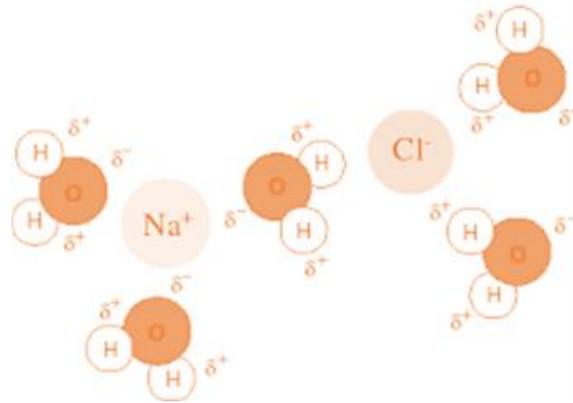




# Fuerzas químicas: interacciones intermoleculares



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.

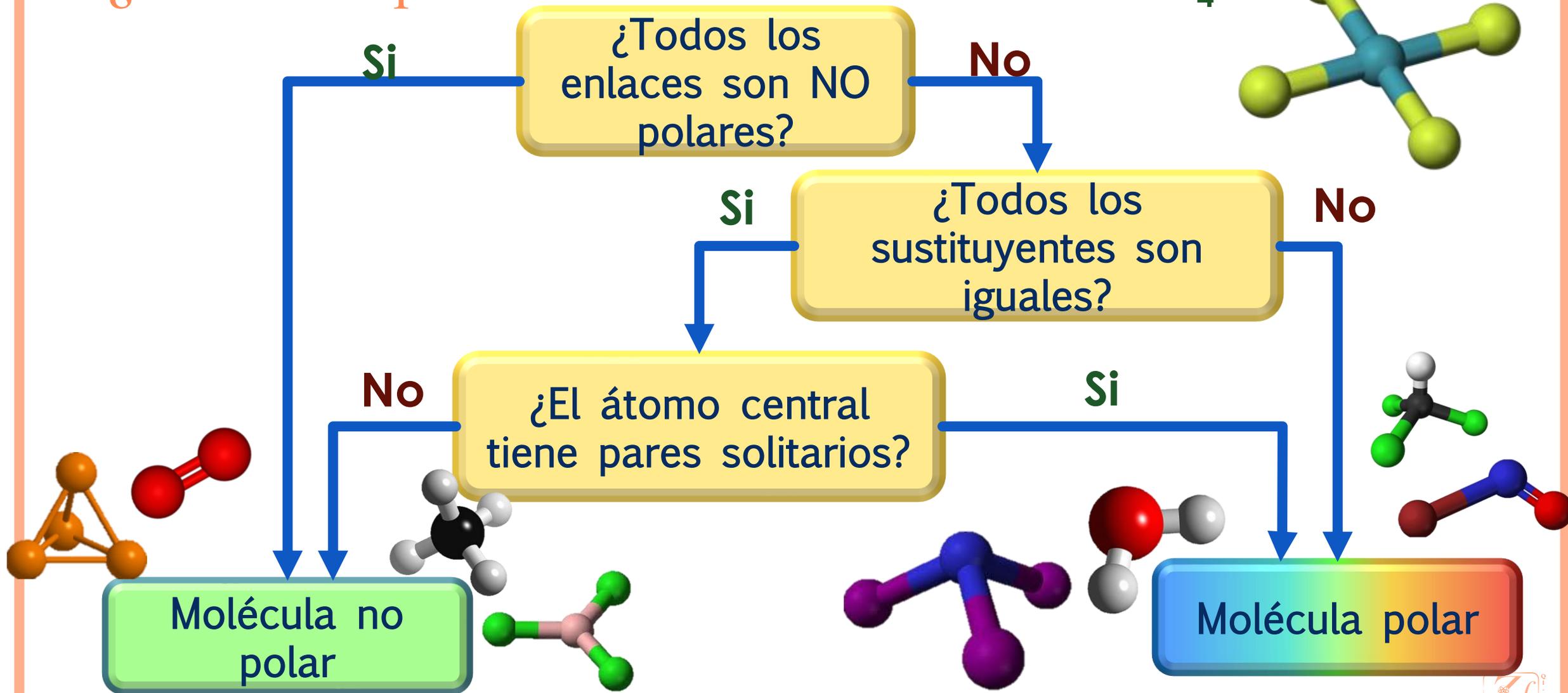
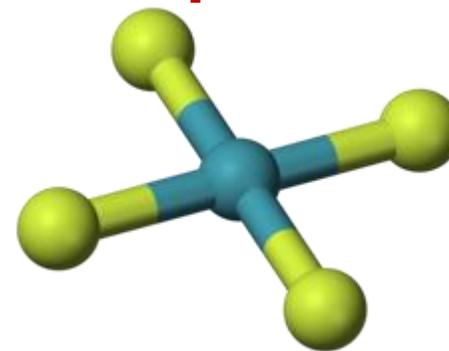
# Tipos de especies

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!  
 $\text{XeF}_4$



## Tipos de interacciones

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

|                 | <b>Iónica</b>                | <b>Polar</b>    | <b>No polar</b>                         |
|-----------------|------------------------------|-----------------|---|
| <b>Iónica</b>   | Ion – ion<br>(enlace iónico) | Ion - dipolo    | Ion – dipolo inducido                   |
| <b>Polar</b>    | *                            | Dipolo - dipolo | Dipolo – dipolo inducido                |
| <b>No polar</b> | *                            | *               | Dipolo instantáneo –<br>dipolo inducido |

# Tipos de interacciones

¿Cuál de las interacciones es más fuerte?

**Tabla 1. Interacciones entre átomos y moléculas.**

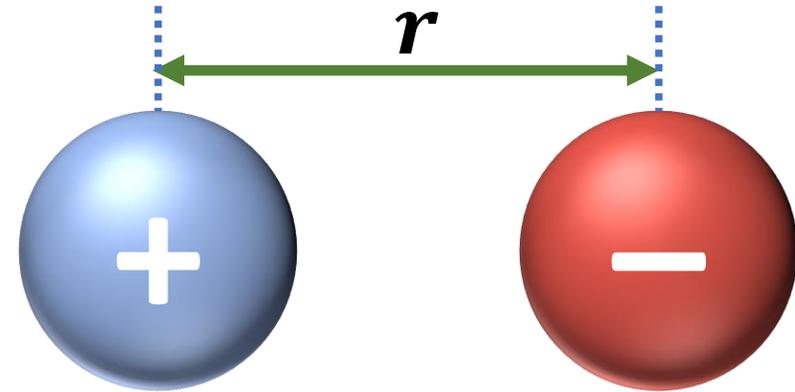
| <b>Tipo de interacción</b>                | <b>Intensidad</b>    | <b>Función energía-distancia</b>                 |
|---|----------------------|--|
| <b>Covalente <sup>a</sup></b>             | Muy fuerte           | Compleja, pero comparativamente de largo alcance |
| <b>Iónica <sup>a</sup></b>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

<sup>a</sup> 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.

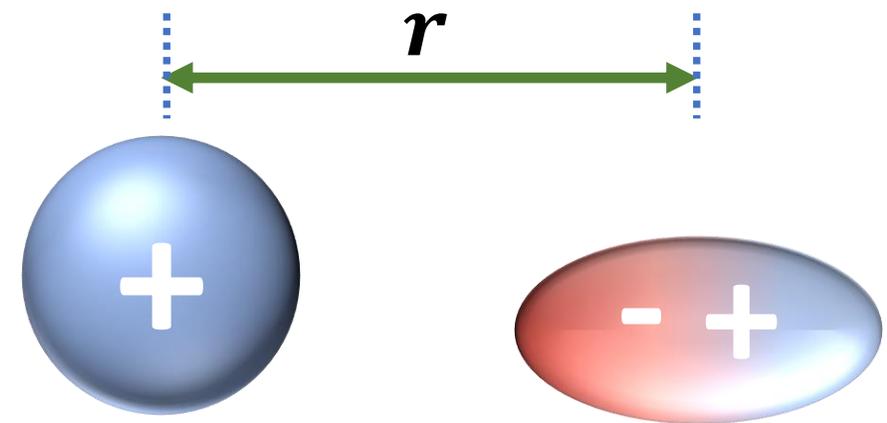
$e$  es la carga fundamental

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:

$\mu$  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.

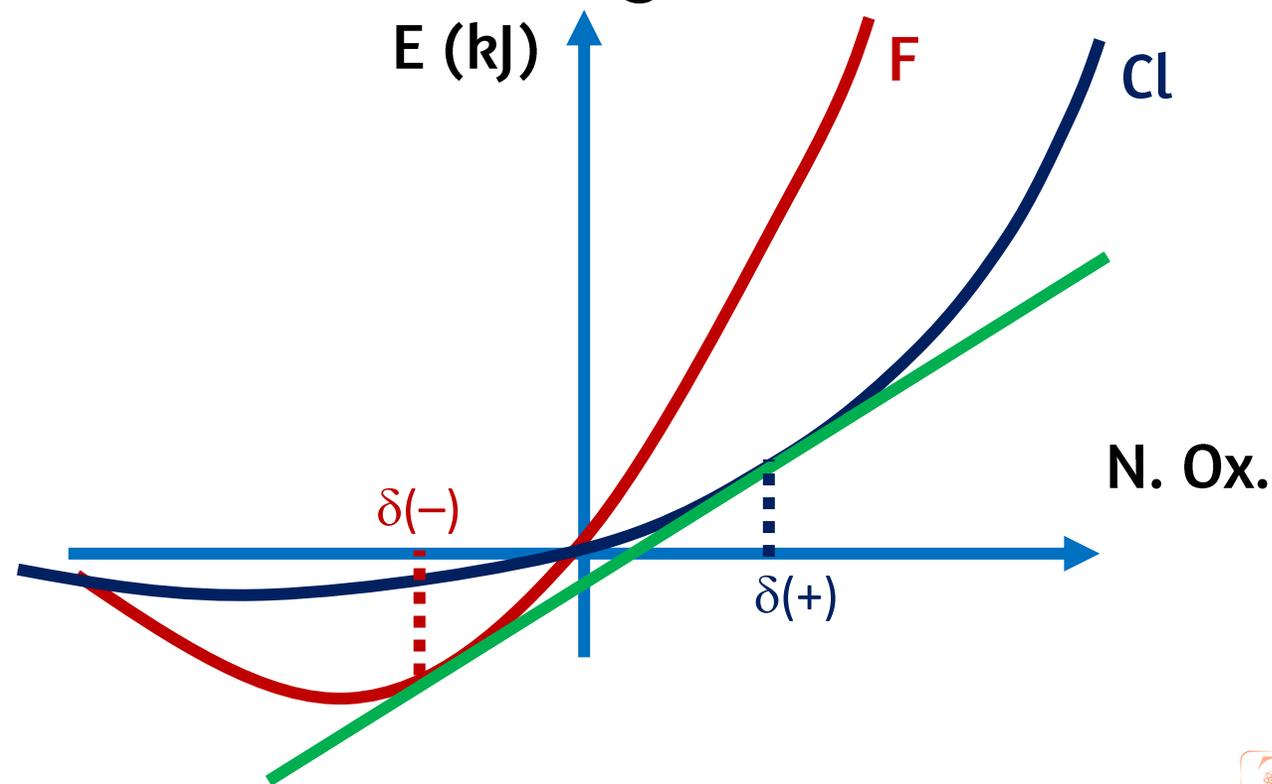
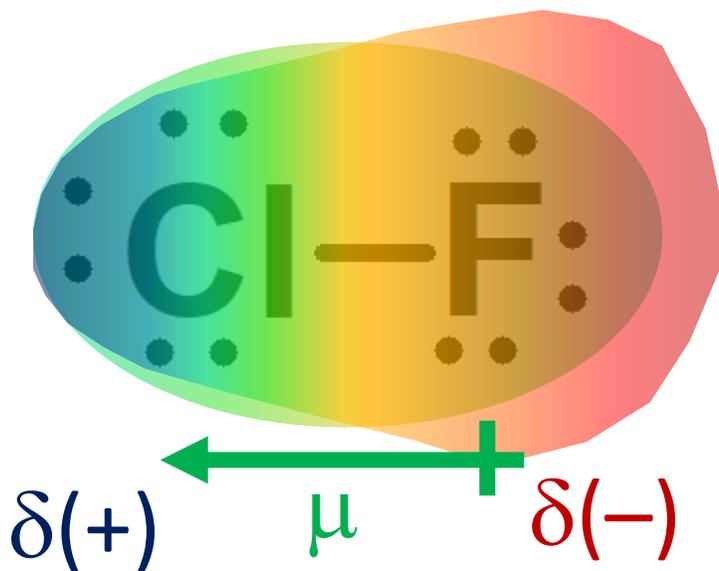
$d$  es la distancia que separa las cargas.

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

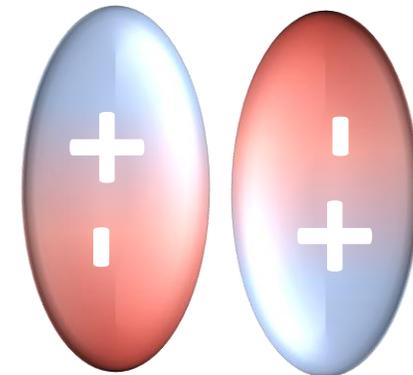
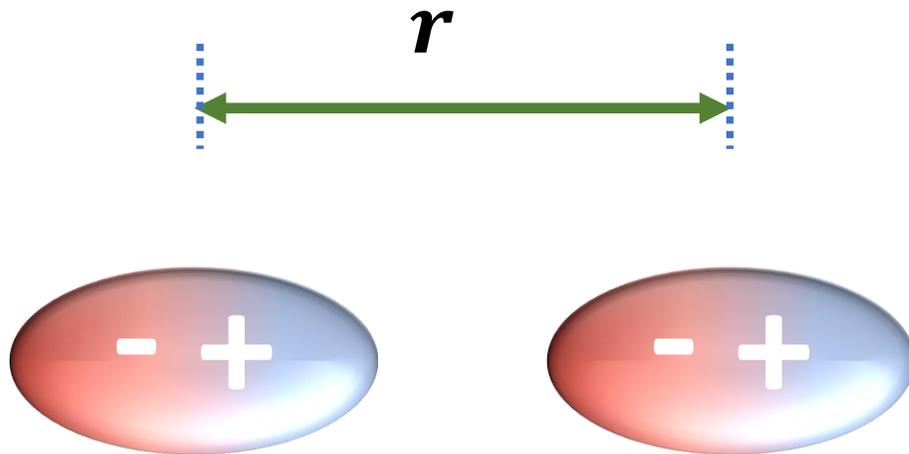
Una forma de estimar las cargas parciales en la molécula es encontrando una *electronegatividad común* de las especies enlazadas (retomando la estrategia de Jaffé)



# Energía de interacción

## Dipolo - dipolo

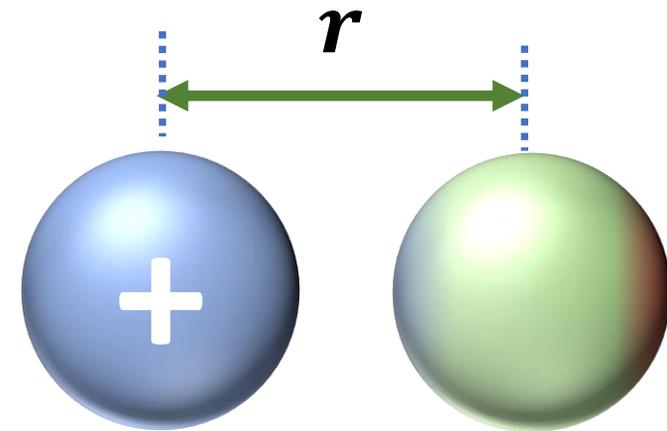
$$E = \frac{-2\mu_1\mu_2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$



# Energía de interacción

Ion - dipolo inducido.

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



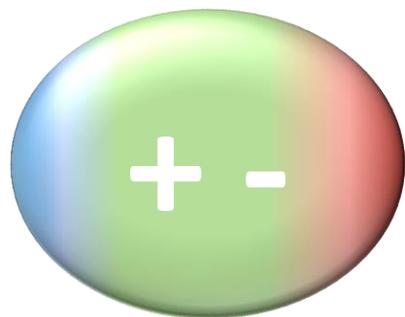
En donde:

$\alpha$  es la **polarizabilidad** de la especie no polar

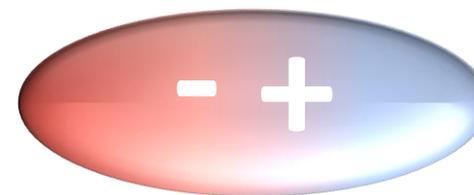
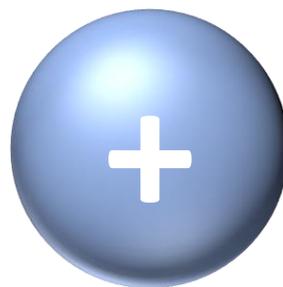
La polarizabilidad es la característica clave de las especies no polares

## Energía de interacción

La polarizabilidad  $\alpha$  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

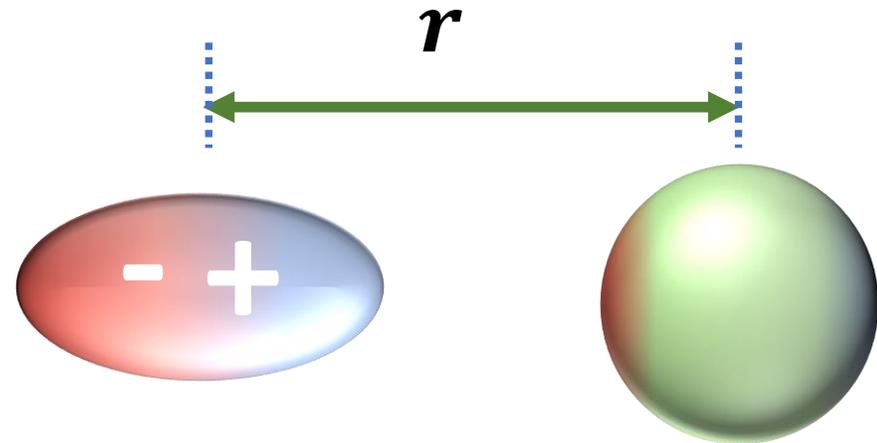
En general la polarizabilidad es **mayor** cuando:

- 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

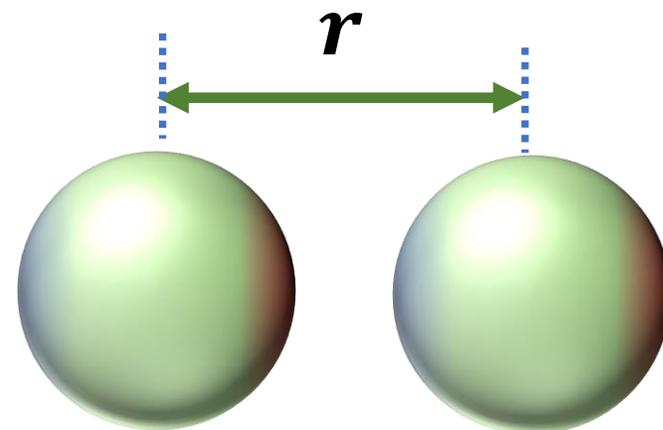
Dipolo - dipolo inducido.

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



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.

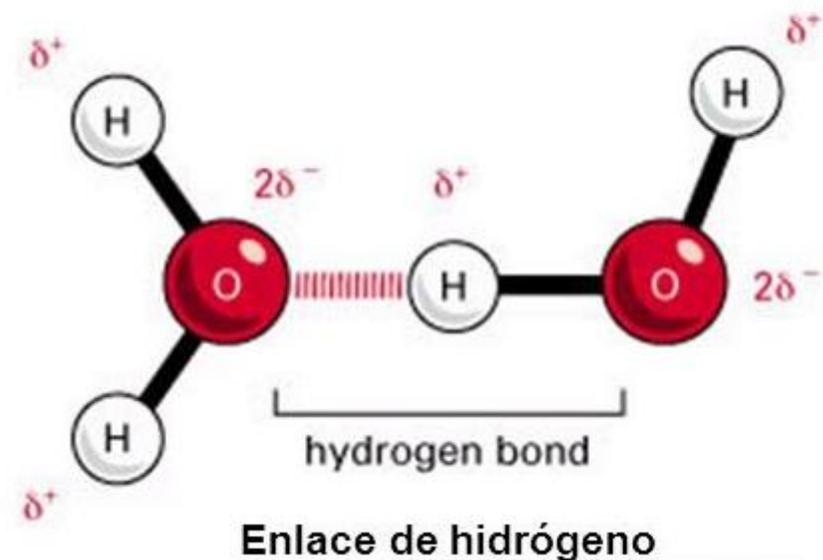
Existe un **enlace de hidrógeno** cuando un átomo de hidrógeno se encuentra ***enlazado a dos o más átomos.***



# Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

¿Qué indica la evidencia experimental?

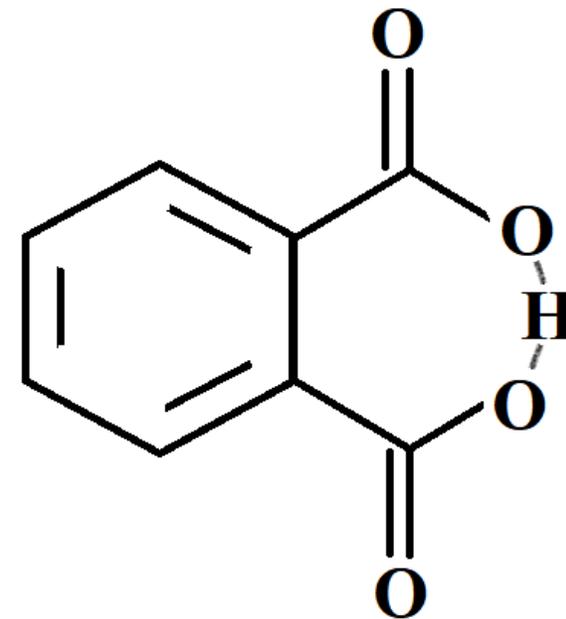
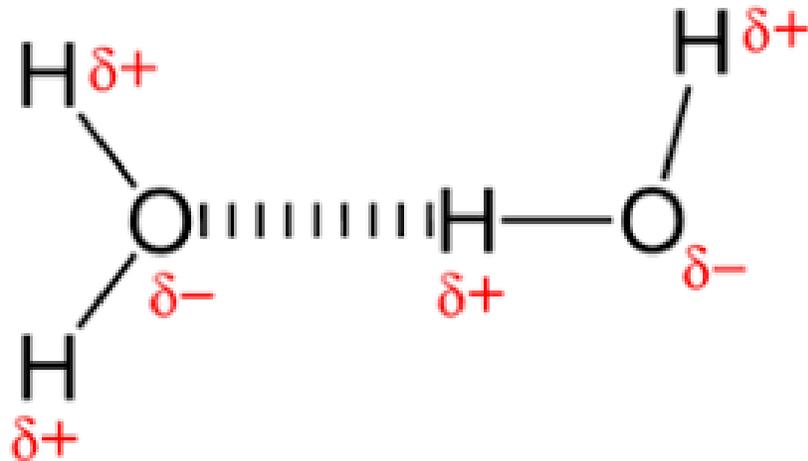
| Bond type   | A . . . B <sup>b</sup><br>(calc) | A . . . B<br>(obs) | H . . . B<br>(calc) | H . . . B<br>(obs) |
|-------------|----------------------------------|--------------------|---------------------|--------------------|
| F—H—F       | 270                              | 240                | 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:

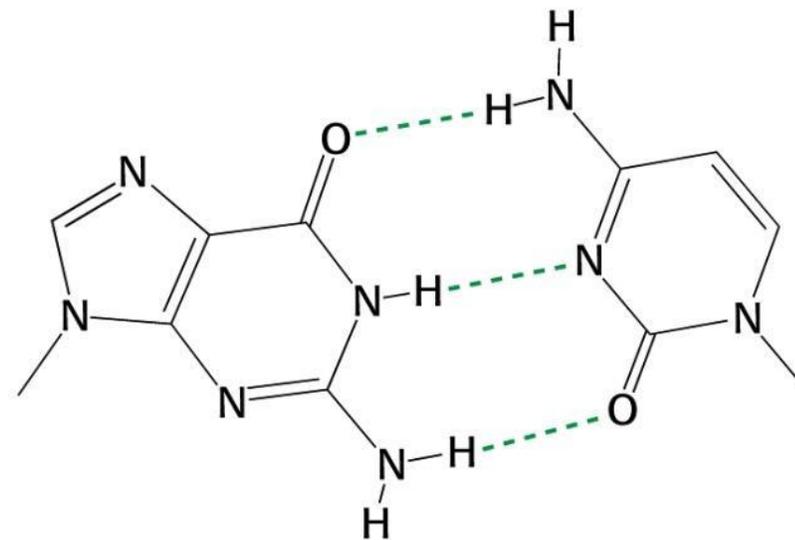
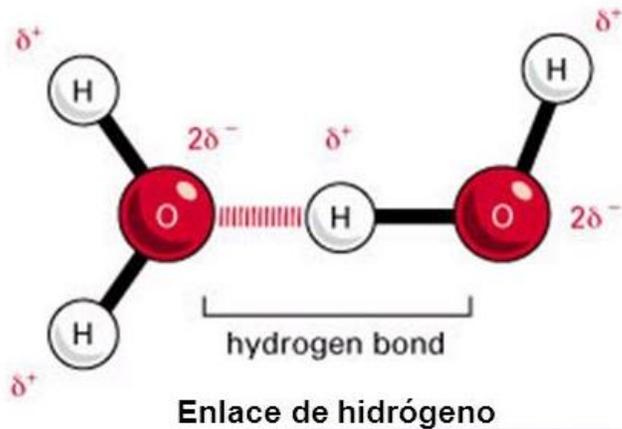
1) La mayoría de las veces es un enlace asimétrico. Pocas ocasiones se observa un enlace simétrico, el cuál es más común en enlaces *intramoleculares*.



# Una interacción especial: El enlace de hidrógeno.

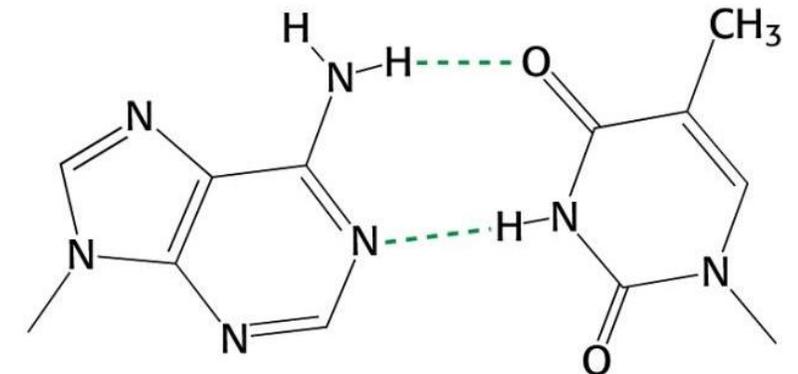
Características comunes:

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



**Guanine**

**Cytosine**



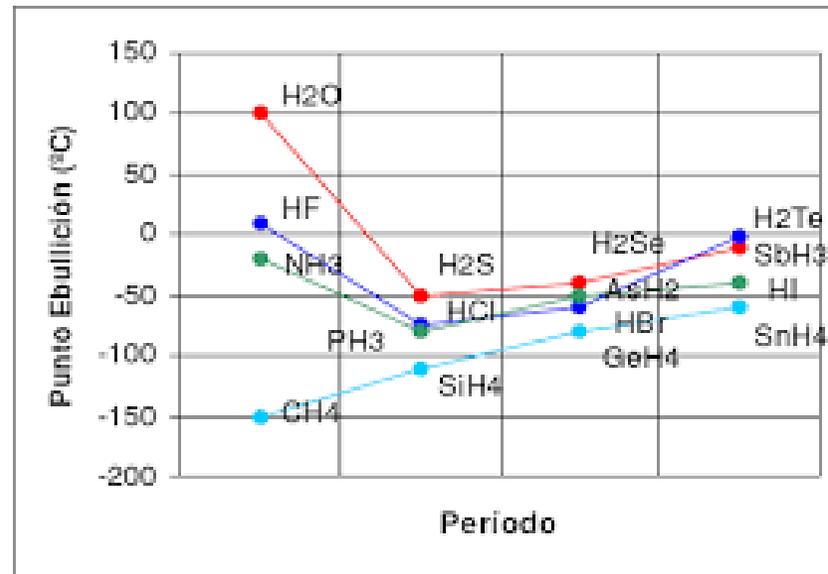
**Adenine**

**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*

