

Tema 8: Fuerzas intermoleculares

8.1 Concepto de fuerza intermolecular

8.2 Tipos de fuerzas intermoleculares

Ión-ión
 Ión-dipolo
 Dipolo-dipolo
 Fuerzas de dispersión
 Enlaces de hidrógeno

AJ2.14&5.1-5, PHH13.5-7, C11.2, S12.3, W7.9-10↓

8.1 Concepto de fuerza intermolecular

Las moléculas *interaccionan* entre sí a través de fuerzas de origen electrostático y mecanocuántico:

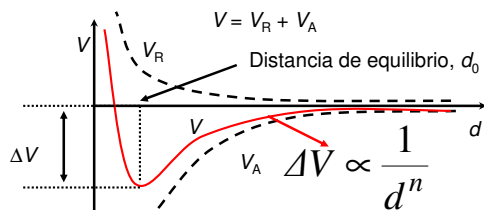


Estas fuerzas pueden ser atractivas o repulsivas

Toda fuerza en un campo conservativo deriva de un potencial

$$\vec{F} = - \frac{\partial V}{\partial d} \vec{d}$$

Las fuerzas intermoleculares derivan de un potencial de *interacción* intermolecular:



Factores que influyen en las fuerzas intermoleculares

1. Carga eléctrica
2. Electronegatividad de los elementos que forman la molécula
3. Forma molecular
4. Tamaño de la molécula

Propiedades que dependen de las fuerzas intermoleculares

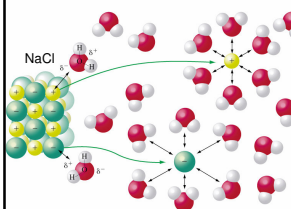
1. Punto de fusión y ebullición.
2. Solubilidad
3. Densidad
4. Viscosidad

8.2 Tipos de fuerzas intermoleculares

Energía ↑	Ión-ión	Enlaces de hidrógeno	Alcance ↓	Enlaces de hidrógeno
	Enlaces de hidrógeno	Fuerzas de dispersión		Fuerzas de dispersión
	Ión-dipolo	Dipolo-dipolo inducido		Dipolo-dipolo inducido
	Dipolo-dipolo	Dipolo-dipolo		Dipolo-dipolo
	Dipolo-dipolo inducido	Ión-dipolo		Ión-dipolo
	Fuerzas de dispersión	Ión-ión		Ión-ión
				Enlace iónico (Tema 5)

Fuerzas ion-dipolo

Interacciones electrostáticas entre un ión (de carga q) y una molécula polar (de momento dipolar μ)



Aparecen cuando se disuelven compuestos iónicos (NaCl) en H_2O (μ grande). Cuando se disuelve el NaCl en H_2O , esta actúa manteniendo los iones separados.

Por el contrario el CCl_4 , no polar, no participa en interacciones ion-dipolo.

Fuerzas ion-dipolo

$$V \propto \frac{q \mu}{d^2}$$

$\Delta V \approx 15 \text{ kJ/mol}$

El momento dipolar μ determina la constante dieléctrica del disolvente

1. Solubilidad de sustancias iónicas
2. Transporte de iones a través de membranas

Fuerzas dipolo-dipolo

$$V \propto \frac{\mu_1 \mu_2}{d^3}$$

$\Delta V \approx 2 \text{ kJ/mol}$

Influyen en la solubilidad y en los puntos de fusión y ebullición:

En una sustancia polar

Moléculas con momentos dipolares permanentes

Moléculas orientadas

Ejemplo: molécula de NO

N y O tienen diferentes EN, la molécula tiene un pequeño momento dipolar:

Molécula covalente polar

δ^- N δ^+ O

μ

	N_2	NO	O_2
p.e.	77,34K	121,39K	90,19K

Podría esperarse que el punto de ebullición del NO fuera intermedio entre los del N_2 y O_2 , pero no es así. El NO tiene un punto de ebullición más alto que el N_2 y O_2 porque el NO tiene un momento dipolar $\Rightarrow$ atracciones intermoleculares dipolo-dipolo

Interacción dipolo-dipolo

Interacción entre dos dipolos

$$V \propto \frac{\mu_1 \mu_2}{d^3}$$

El sólido cristalino mantiene las orientaciones de los dipolos:

$$V \propto \frac{\mu_1 \mu_2}{d^3}$$

En cambio, en un líquido, las orientaciones de los dipolos cambian.

$$V \propto \frac{(\mu_1 \mu_2)^2}{kT d^6}$$

Fuerzas dipolo-dipolo inducido

$$V \propto \frac{\mu_1^2 \alpha_2}{d^6}$$

$\Delta V \approx 1 \text{ kJ/mol}$

Dependen de la polarizabilidad α de las moléculas

Dipolo inducido

Es una deformación temporal de la nube electrónica

¿Qué es más polarizable, Ne, Ar o Kr?

Fuerzas de dispersión (London)

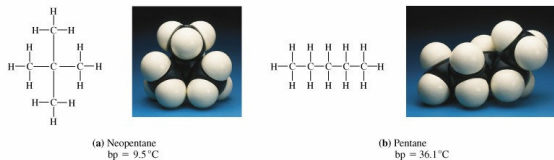
$$V \propto \frac{C}{d^6}$$

$\Delta V \approx 2 \text{ kJ/mol}$

C depende de la polarizabilidad de la partícula

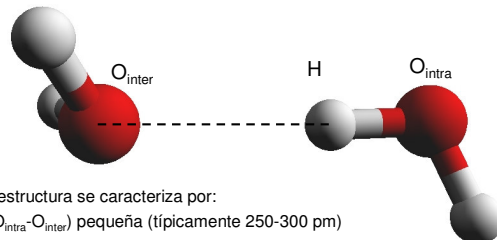
Las moléculas y átomos grandes son más polarizables que las más pequeñas ($\Rightarrow$ Peso molecular $\Rightarrow$ α)
Ebullición: **CH₄** -162 °C, **CCl₄** 77 °C, **CBr₄** sólido a temp. ambiente

Las moléculas alargadas son más polarizables que las moléculas esféricas
Puntos de ebullición: Pentano (36 °C) y 2,2dimetilpropano (10 °C) Ambos tienen la misma fórmula empírica: C₅H₁₂



Enlaces (o puentes) de hidrógeno

En fase gas, es posible observar dímeros de agua



La estructura se caracteriza por:
 $D(O_{intra}-O_{inter})$ pequeña (típicamente 250-300 pm)

$\alpha(HO_{intra}O_{inter})$ pequeño ($<30^\circ$)

Estabilidad

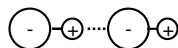
En general, ocurre entre elementos pequeños y de electronegatividad alta

Particularidad del enlace de hidrógeno

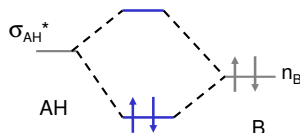
A-H...B donde A,B = N, O, F $\Delta V \approx 20$ kJ/mol

Origen del enlace de hidrógeno:

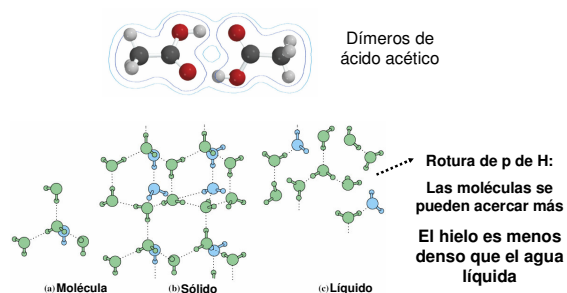
1. Electrostático
(dipolo-dipolo)



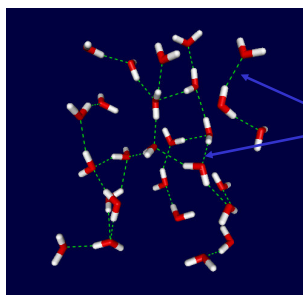
2. Covalente



Ejemplos

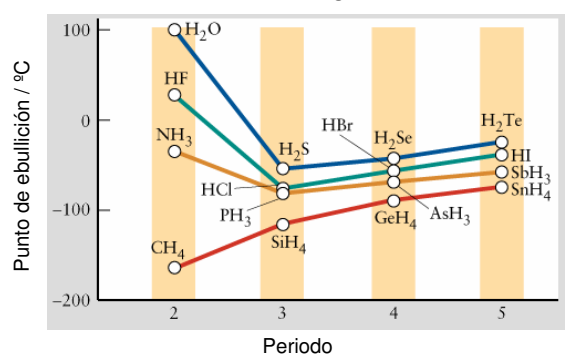


Ejemplo: estructura del agua líquida

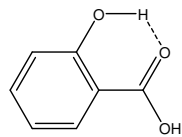


Enlaces de hidrógeno
O-H...O

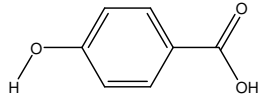
Efecto de los enlaces de hidrógeno:



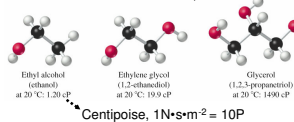
Puentes de hidrógeno intra- e intermoleculares



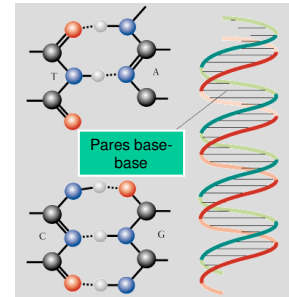
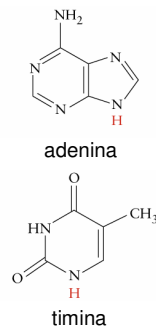
Ácido o-hidroxi benzoico
(ácido salicílico)
 $P_f=158^\circ\text{C}$



Ácido p-hidroxi benzoico
 $P_f=215^\circ\text{C}$
Aumento de viscosidad



Los enlaces de hidrógeno tienen gran importancia biológica. La estructura del ADN y de las proteínas está estabilizada por enlaces de hidrógeno



Fuerzas de repulsión

Repulsiones electrónicas y nucleares son de muy corto alcance:

La repulsión a corta distancia evita que colapsen las estructuras. Colapsar= distancia internuclear se reduce a cero y potencial $V=-\infty$

$$V_R = \frac{C_{12}}{d^{12}}$$

Las fuerzas de repulsión, dispersión, dipolo-dipolo inducido, y (en los líquidos) dipolo-dipolo se resumen en:

Lennard-Jones

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