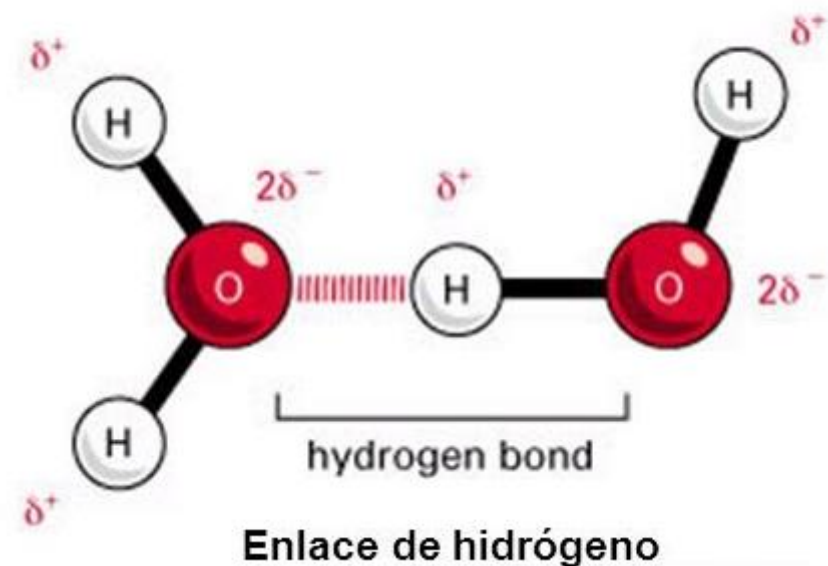
Existe un **enlace de hidrógeno** cuando un átomo de hidrógeno se encuentra ***enlazado a dos o más átomos***.



Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

¿Qué indica la evidencia experimental?

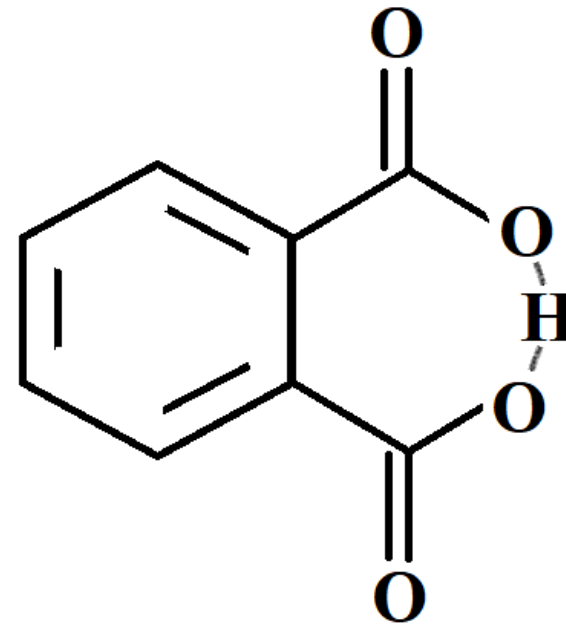
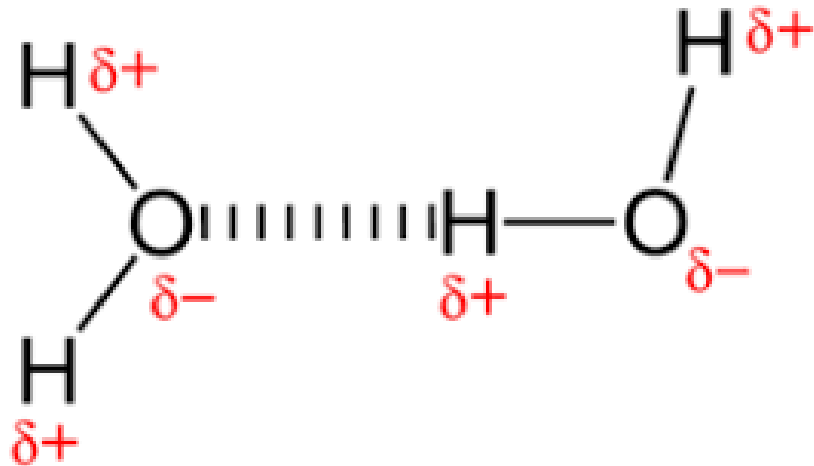
Bond type	A . . . B ^b (calc)	A . . . B (obs)	H . . . B (calc)	H . . . B (obs)
F—H—F	270	240	260	120
O—H . . . O	280	270	260	170
O—H . . . F	280	270	260	170
O—H . . . N	290	280	270	190
N—H . . . O	290	290	260	200
N—H . . . F	290	280	260	190
N—H . . . N	300	310	270	220



Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

Características comunes:

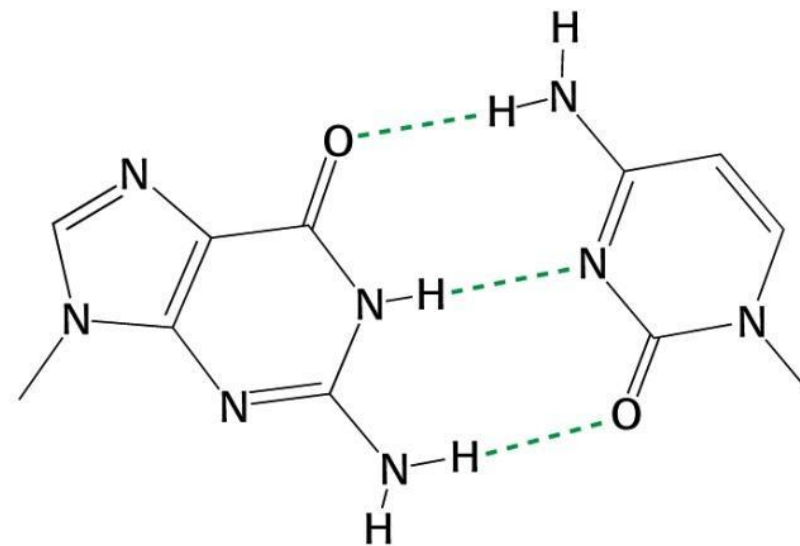
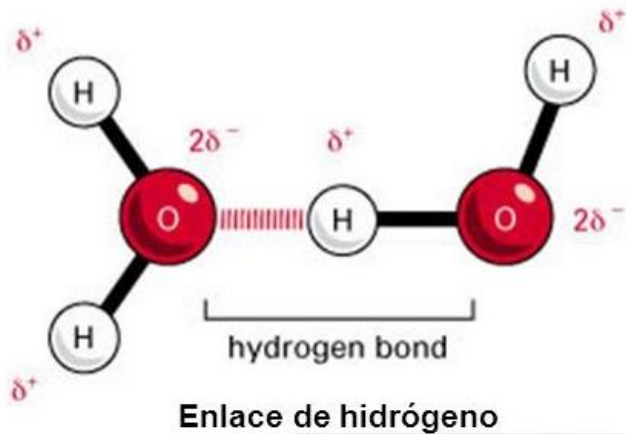
1) La mayoría de las veces es un enlace asimétrico. Pocas ocasiones se observa un enlace simétrico, el cuál es más común en enlaces *intramoleculares*.



Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

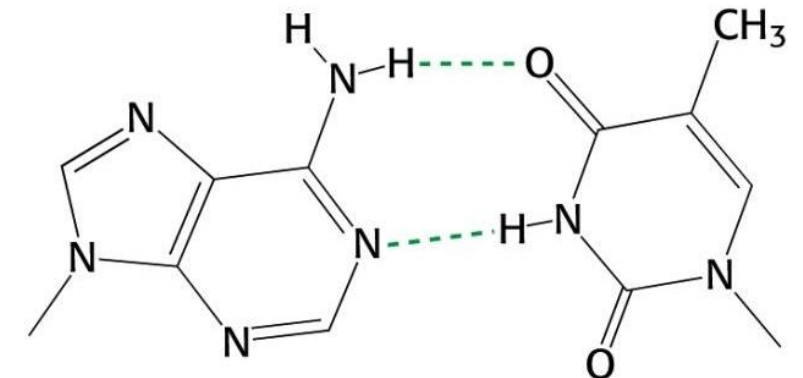
Características comunes:

2) La disposición preferencial A - H - B es **lineal**.



Guanine

Cytosine



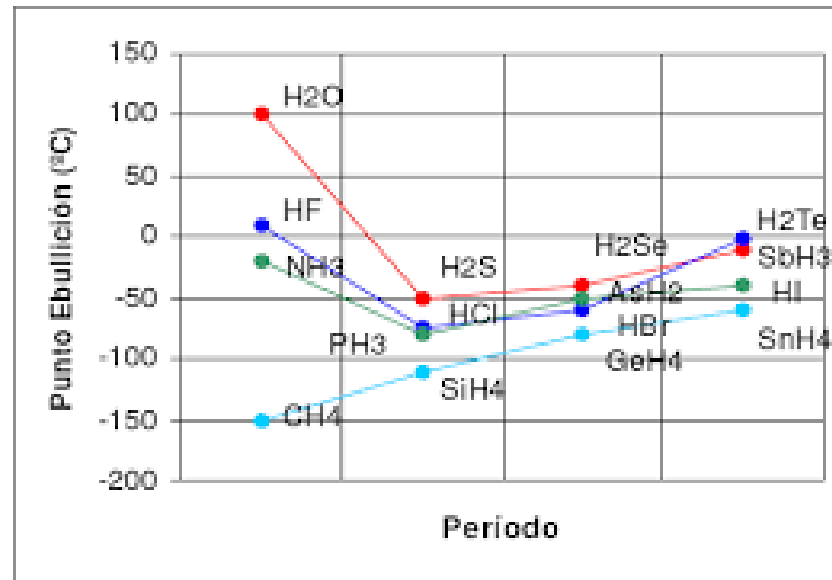
Adenine

Thymine

Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

Importancia:

- 1) Influye en las temperaturas de fusión y ebullición.
- 2) Determina la estructura en algunos sólidos.



Puentes de Hidrógeno en hielo

