



Asignatura Química I
Responsable: Juan José Borrás
Aula AI-17
Curso 2025-2026

Tema 1 (IV)

Geometría Molecular y Enlace Químico

Curso 2025-2026

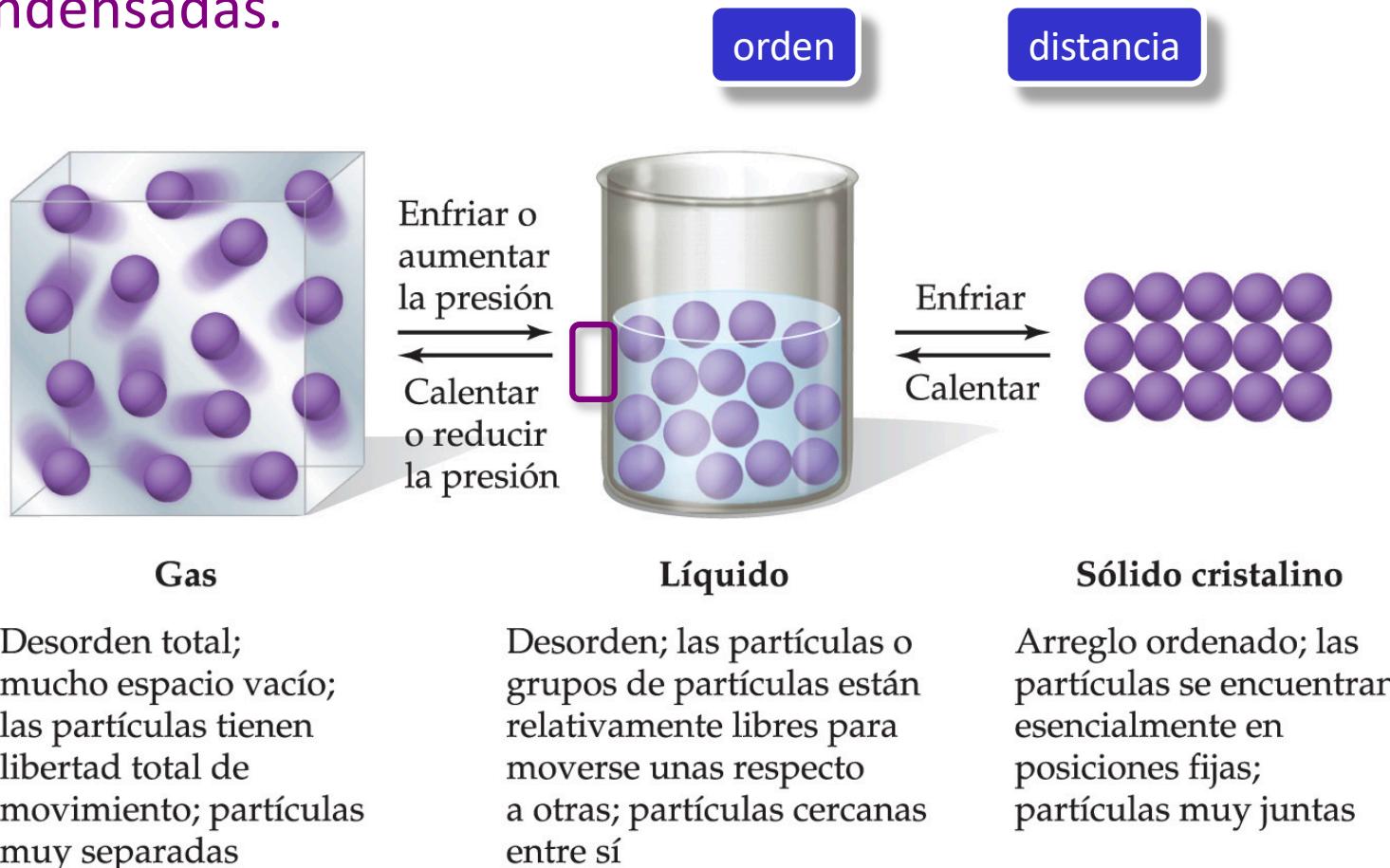
Fuerzas de atracción **intermoleculares**
Propiedades de los líquidos
(Tema 11 Brown)

I- Introducción.

Una revisión de los tres estados tradicionales en los que se encuentra la materia...

Estados de la materia

- Una diferencia fundamental entre los estados de la materia es la distancia entre las partículas que forman la sustancia.
- Debido a que, en los estados líquido y sólido, las partículas están muy cercanas entre sí, nos referimos a ellos como fases condensadas.



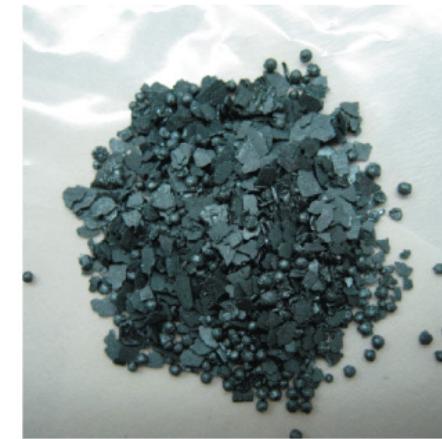
Strength of intermolecular attractions increasing



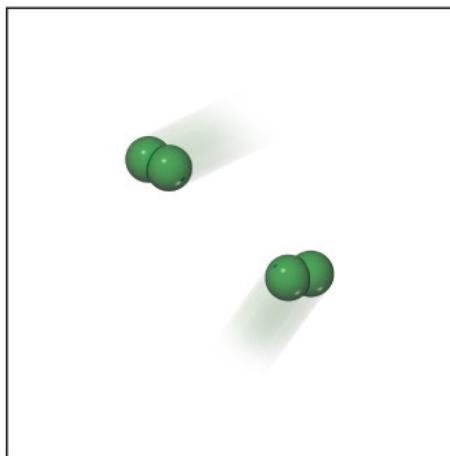
Gas



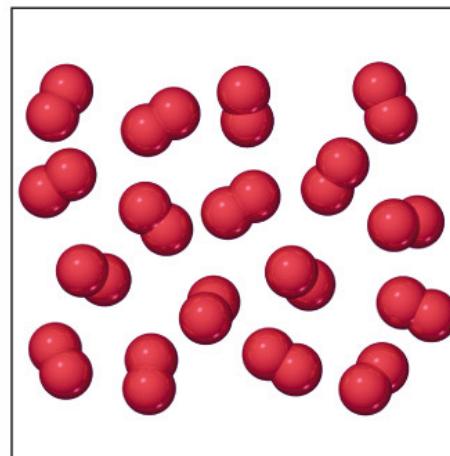
Liquid



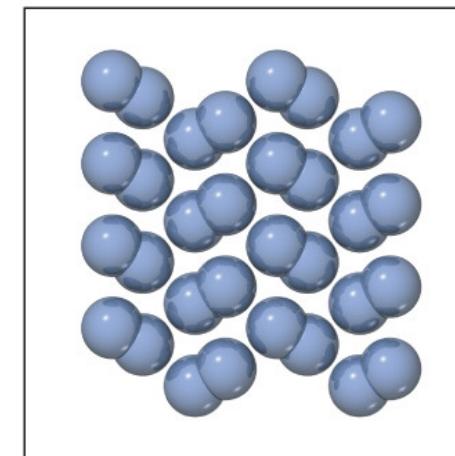
Crystalline solid



Chlorine, Cl_2
Particles far apart;
possess complete
freedom of motion



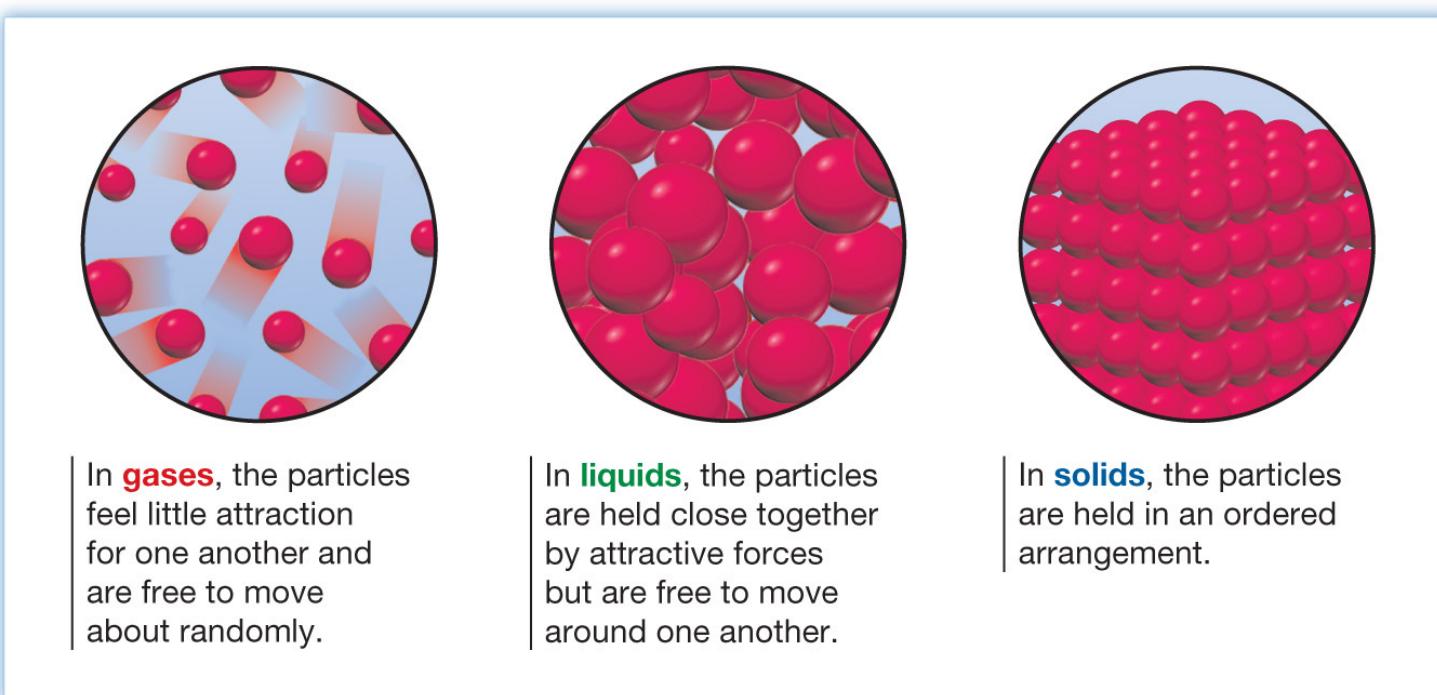
Bromine, Br_2
Particles are closely packed but
randomly oriented; retain freedom
of motion; rapidly change neighbors



Iodine, I_2
Particles are closely packed in
an ordered array; positions
are essentially fixed

Propiedades de sólidos, líquidos y gases

	Fuerzas de cohesión	Tipo de orden	Distancias	Propiedades
Gas	Despreciables frente a la agitación térmica	Contínuo movimiento al azar	largas y desiguales	volumen variable, fluido, baja densidad, difunde con rapidez
Líquido	Intermedias	Orden parcial	cortas, desiguales	volumen fijo, fluido, alta densidad, se difunden a través de otros líquidos
Sólido	Grandes frente a la agitación térmica	Elevado orden	cortas, iguales	volumen fijo, no fluido, alta densidad, pueden llegar a difundir muy lentamente a través de otros sólidos.



Estados de la materia

Algunas propiedades características de los estados de la materia

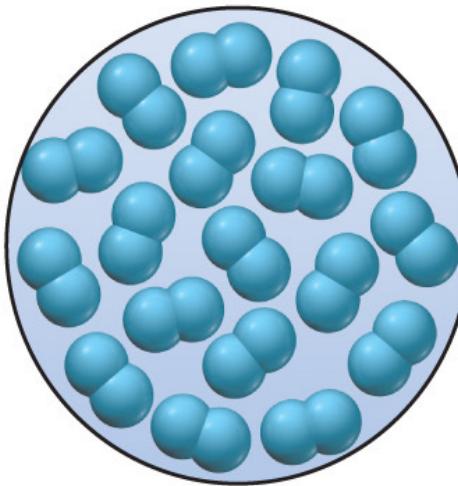
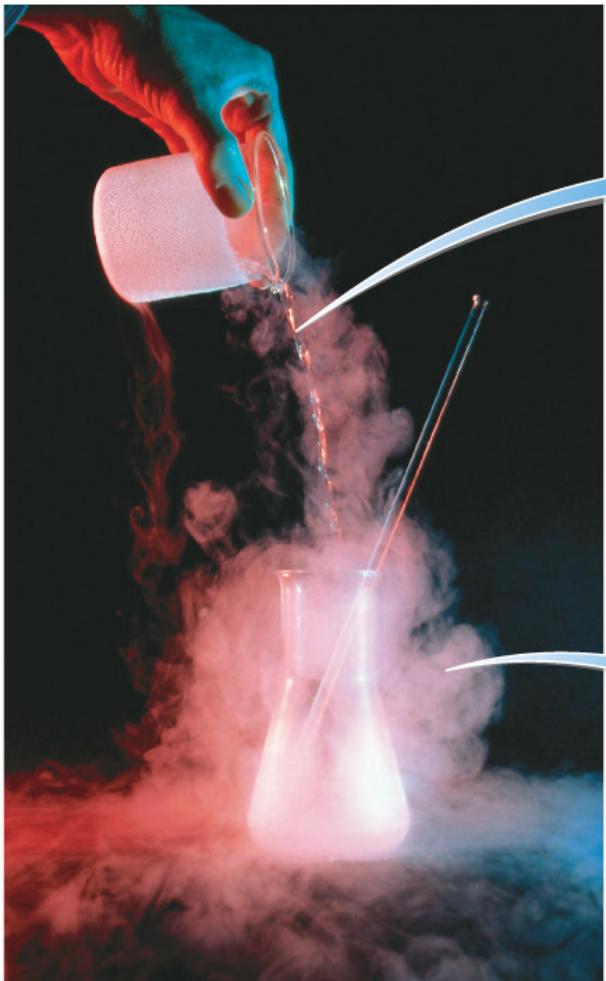
Gas	Adopta tanto el volumen como la forma del recipiente que lo contiene Es compresible Fluye con facilidad La difusión dentro de un gas ocurre con rapidez
Líquido	Adopta la forma de la parte del recipiente que ocupa No se expande para llenar el recipiente Es prácticamente incompresible Fluye con facilidad La difusión dentro de un líquido ocurre con lentitud
Sólido	Mantiene su propia forma y volumen Es prácticamente incompresible No fluye La difusión dentro de un sólido ocurre con extrema lentitud

■ El **estado físico** en el que se encuentra una sustancia, a una temperatura y presión particulares, depende de dos magnitudes antagónicas:

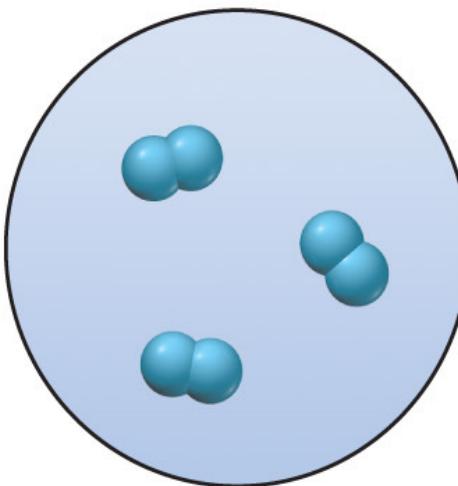
- ◆ La **energía cinética** de las moléculas (que aumenta conforme aumenta la temperatura) y que tiende a separarlas.
- ◆ Las **fuerzas de atracción intermoleculares** que tienden a mantener unidas a las partículas (moléculas, átomos o iones) que integran la sustancia.

Estados de la materia

$$T_{eb} = -195^{\circ}\text{C}$$



N_2 molecules are weakly attracted to one another at **low temperature** by intermolecular forces, causing nitrogen to become liquid.



At **higher temperatures**, intermolecular forces are no longer able to keep molecules close together, so nitrogen becomes a gas.

Estados de la materia

He, Ne, F₂, Cl₂, N₂, O₂, NH₃, PH₃, CH₄, CO₂, CO, HCl, ClF₃, SO₂, NO₂....

Gases a
P y T ambiente

H₂O, Br₂, Hg, TiCl₄, CCl₄, XeOF₄, C₆H₆, CH₃-CH₂OH, CH₃-COOH, CH₃-CO-CH₃, ...

Líquidos a P y T
ambiente

I₂, S₈, P₄, P₄O₁₀, XeF₂, XeO₃, Si, Ge, Sn, (casi todos los metales), PbO₂, SiO₂, NaCl, Na₂SO₄, KCl, KBr, KNO₃, CaO, KMnO₄, K₂Cr₂O₇, ...

Sólidos a
P y T ambiente

“El estado sólido es el más frecuente en condiciones normales”

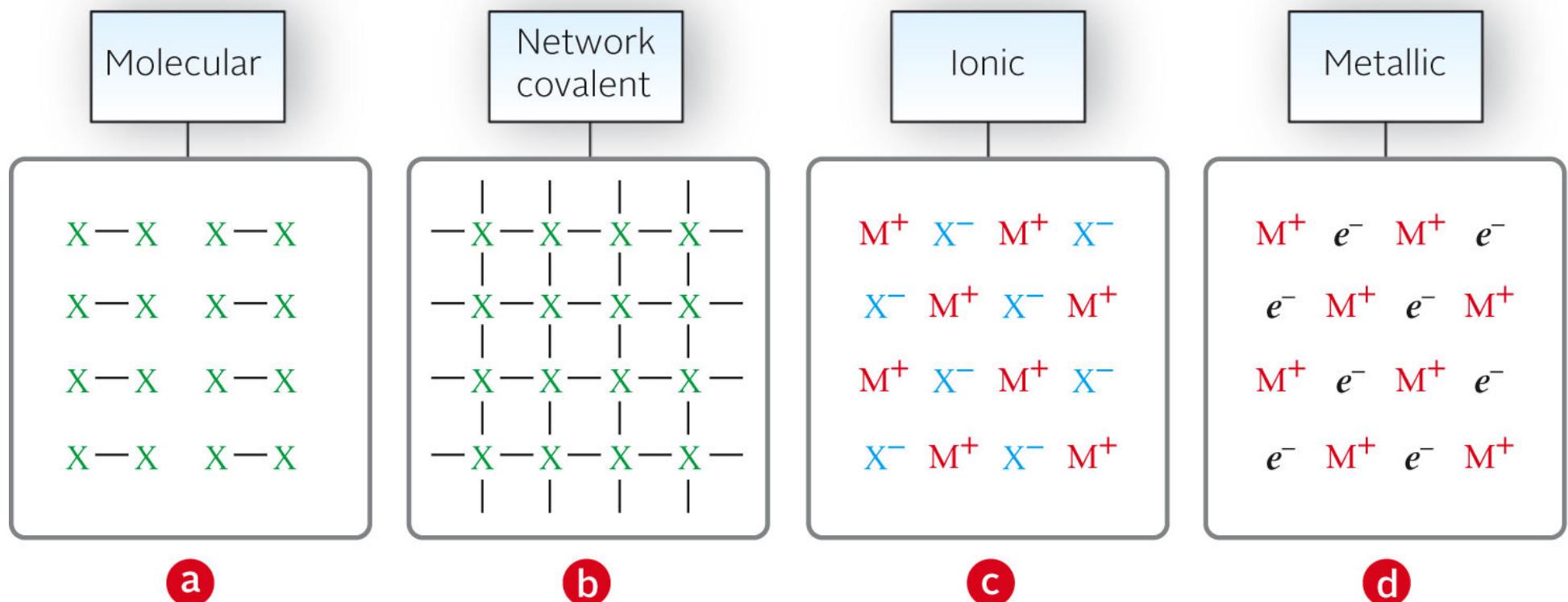
Clasificación de los sólidos según el enlace

■ Clasificación de los sólidos según la naturaleza del enlace dominante (fuerzas cohesivas):

- ◆ **Moleculares** (formados por moléculas **discretas** que se mantienen vinculadas por fuerzas intermoleculares)
- ◆ **Covalentes extendidos** (con enlaces covalentes extendidos a toda la red cristalina)
- ◆ **Iónicos** (cationes y aniones; atracción electrostática)
- ◆ **Metálicos** (cationes + electrones deslocalizados. Modelo de bandas, TOM)

■ A menudo hay sólidos con **comportamientos intermedios**

- ◆ sólidos con dos tipos de enlace (por ejemplo el grafito)
- ◆ sólidos con enlace intermedio covalente-iónico (SiO_2)



Compuestos moleculares

Los gases, la mayor parte de los líquidos y muchos sólidos tienen naturaleza molecular

También la mayor parte de las sustancias de interés biológico

Sus propiedades dependen, entre otros factores, de la naturaleza de las fuerzas intermoleculares entre sus moléculas

II. Las fuerzas intermoleculares

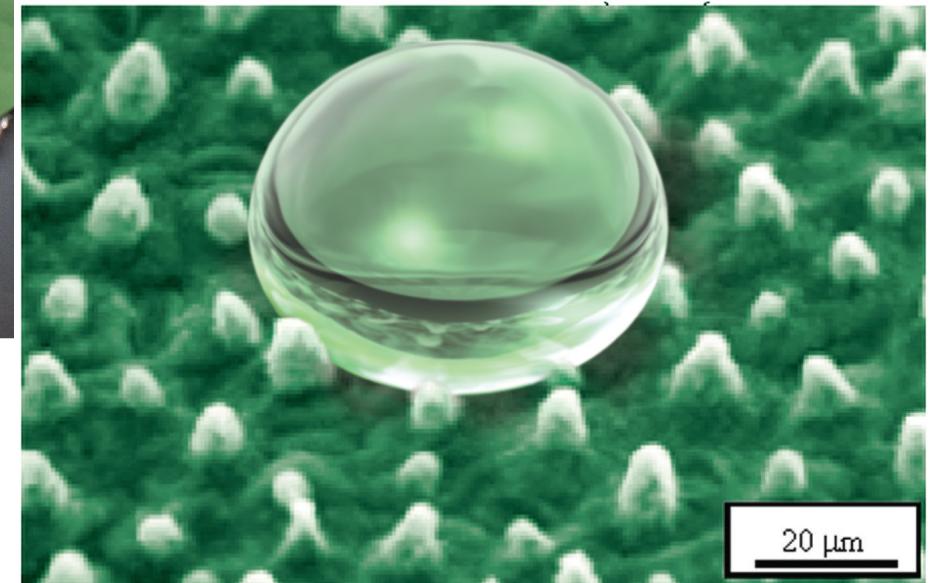
Se trata de unas fuerzas de naturaleza atractiva que se producen entre las moléculas de una sustancia pura o de disoluciones.

Estas fuerzas explican fenómenos como la licuefacción de gases o la estabilidad de las proteínas.

¿Por qué el agua
no moja la
superficie de la
hoja de loto?



imagen de miscroscopia
electrónica de barrido



la superficie de la hoja es
superhidrofóbica

¿Por qué el agua no moja la superficie de la hoja de loto?

¿Por qué el agua es un buen disolvente?

¿Por qué O_2 se disuelve en el agua?

¿Por qué algunos insectos “caminan” sobre el agua?

¿Por qué la acetona se evapora más rápidamente que el agua?

Fuerzas intermoleculares

¿Por qué el hielo es menos denso que el agua?

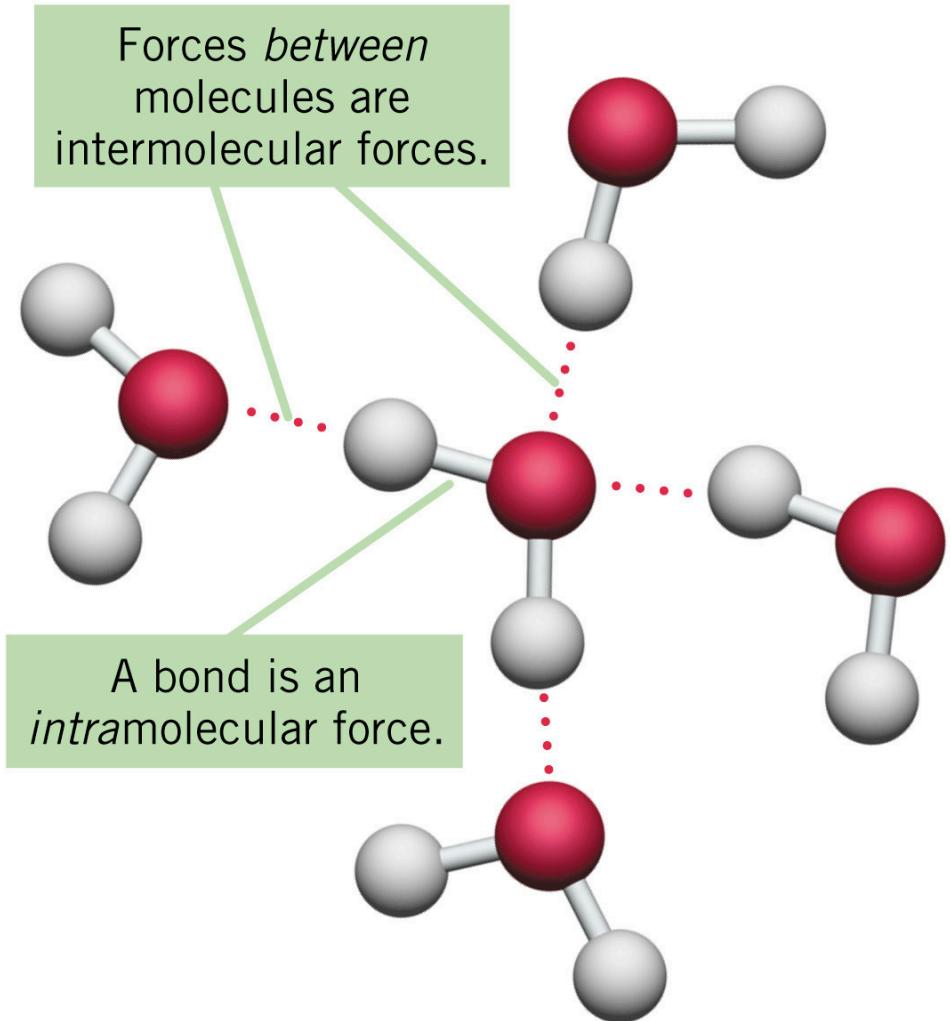
¿Por qué unos líquidos son más viscosos que otros?

¿Por qué el aceite disuelve a las grasas?

Distingue entre fuerzas intra e inter-moleculares

Enlaces intramoleculares: unen los átomos dentro de la molécula. Son los responsables de la geometría molecular, de la polaridad de la molécula, etc.

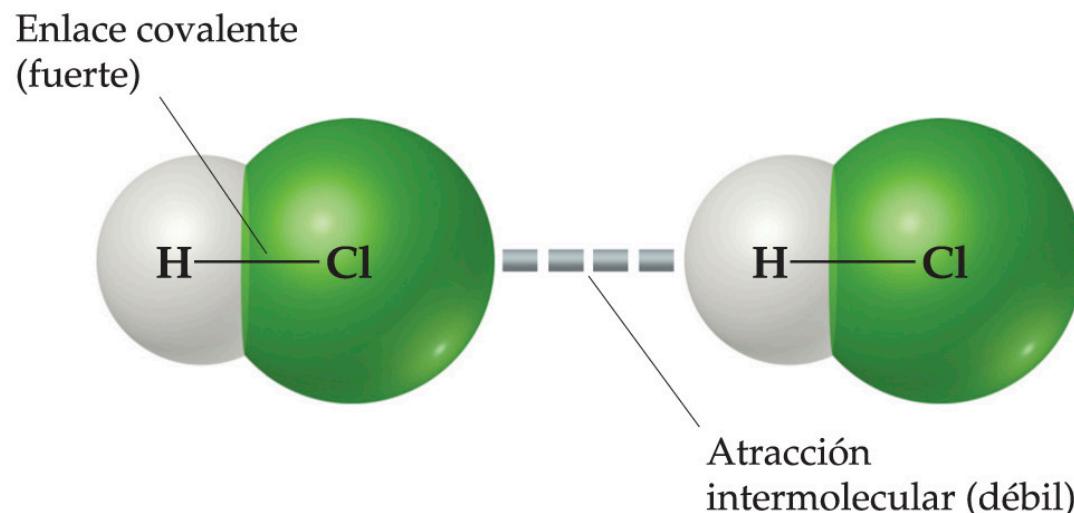
Fuerzas (enlaces) intermoleculares: mantienen la cohesión entre las moléculas. Son de menor intensidad que las intramoleculares. Son los responsables de algunas propiedades macroscópicas de los líquidos y sólidos: densidad, punto de ebullición y fusión, tensión superficial, etc.



Copyright © 2005 Pearson Prentice Hall, Inc.

Fuerzas intermoleculares

- Las interacciones intermoleculares son **mucho menos intensas** que las fuerzas atractivas intramoleculares que mantienen unidos a los compuestos (enlaces químicos tradicionales).
- Sin embargo, su papel es lo suficientemente importante para **controlar** las **propiedades físicas**, como los puntos de ebullición y fusión, presión de vapor, viscosidad, etc.
- Al conjunto de fuerzas intermoleculares se les conoce genéricamente como **fuerzas de van der Waals**.



Para vaporizar el HCl líquido hacen falta 16 kJ/mol
Para romper el enlace H-Cl hacen falta 431 kJ/mol

Las interacciones intermoleculares son de naturaleza electrostática

Clasificación fuerzas intermoleculares

Clasificación de las fuerzas intermoleculares

Fuerzas de Van der Waals

(1) dipolo-dipolo

(2) dipolo-dipolo inducido

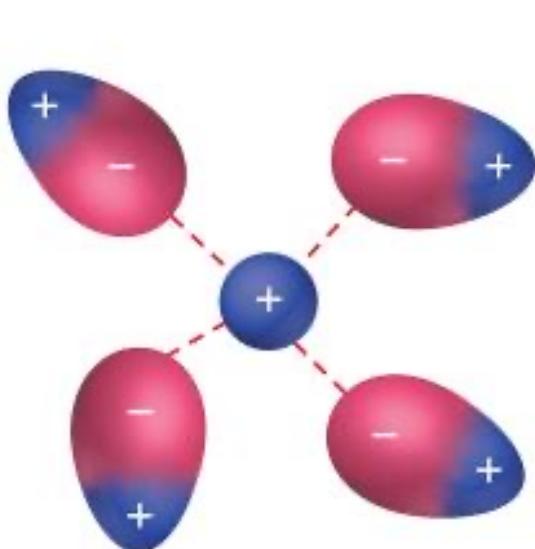
(3) dipolo instantáneo-dipolo inducido

(4) Enlace de hidrógeno

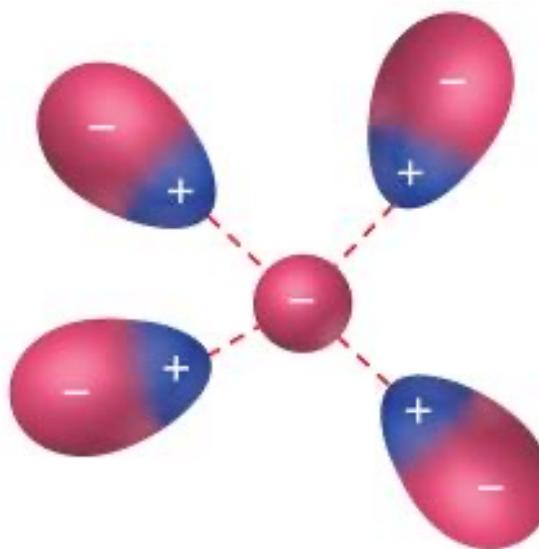
(5) Interacción ión-dipolo o ión-dipolo inducido

Interacciones ión-dipolo

- Son el resultado de la **interacción electrostática** entre la carga de una especie iónica y el momento dipolar de una molécula polar



Atracciones catión-dipolo

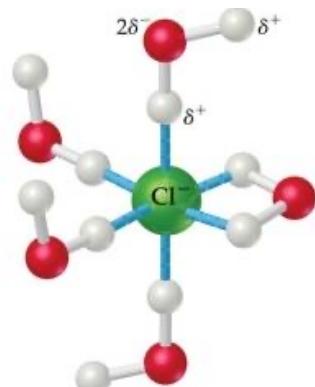
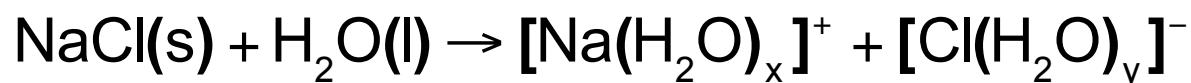
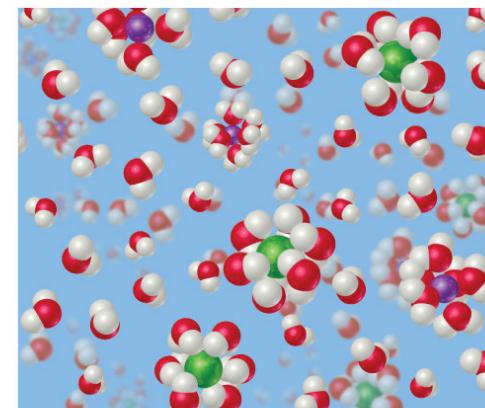
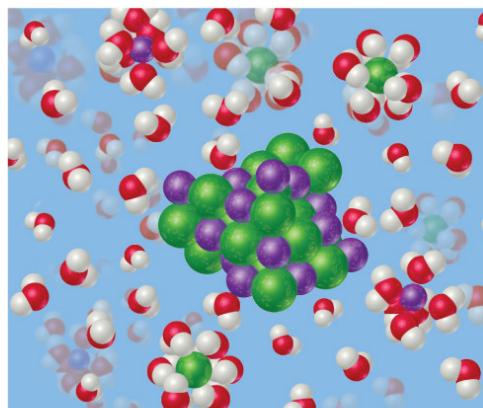
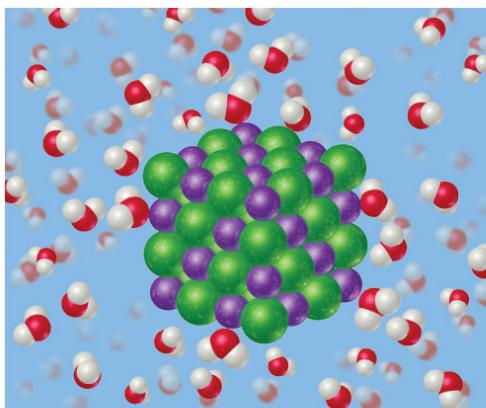


Atracciones anión-dipolo

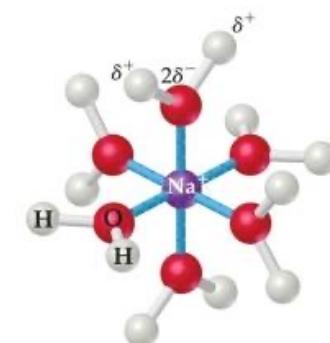
$$E = -\frac{q\mu}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Interacciones ión-dipolo

- La existencia de estas fuerzas ayuda a entender que las sustancias iónicas se disuelven fácilmente en disolventes polares.

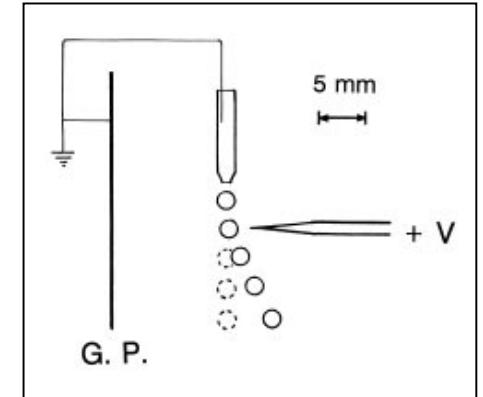
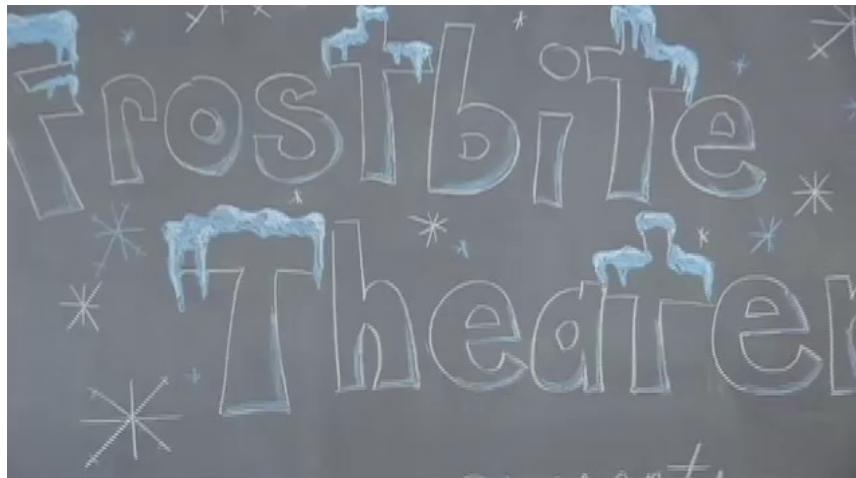


los iones en disolución siempre
se encuentran solvatados



Interacciones ión-dipolo

- Si sometemos una gota de agua a un campo eléctrico externo provocamos una deflexión de la misma
- En este video se pone de manifiesto:
 - ◆ la naturaleza polar del agua
 - ◆ las interacciones ion-dipolo
- <https://www.youtube.com/watch?v=VhWQ-r1LYXY>



Fuerzas de Van der Waals

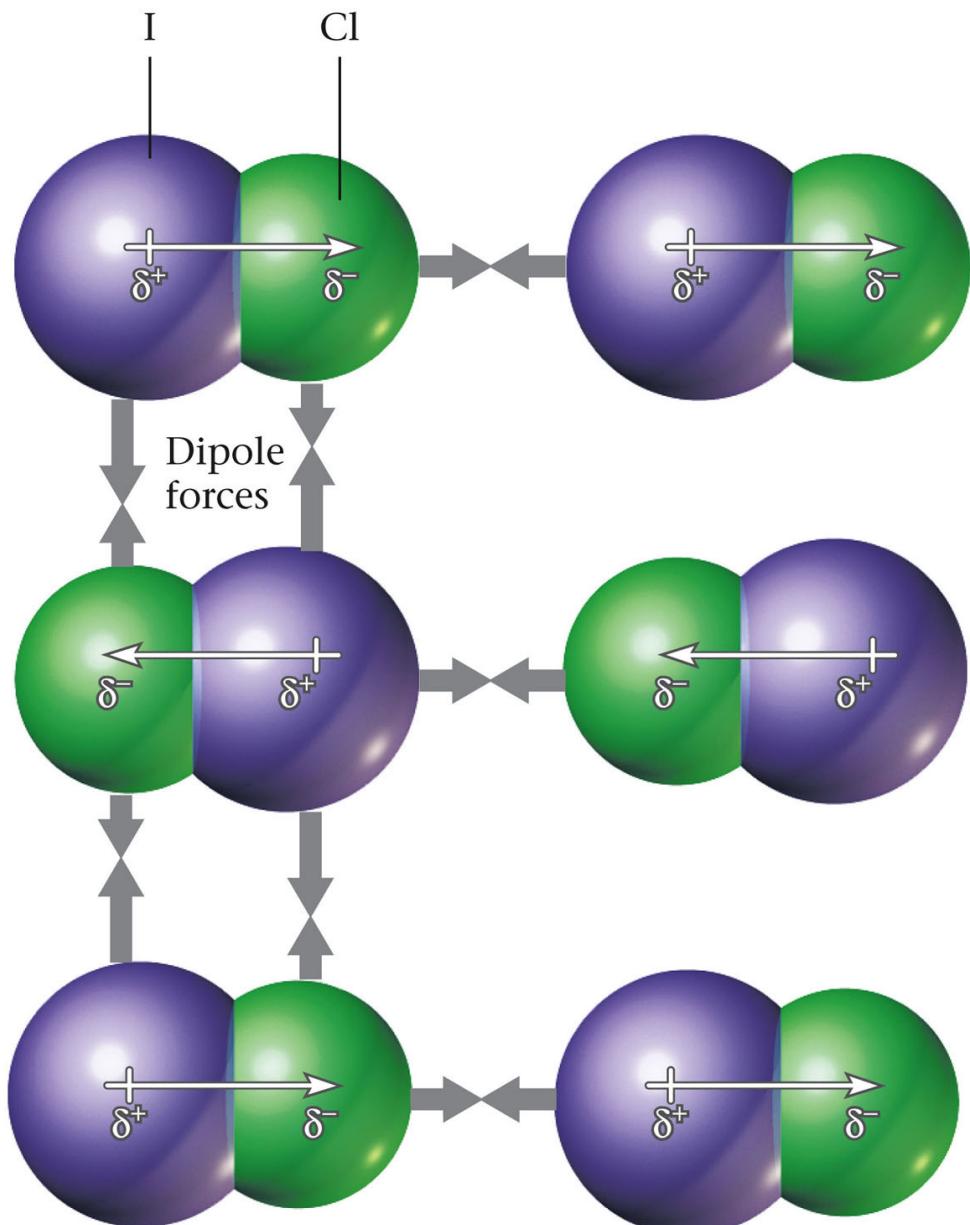
(1) dipolo-dipolo

De orientación, Keesom

(2) dipolo-dipolo inducido

(3) dipolo instantáneo-dipolo
inducido

Interacciones dipolo-dipolo



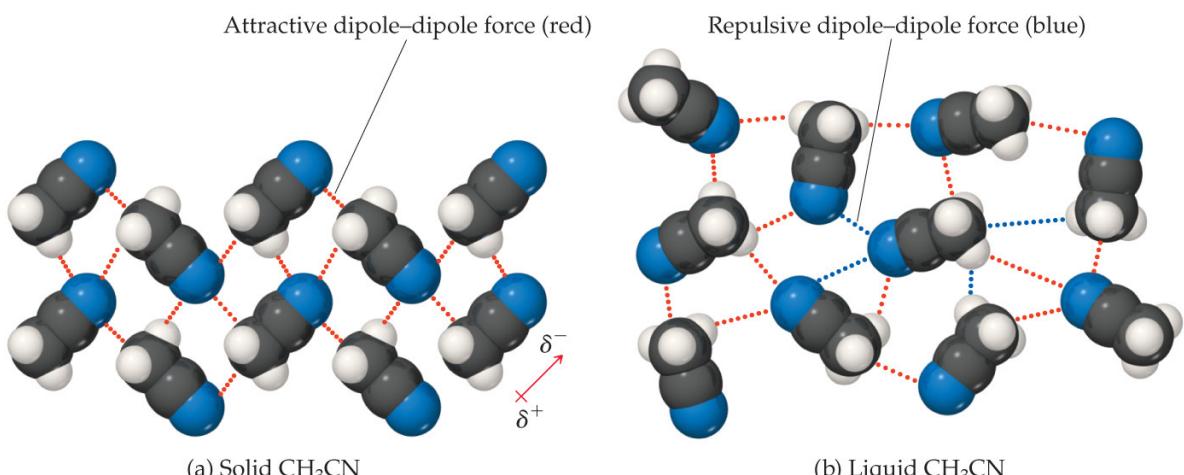
- Las fuerzas dipolares se establecen únicamente entre moléculas de carácter polar
- Cuando dos moléculas polares se acercan suficientemente, sus dipolos interactúan entre sí. Aparece una **fuerza electrostática** atractiva entre ellas que provoca que se orienten de manera adecuada
 - ◆ El extremo positivo de una es atraído al extremo negativo de la otra y viceversa.
 - ◆ Estas fuerzas únicamente son importantes cuando las moléculas están **muy cerca** unas de otras.

Interacciones dipolo-dipolo

- Su intensidad aumenta con el valor del momento dipolar y disminuye drásticamente con la distancia
- Son más débiles que las ion-dipolo

La energía de interacción viene dada por la ecuación (el signo negativo indica que la interacción es atractiva):

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\mu_1\mu_2}{r^3}$$



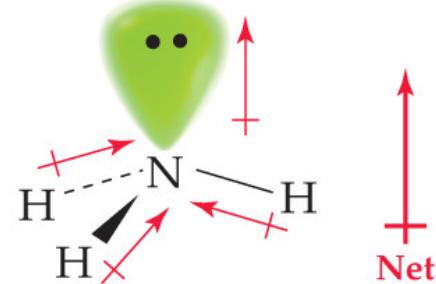
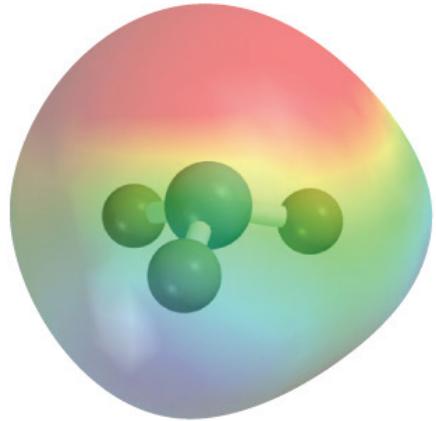
En una sustancia polar en estado líquido, surgen interacciones dipolares atractivas y repulsivas pero dominan las primeras.

Debido a que la intensidad de la interacción es relativamente débil, las moléculas son libres para moverse y por tanto se distribuyen de manera desordenada en el fluido

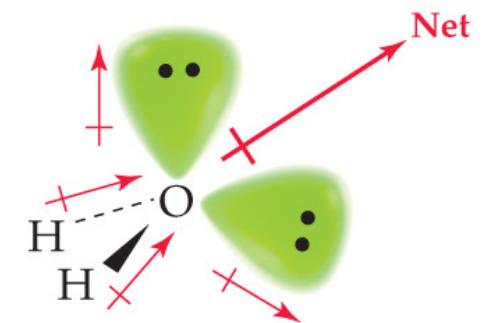
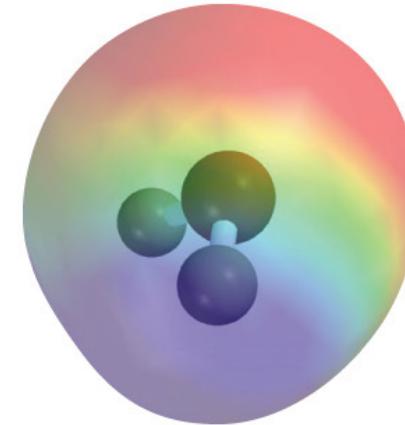
© 2012 Pearson Education, Inc.

Enlaces covalentes y momento dipolar

mapas de potencial eléctrico



Ammonia ($\mu = 1.47 \text{ D}$)



Water ($\mu = 1.85 \text{ D}$)

© 2012 Pearson Education, Inc.

- NH_3 y H_2O , son moléculas polares porque los momentos dipolares asociados a los enlaces covalentes N-H y O-H no se cancelan
- Fíjate que los pares solitarios tambien juegan un papel en la estimación del momento dipolar total.

Interacciones dipolo-dipolo

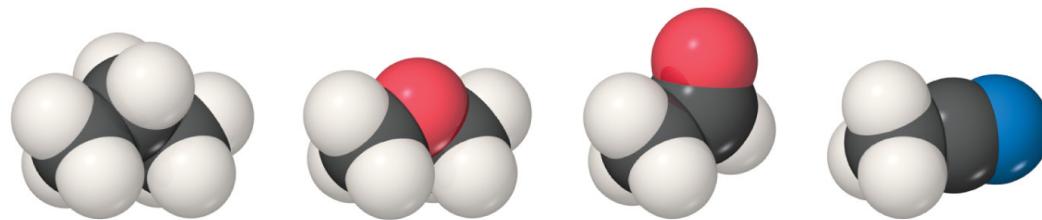
- En entidades moleculares semejantes (con masas moleculares parecidas)...cuanto más polar es la molécula, más alto su punto de ebullición.

TABLE 9.4 Boiling Points of Nonpolar Versus Polar Substances

Nonpolar			Polar		
Formula	MM (g/mol)	bp (°C)	Formula	MM (g/mol)	bp (°C)
N ₂	28	-196	CO	28	-192
SiH ₄	32	-112	PH ₃	34	-88
GeH ₄	77	-90	AsH ₃	78	-62
Br ₂	160	59	ICl	162	97

Interacciones dipolo-dipolo

- En entidades moleculares semejantes...cuanto más polar es la molécula, más alto su punto de ebullición.



Propane
CH₃CH₂CH₃
MW = 44 amu
 μ = 0.1 D
bp = 231 K

Dimethyl ether
CH₃OCH₃
MW = 46 amu
 μ = 1.3 D
bp = 248 K

Acetaldehyde
CH₃CHO
MW = 44 amu
 μ = 2.7 D
bp = 294 K

Acetonitrile
CH₃CN
MW = 41 amu
 μ = 3.9 D
bp = 355 K

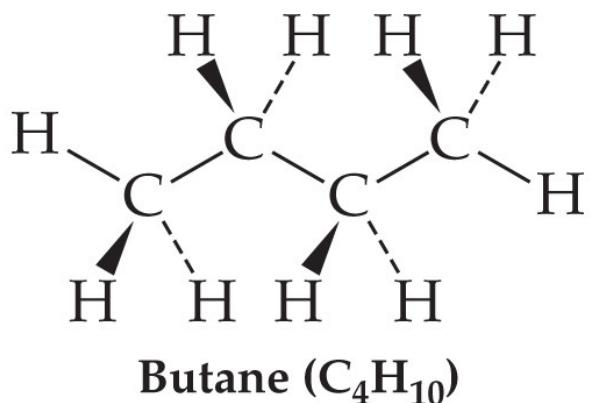
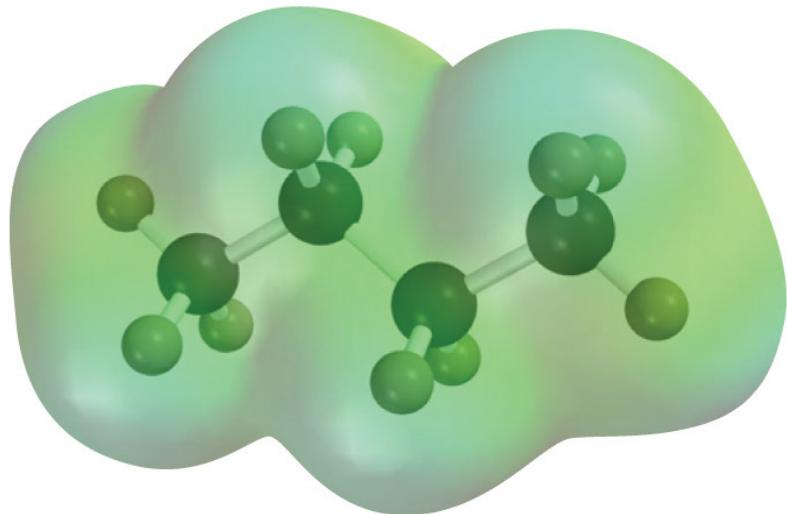
Increasing polarity
Increasing strength of dipole-dipole forces

Fíjate que la correlación de la temperatura de ebullición es con el momento dipolar, no con el peso molecular...

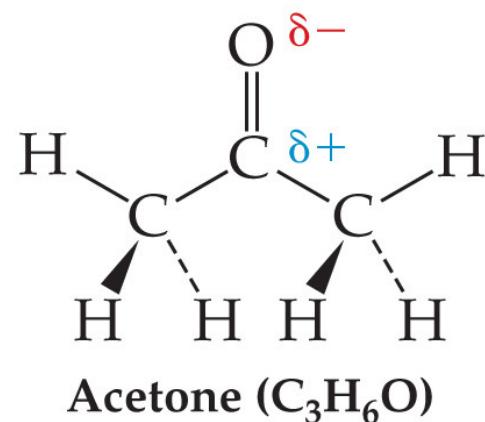
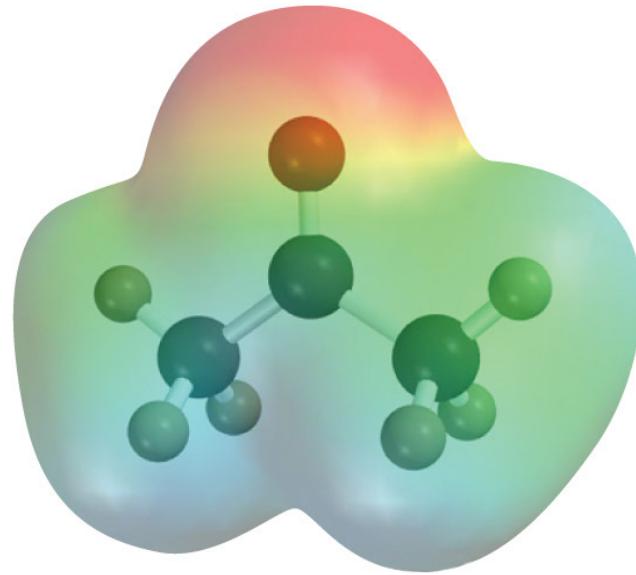
© 2012 Pearson Education, Inc.

Sustancia	Peso molecular (amu)	Momento dipolar μ (D)	Punto de ebullición (K)
Propano, CH ₃ CH ₂ CH ₃	44	0.1	231
Éter dimetílico, CH ₃ OCH ₃	46	1.3	248
Cloruro de metilo, CH ₃ Cl	50	1.9	249
Acetaldehído, CH ₃ CHO	44	2.7	294
Acetonitrilo, CH ₃ CN	41	3.9	355

Interacciones dipolo-dipolo



Mol mass = 58 amu
bp = $-0.5^\circ C$



Mol mass = 58 amu
bp = $56.1^\circ C$

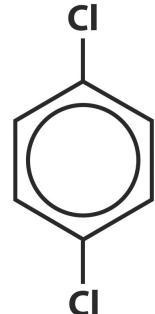
Igual masa molecular... diferente polaridad.... Muy diferente temperatura de ebullición (bp)

© 2012 Pearson Education, Inc.

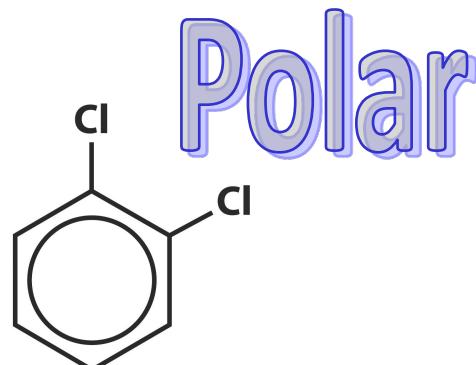
Predicción de puntos de ebullición

En los pares de isómeros propuestos, elige la que tenga un mayor punto de ebullición

la terminología
cis, trans en
ocasiones es
ambigua. Se
prefiere utilizar
utilizar Z, E

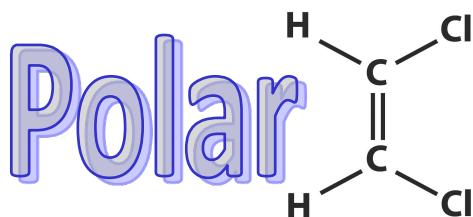


3 *p*-Dichlorobenzene

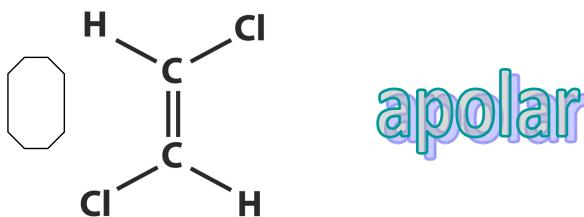


4 *o*-Dichlorobenzene

(3)	174 °C
(4)	180 °C

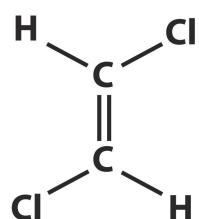


5 *cis*-Dichloroethene



6 *trans*-Dichloroethene

(5)	60 °C
(6)	48 °C



(6)	48 °C
(7)	55 °C

Fuerzas de Van der Waals

(1) dipolo-dipolo

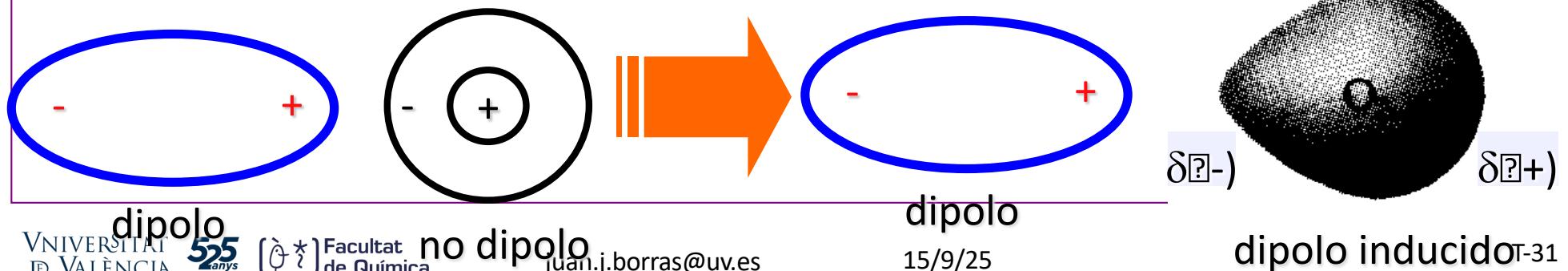
(2) dipolo-dipolo inducido

(3) dipolo instantáneo-dipolo
inducido

De inducción, Debye

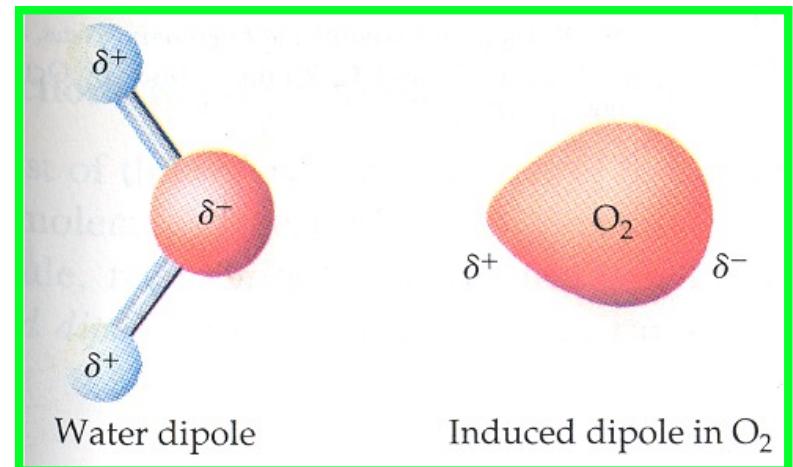
Dipolo permanente-dipolo inducido (Debye)

- La interacción de Debye se puede dar en dos casos:
 - ◆ Entre una molécula polar y otra no polar.
 - ◆ Pero también entre dos moléculas polares; el efecto de inducción es mutuo
- También son interacciones débiles
- Procesos en los que intervienen:
 - ◆ favorecen la solubilidad de gases no polares en H₂O (N₂, O₂, CO₂, ...)
 - La solubilidad del O₂ en el agua es esencial para la vida acuática
- Origen:
 - ◆ molécula polar ($\mu > 0$, p.e. H₂O) puede **inducir** asimetría de carga en una molécula no polar vecina (p.e.O₂) (puede polarizarla)



Dipolo permanente-dipolo inducido (Debye)

- La intensidad de la interacción de Debye entre un dipolo y una molécula apolar depende de:
 - ◆ Momento dipolar de la molécula polar (μ)
 - ◆ α , polarizabilidad de la molécula apolar (definida un poco más adelante)



$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\alpha \cdot \mu^2}{r^6}$$

Guinness utiliza N₂ en lugar de CO₂ para servir la cerveza y conseguir que la espuma sea la adecuada

Solubilidad en H ₂ O		
Gas	MM	(moles/m ³)
He	4,0	0,31
Xe	131,3	3,1

Solubilidad en H ₂ O		
Gas	MM	(moles/m ³)
N ₂	28,0	0,54
O ₂	32,0	1,1
CO ₂	44,0	32



Polarizabilidad de algunos átomos y moléculas

Table 16.1
Polarizabilities of Some Atoms and Molecules

Atom	$\alpha/10^{-30} \text{ m}^3$	Molecules	$\alpha/10^{-30} \text{ m}^3$
He	0.20	H ₂	0.80
Ne	0.40	N ₂	1.74
Ar	1.66	CO ₂	2.91
Kr	2.54	NH ₃	2.26
Xe	4.15	CH ₄	2.61
I	4.96	C ₆ H ₆	10.4
Cs	42.0	CCl ₄	11.7

Fuerzas de Van der Waals

(1) dipolo-dipolo

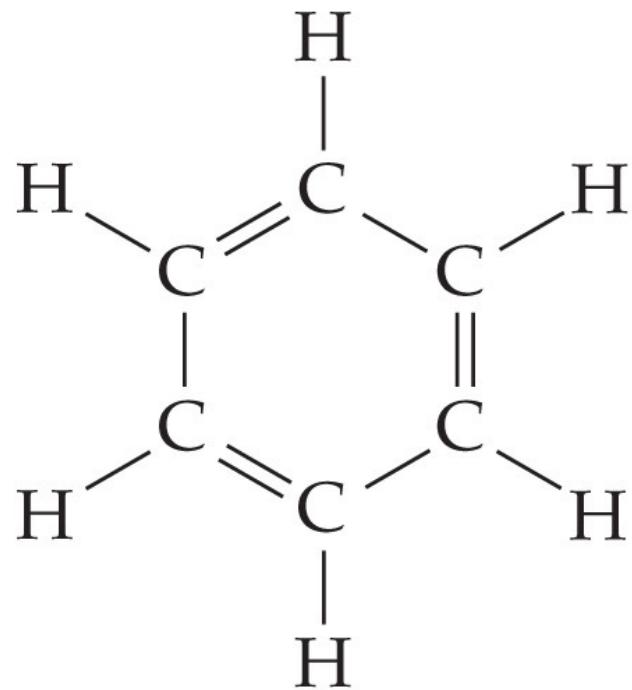
(2) dipolo-dipolo inducido

(3) dipolo instantáneo-dipolo
inducido

De dispersión, London

Fuerzas de dispersión (London)

¿Por qué el benceno es una sustancia líquida a temperatura ambiente?

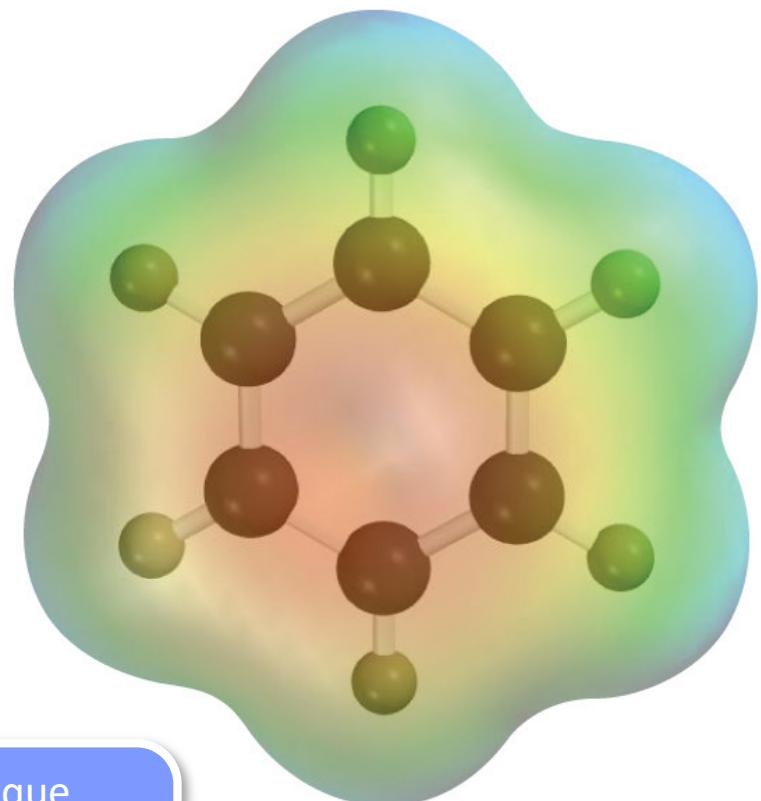


Benzene

$$\mu = 0$$

$$mp = 5.5 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$bp = 80.1 \text{ } ^\circ\text{C}$$



Se trata de una molécula apolar en la que esperamos que las interacciones entre las moléculas no fueran muy importantes ... ¿o nos perdemos algo?

© 2012 Pearson Education, Inc.

Fuerzas de dispersión (London)

- ¿Por qué aumenta el punto de ebullición o el de fusión para los dihalógenos?

TABLE 10.3 Melting Points
and Boiling Points
of the Halogens

Halogen	mp (K)	bp (K)	
F_2	53.5	85.0	estado físico a 20°C (293K)
Cl_2	171.6	239.1	F_2 : gas
Br_2	265.9	331.9	Cl_2 : gas
I_2	386.8	457.5	F_2 : líquido I_2 : sólido

© 2012 Pearson Education, Inc.

Fuerzas de dispersión (London)



Fritz London
1900-1954

Scanned at the American
Institute of Physics

■ Evidencias experimentales:

- ◆ los gases nobles (He, Ne, Ar...) pueden licuarse
- ◆ muchos compuestos apolares, pe. el benceno, son líquidos a temperatura ambiente

■ Por tanto: “*Tiene que existir fuerzas atractivas entre las moléculas apolares que permitan explicar esos hechos*”

■ ¿Qué mecanismo tienen las moléculas apolares para atraerse entre sí?

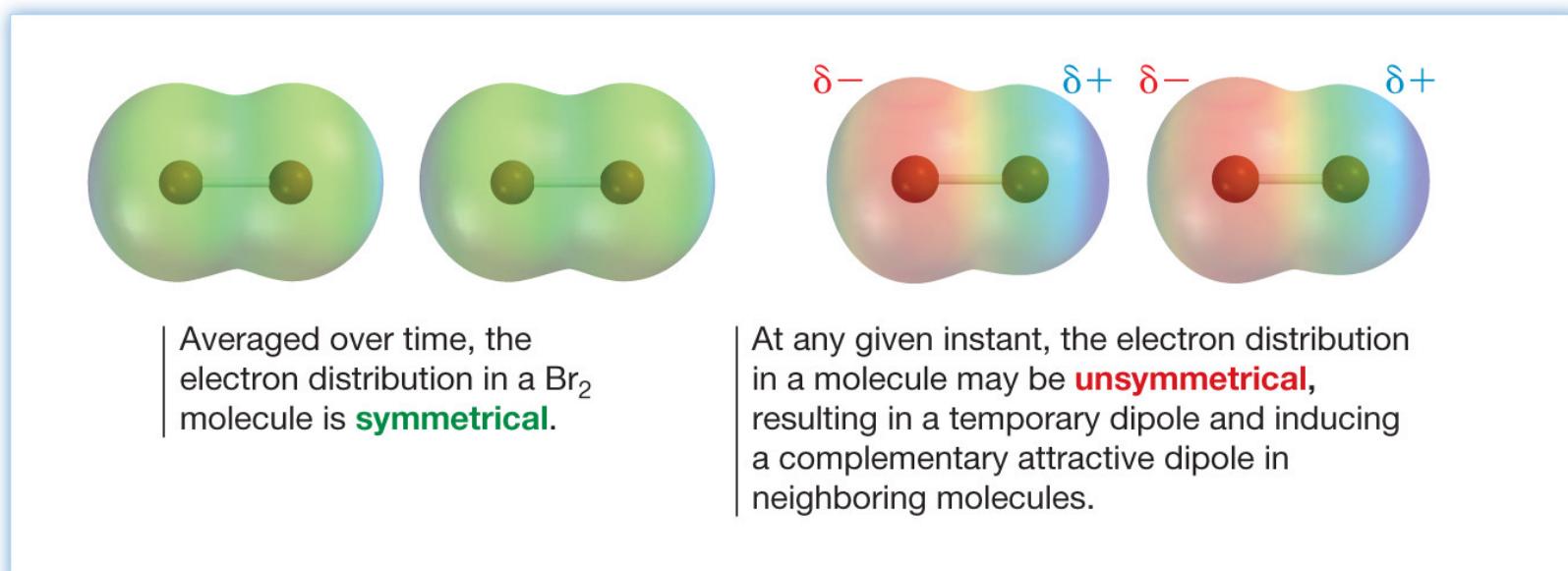
- ◆ El físico alemán Fritz London ofreció una explicación teórica en 1928
- ◆ La fluctuación estadística en la distribución electrónica en una molécula crea un potencial eléctrico que induce, como resultado, un momento eléctrico dipolar (instantáneo) en la molécula vecina. Ambos, el dipolo instantáneo y el inducido, **se atraen** entre si debido a las denominadas **fuerzas de dispersión**

Las moléculas de todas las sustancias presentan fuerzas de dispersión (de naturaleza atractiva)

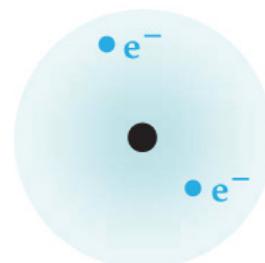
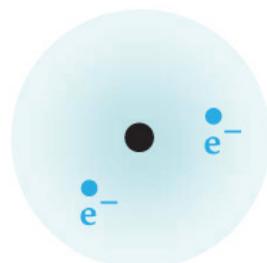
Fuerzas de dispersión (London)

■ Formación de dipolos inducidos

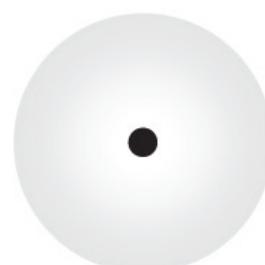
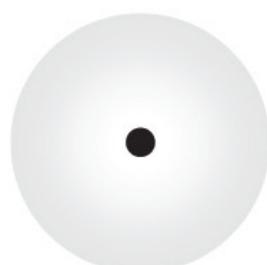
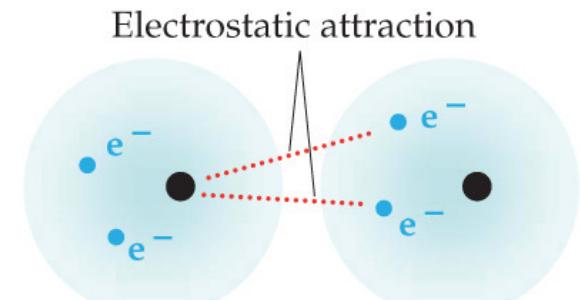
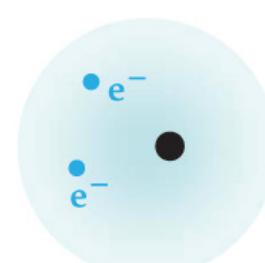
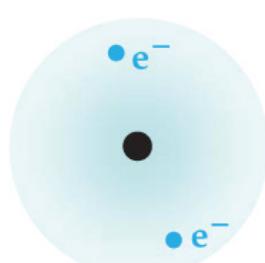
- ◆ Situación inicial: Una molécula apolar tiene una distribución de carga simétrica (en realidad las distribuciones electrónicas no son perfectamente uniformes)
- ◆ Súbitamente, un desplazamiento de algún electrón produce un dipolo instantáneo (de vida media muy corta).
- ◆ Dipolo inducido. El dipolo instantáneo induce una separación de carga en la molécula vecina. Los dipolos inducidos se reorientan adecuadamente y pueden interaccionar entre ellos en el escaso tiempo en que se mantienen estos dipolos (instantáneo e inducido)



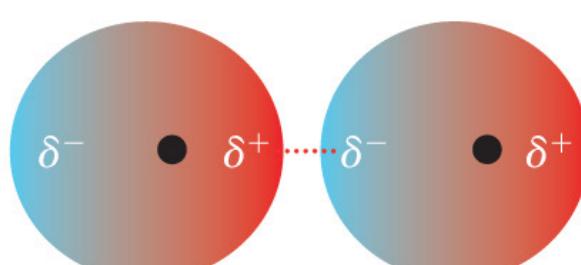
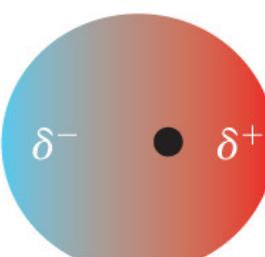
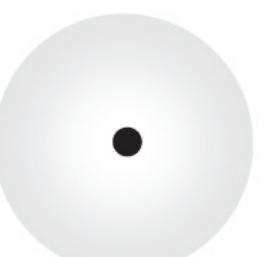
¿Cómo se generan las fuerzas de dispersión?



Subatomic particle view



Polarization view



(a) Two helium atoms, no polarization

© 2012 Pearson Education, Inc.

(b) Instantaneous dipole on atom B

(c) Induced dipole on atom A

Intensidad de las fuerzas de dispersión

- Existen entre todos los tipos de moléculas o átomos. Se dan incluso en moléculas apolares
- Son fuerzas muy sensibles a la distancia ($E \sim 1/r^6$). Distancia típica de 1 nm (10^{-9} m)
- Son de intensidad pequeña
- La intensidad de las fuerzas de dispersión depende de la **polarizabilidad (α)**: medida de la facilidad con que la nube electrónica se puede distorsionar por efecto de un campo eléctrico externo.
- La polarizabilidad depende:
 - ◆ (1) **tamaño molecular** Cuanto mayor sea la masa molecular => más electrones => molécula más polarizable
 - ◆ (2) **forma de las moléculas** Cuanto más larga sea una cadena hidrogenocarbonada, más eficaz es la interacción intermolecular

$$U = -Cte \frac{\alpha_1 \cdot \alpha_2}{r^6}$$

Dependencia de la masa molecular

¿Cómo podemos explicar la evolución en el punto de ebullición de los hidruros del G-14?

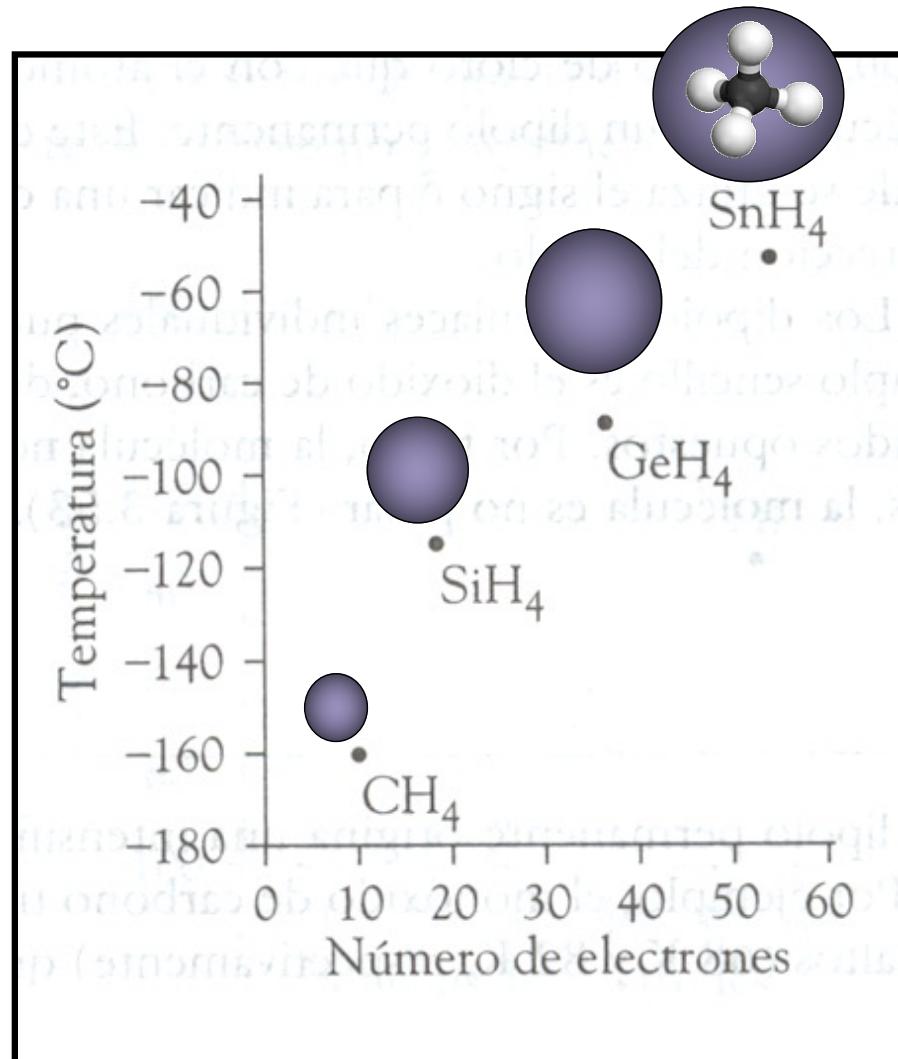
Conforme aumenta la masa molecular y con ella, el número de electrones, aumenta la polarizabilidad y por tanto la magnitud de la interacción de dispersión

Explica la tendencia en los puntos de ebullición:

HCl: - 85°C

HBr: - 67 °C

HI: - 35°C



Dependencia de la masa molecular

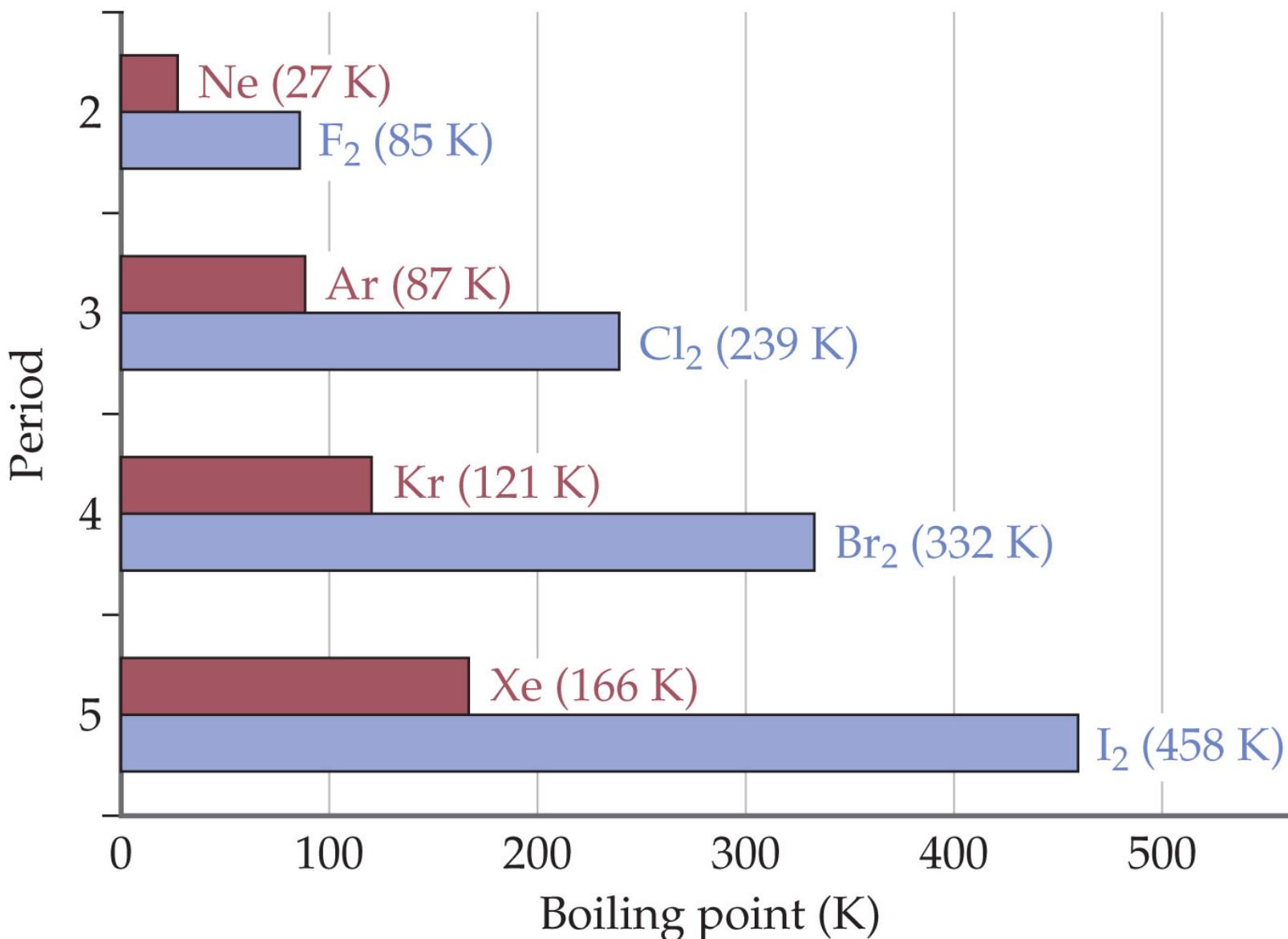
- La intensidad de las fuerzas de dispersión tiende a aumentar con la masa molecular
- Los átomos grandes tienen nubes de electrones más grandes, las cuales son más fáciles de polarizar.
- Las fuerzas de dispersión permiten que moléculas apolares se puedan atraer entre sí. Ejemplos:
 - ◆ $I_2 \cdots I_2$ sólido a temperatura ambiente
 - ◆ $N_2 \cdots N_2$ se puede licuar con relativa facilidad: $N_2(l)$ p.e. = 77,4 K

A 25ºC: $Cl_2(gas)$ $Br_2(líquido)$ $I_2(sólido)$

$\alpha(I_2) > \alpha(Br_2) > \alpha(Cl_2)$

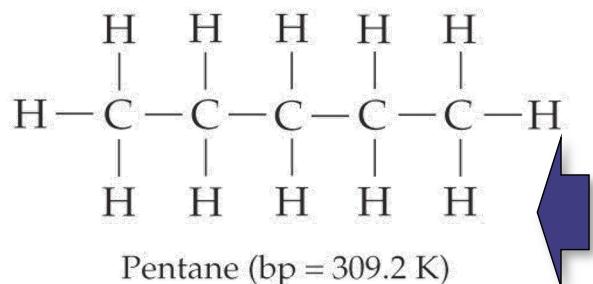
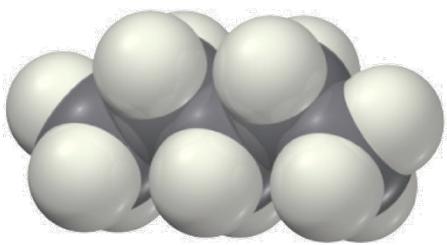
Peso molecular Halógeno (uma)	Punto de ebull. (K)	Gas noble (uma)	Peso molecular Gas noble (uma)	Punto de ebull. (K)
F_2	38.0	He	4.0	4.6
Cl_2	71.0	Ne	20.2	27.3
Br_2	159.8	Ar	39.9	87.5
I_2	253.8	Kr	83.8	120.9
$\frac{V_{NIV}}{V_I}$		Xe	131.3	166.1

Comparativa entre halógenos y gases nobles

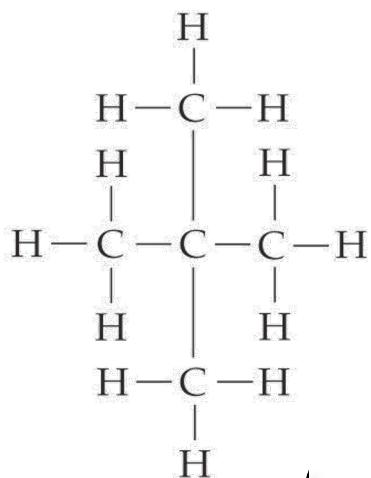
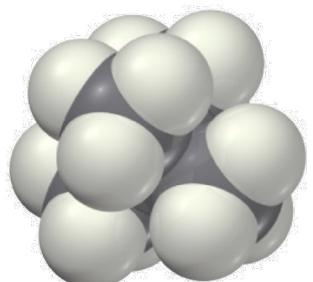


© 2012 Pearson Education, Inc.

Dependencia de la forma



La **forma de la molécula** también afecta la intensidad de las fuerzas de dispersión



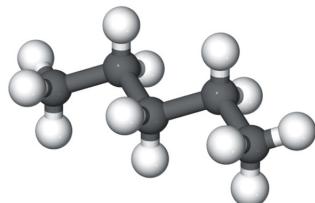
2,2-Dimethylpropane (bp = 282.6 K)



Las moléculas grandes y lineales (como el n-pentano), con una mayor área de contacto, tienden a presentar fuerzas de dispersión más intensas que las cortas y esféricas (como el neo-pentano), con un área de contacto menor.

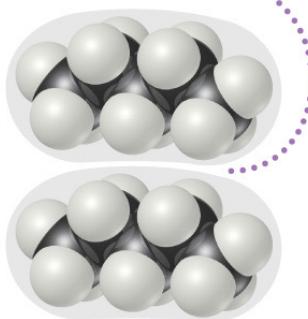
Dependencia de la forma molecular

- ¿Cuál de las dos especies isoeléctricas tiene un mayor punto de ebullición?



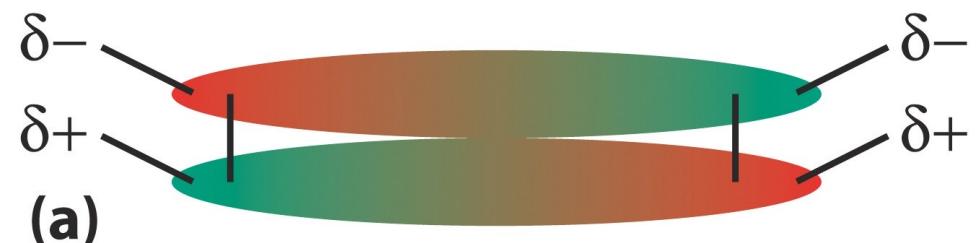
8 Pentane, C_5H_{12}

Linear molecule, larger surface area
enhances intermolecular contact and
increases dispersion force...

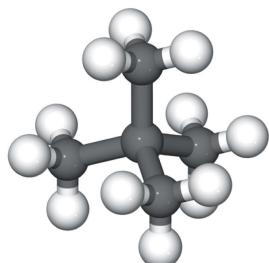


n-Pentane (C_5H_{12})
bp = 309.4 K

(8)	36 °C
(9)	10 °C

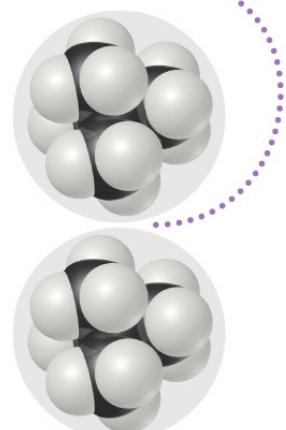


(a)

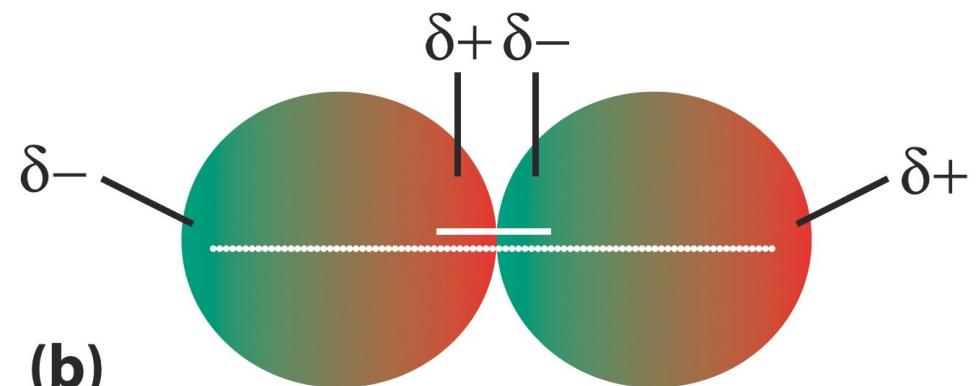


9 2,2-Dimethylpropane

Spherical molecule, smaller surface area
diminishes intermolecular contact and
decreases dispersion force...



Neopentane (C_5H_{12})
bp = 282.7 K



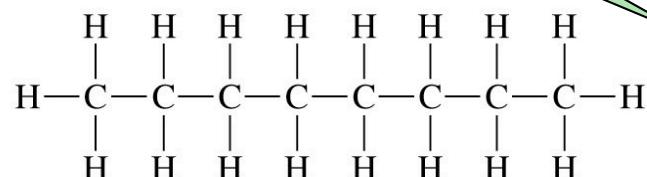
(b)

Dependencia de la forma molecular

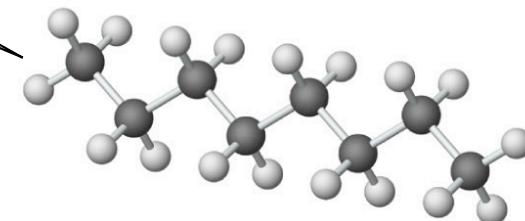
... punto de ebullición más alto.

(a) Octane
 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$
melting point -56.8°C
boiling point 125.7°C

Molécula muy larga ...

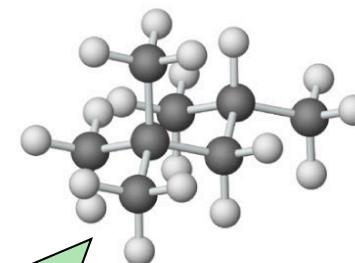
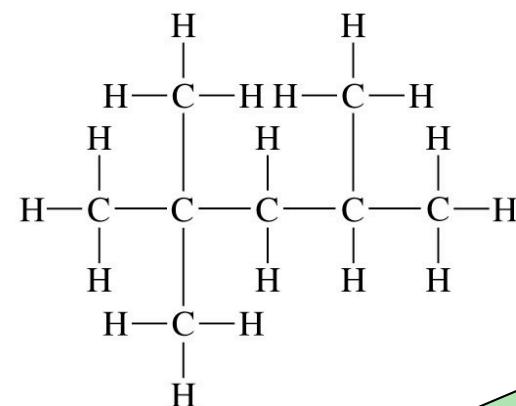


... puede tener una mayor separación de carga. Fuerzas de atracción mas grandes, lo que significa ...



(b) (Isooctane)
2,2,4-Trimethylpentane
 $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
melting point -104.7°C
boiling point 99.2°C

... dando una fuerzas de dispersion más débiles y un punto de ebullición menor.



Para este isómero más compacto, la separación de cargas es menos grande ...

Energía de las fuerzas intermoleculares

Tipo de interacción	Principales factores responsables de la energía de interacción	Energía típica en kJ/mol	Dependencia de la energía con la distancia
Ion–ion *	Carga de los iones	250	$1/d$
Enlace de hidrógeno	(tipo especial de interacción dipolo–dipolo)	10-40	
Ion–dipolo *	Carga del ion; momento dipolar	10-50	$1/d^2$
Dipolo–dipolo	Momentos dipolares	0,3 a 4	$1/d^3$
Dispersión o London	Polarizabilidades	1-10	$1/d^6$
Dipolo–dipolo inducido	Momento dipolar; polarizabilidad	0,05	$1/d^6$

* aunque no son estrictamente fuerzas intermoleculares al no afectar únicamente a moléculas se incluye su magnitud para poder compararlas

Se calcula que en el HCl(l), las fuerzas de dispersión suponen el 80% de la atracción entre las moléculas. El resto se debe a las dipolo-dipolo

Fíjate en la dependencia con la distancia de estas fuerzas

Balance entre las fuerzas de dispersión y la interacción dipolo-dipolo

Fuerzas de dispersión London

Interacción dipolo-dipolo

¿Cuál es predominante?

Es difícil establecer *a priori* cuál de las dos fuerzas predomina pero se pueden establecer dos ideas generales:

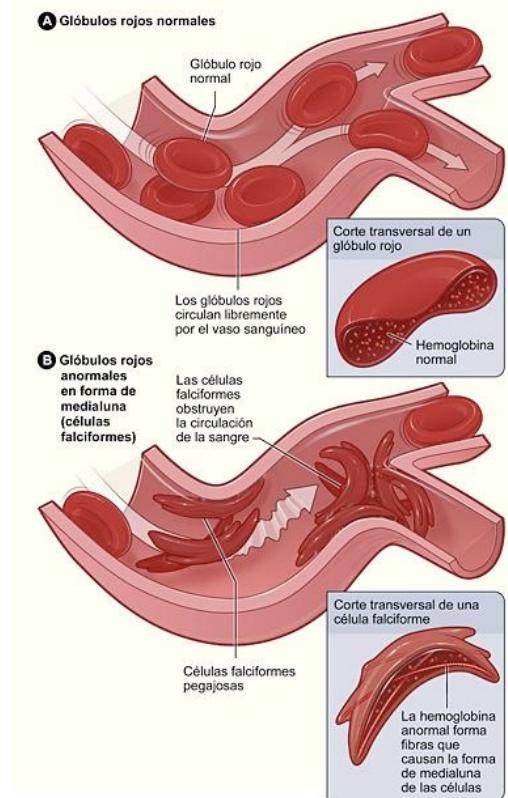
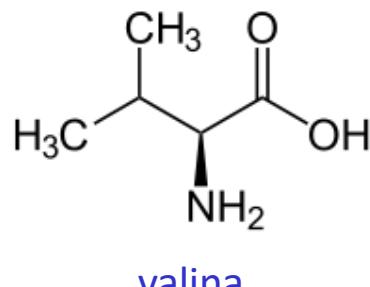
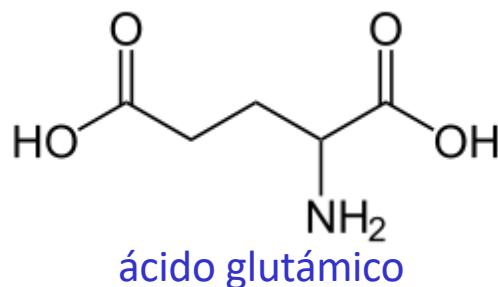
(2) En sustancias formadas por moléculas de tamaño grande, las **fuerzas de dispersión** pueden ser las dominantes.

(1) En sustancias formadas por moléculas pequeñas y polares, **interacciones dipolo-dipolo** serán probablemente las fuerzas dominantes.

Las fuerzas de van der Waals son las responsables del comportamiento no ideal de los gases

Anemia falciforme y fuerzas de dispersión

- Es una enfermedad hereditaria que consiste en que los glóbulos rojos adoptan una estructura en forma de media luna dificultándose su tránsito por los capilares
- El motivo tiene que ver con la sustitución en la posición 6 de la cadena β -hemoglobina del aminoácido ácido glutámico (hidrófilo) por valina (hidrófugo)
- Aumentan de manera considerable las interacciones de dispersión de London, provocando que las proteínas se agreguen formando un polímero
 - ◆ En ocasiones estas moléculas de hemoglobina dañadas (hemoglobina S) pueden precipitar fuera de la disolución provocando que la forma redondeada de un glóbulo rojo normal cambie a una forma de media luna



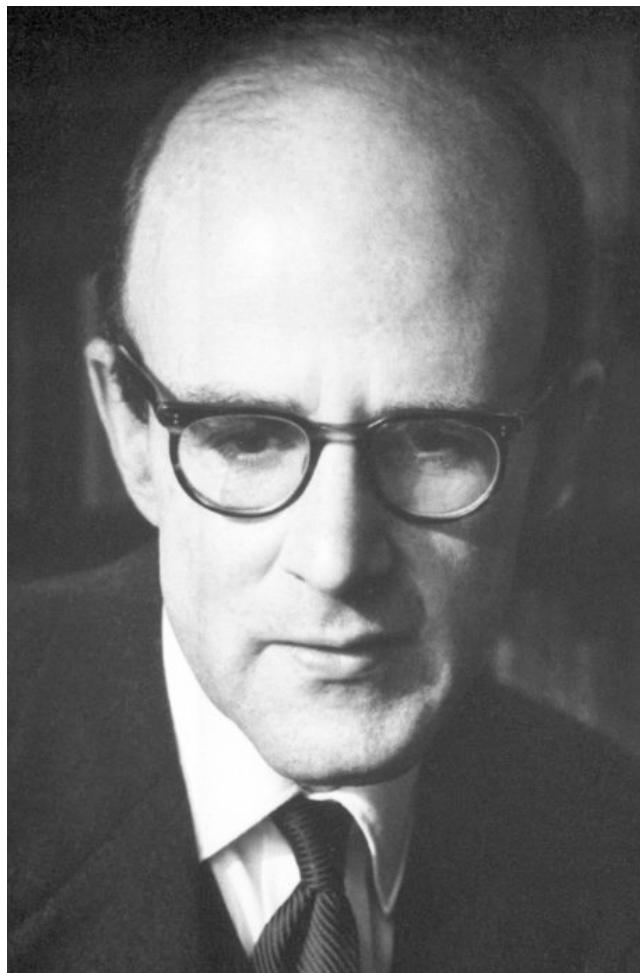
Estos glóbulos deformados pueden quedar “enganchados” entre sí causando obstrucciones que interrumpen el flujo sanguíneo y el transporte de oxígeno produciendo daño a los tejidos y episodios periódicos de dolor.



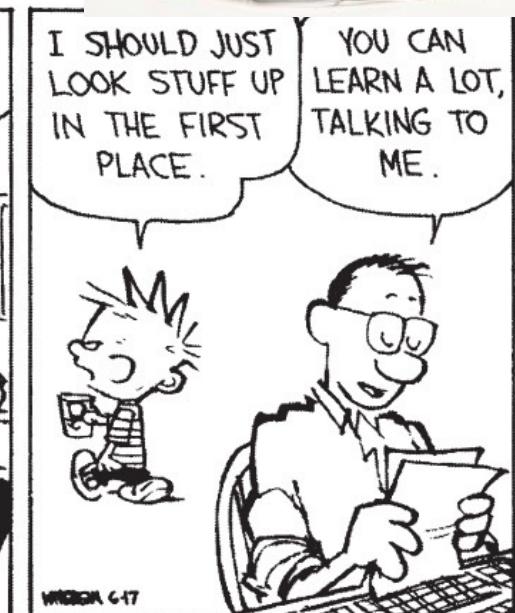
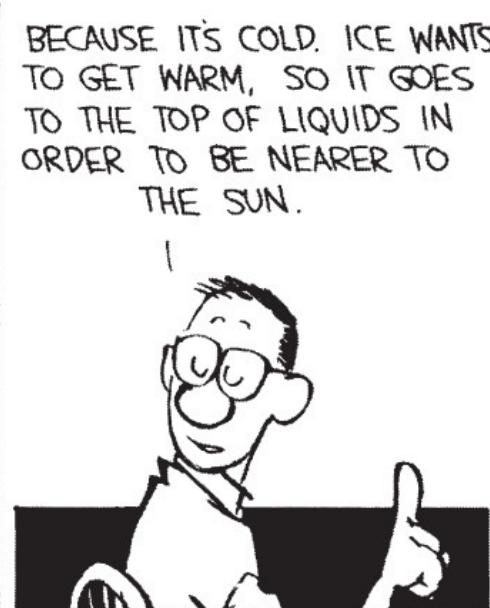
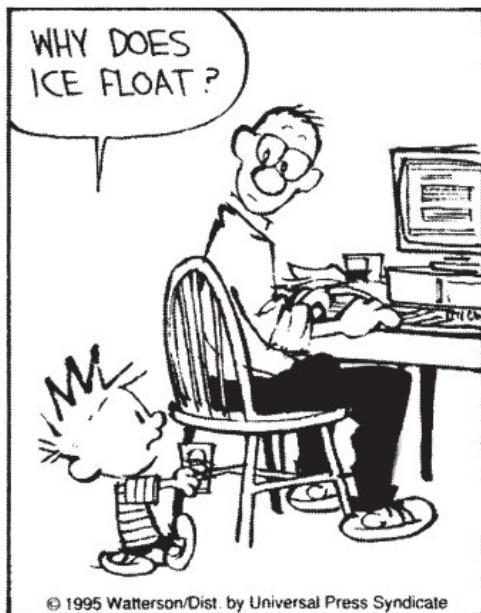
Como dato curioso, la población que posee el alelo de la anemia falciforme es resistente a la malaria, enfermedad transmitida por un parásito, el plasmodium falciparum, que vive en el interior de los hematíes. Este hecho, sin embargo, ha tenido una consecuencia negativa: que en África la anemia falciforme ya afecta a uno de cada cien habitantes. Esto se debe a que la malaria es una enfermedad históricamente endémica de África y, ha hecho aumentar la prevalencia del alelo de enfermedad

Max Perutz fue el primero en describir un modelo tridimensional de la hemoglobina.

Recibió el PN de Química en 1962 por la determinación de la estructura molecular proteinas globulares como la hemoglobina y mioglobina.



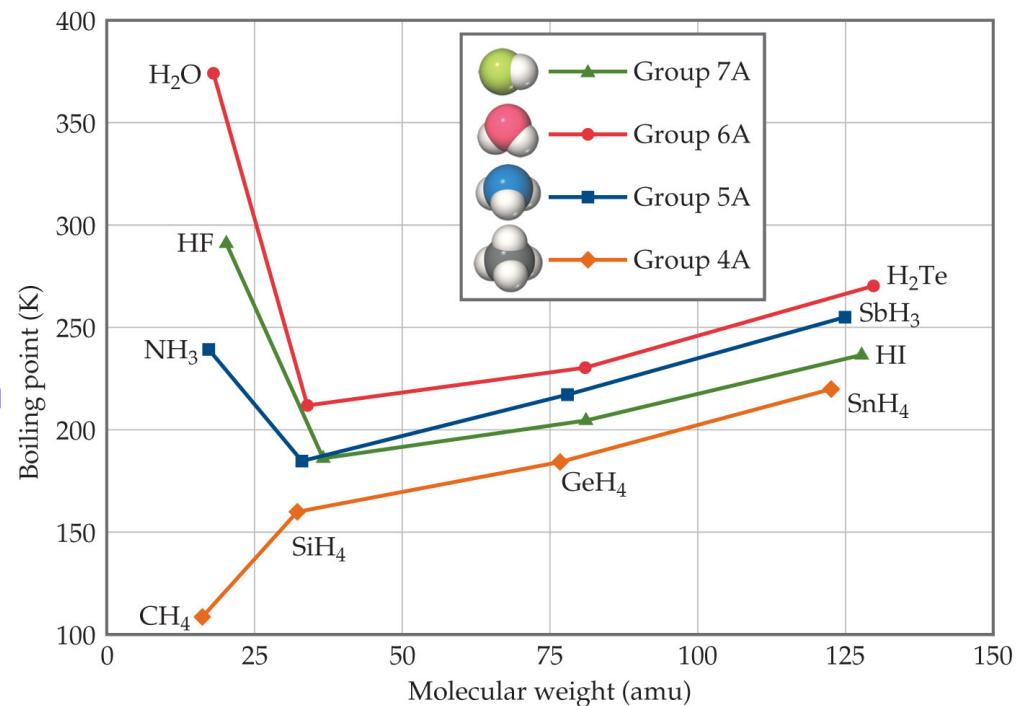
Enlace de hidrógeno



Evolución en el p.e. de algunos hidruros covalentes

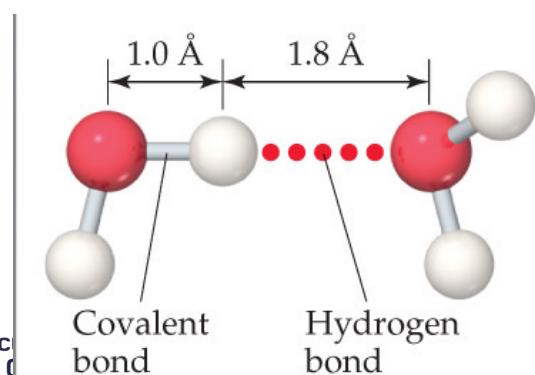
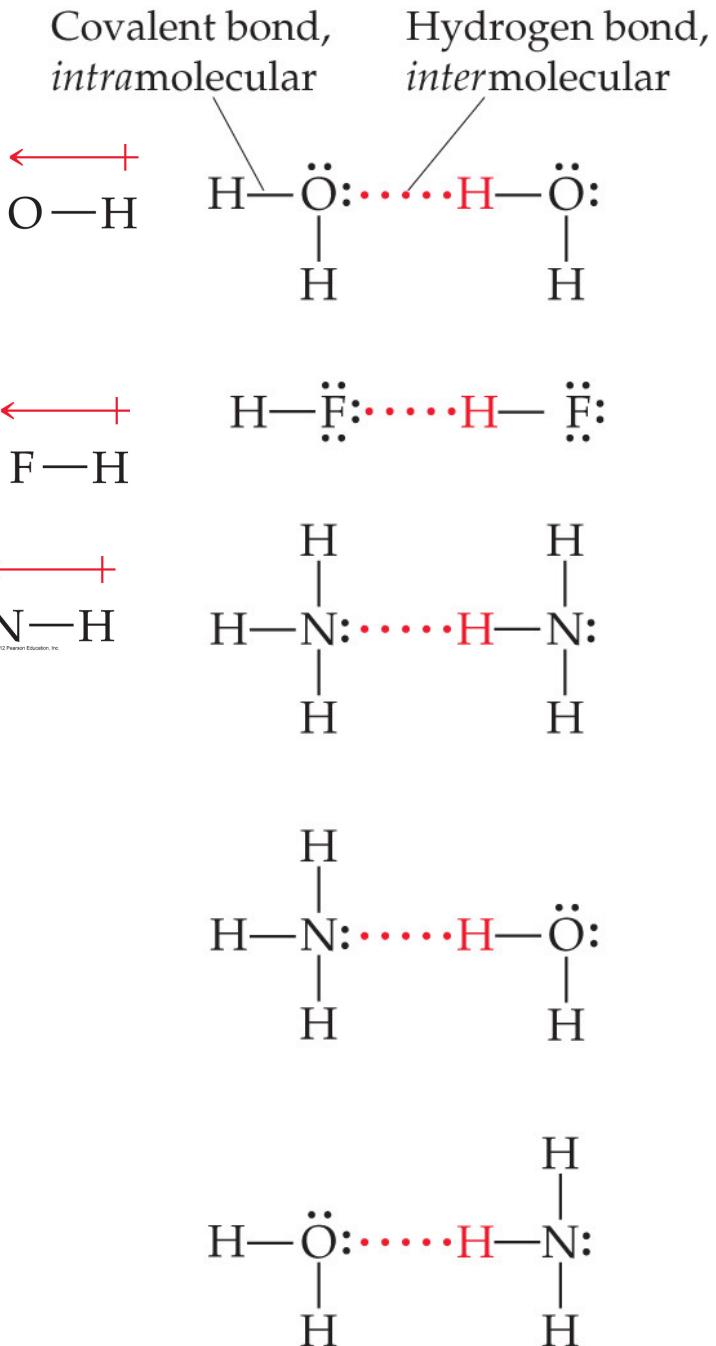
- La serie que involucra los hidruros (CH_4 a SnH_4) sigue la tendencia esperada de aumento de la temperatura de ebullición conforme aumenta el peso molecular (aumentan las interacciones de dispersión de London).
- La serie de moléculas polares sigue la tendencia del H_2S al H_2Te , pero el agua presenta una gran anomalía. Su temperatura de ebullición es unos 100 °C mas alta de la esperada
- Este hecho se observa tambien en HF , y NH_3

Evidencia experimental



Enlace de hidrógeno

- Es un tipo especialmente intenso de interacción dipolo-dipolo. Se forma cuando el H está unido covalentemente a N, O, o F
- Recibe el nombre singular de **enlace de hidrógeno**.
- El término *ponte de hidrógeno* está muy denostado actualmente y es preferible no utilizarlo.



Enlace de hidrógeno

■ El enlace de hidrógeno es una fuerza intermolecular en la cual es necesario que exista:

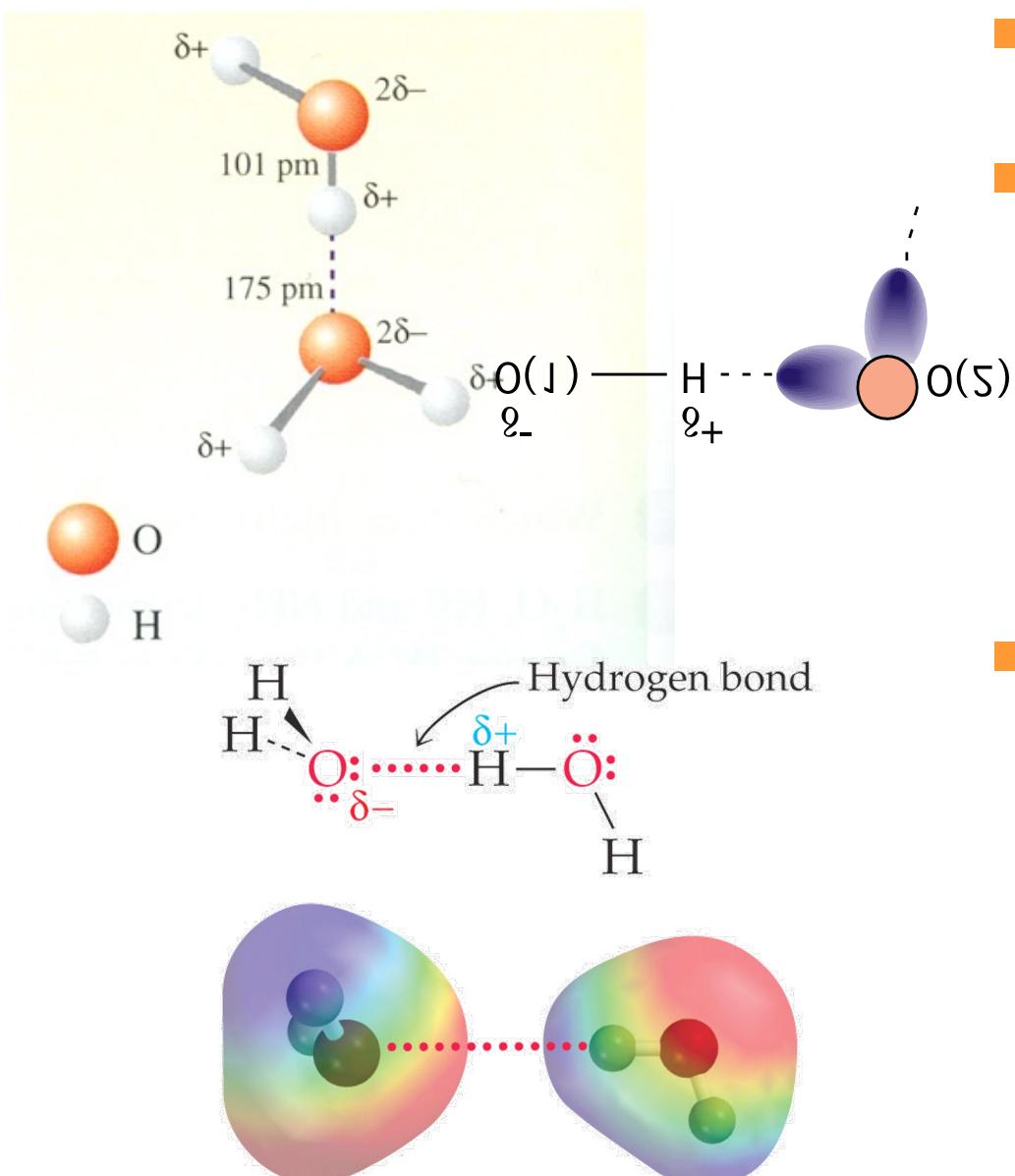
- ◆ un átomo de hidrógeno covalentemente unido a un átomo no metálico (pequeño y muy electronegativo como O, N, F) en una molécula ...
- ◆ y simultáneamente atraído a otro átomo no metálico (pequeño y muy electronegativo) de una molécula vecina (O, N, F).
- ◆ Z debe ser un aceptor protónico (debe tener pares solitarios, base de Brönsted)



Cuando Y y Z son pequeños y
muy electronegativos (N, O, F)
...

... este enlace se
denomina enlace de
hidrógeno

Elevada direccionalidad



- Es un **enlace intermolecular fuertemente direccional**
- Cuando el hidrógeno se enlaza a algún elemento muy electronegativo como el O, éste retira muy eficazmente la densidad electrónica del orbital 1s del H, dejando al núcleo (+1) expuesto, casi sin protección alguna.
- Se puede considerar como una interacción electrostática entre una carga neta positivas (núcleo de H) y la densidad de carga negativa que reside en el O

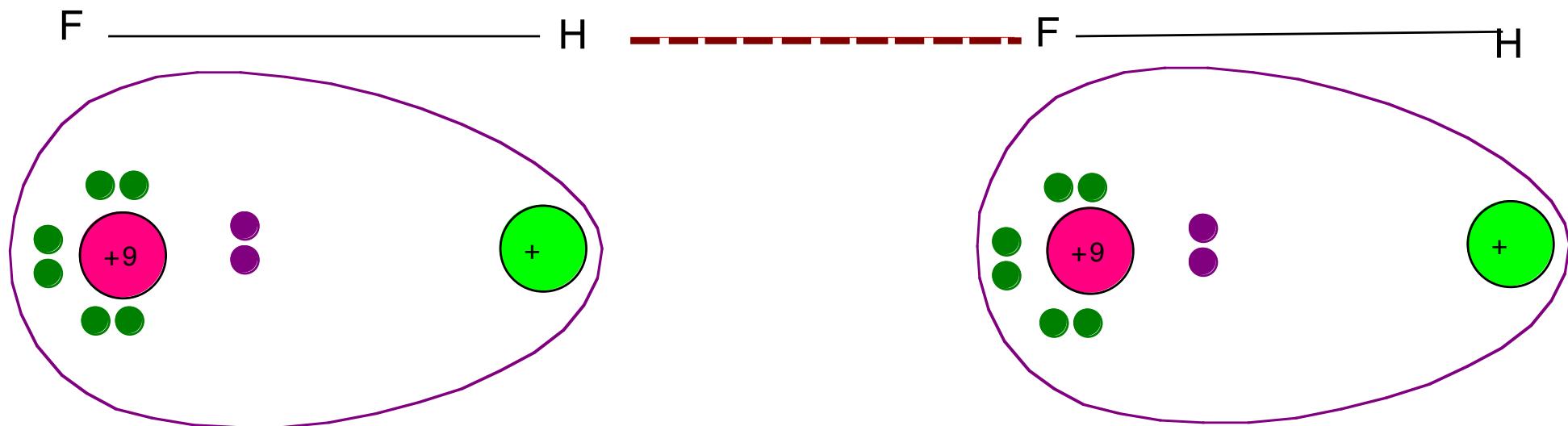
Energía del enlace de hidrógeno

- Los enlaces del hidrógeno pueden variar en fuerza de muy débil ($1\text{--}2 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) a relativamente fuerte ($165 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$), como en el ion HF_2^- .
- El valor medio se situa en poco menos de 40 kJ/mol
- Este orden de magnitud es mucho menor que un enlace covalente, pero en modo alguno despreciable. Son mucho mayores que las fuerzas de van der Waals. Juegan un papel clave en las propiedades de muchos compuestos

Enlace de hidrógeno (··)	Energía de enlace de Hidrógeno (··) kJ/mol	E. Covalente	Energía del enlace Covalente (—)
$\text{HS—H}\cdots\text{SH}_2$	7	S—H	363
$\text{H}_2\text{N—H}\cdots\text{NH}_3$	17	N—H	386
$\text{HO—H}\cdots\text{OH}_2$	22	O—H	464
$\text{F—H}\cdots\text{F—H}$	29	F—H	565
$\text{HO—H}\cdots\text{Cl}^-$	55	Cl—H	428
$\text{F}\cdots\text{H}\cdots\text{F}^-$	165	F—H	565

¿Por que es tan alta la energía de enlace?

- El enlace de hidrógeno es un caso especial de interacción dipolo-dipolo **especialmente intensa**
- Cuando el H se enfrenta a un elemento muy electronegativo, éste retira muy eficazmente la densidad de carga del H, quedando un núcleo de H^+ muy poco apantallado, capaz de atraer electrostáticamente la densidad electrónica del heteroátomo vecino
- Es específica del H dado que es el único elemento con un único electrón



Enlace de hidrógeno en el agua

Propiedades singulares del agua

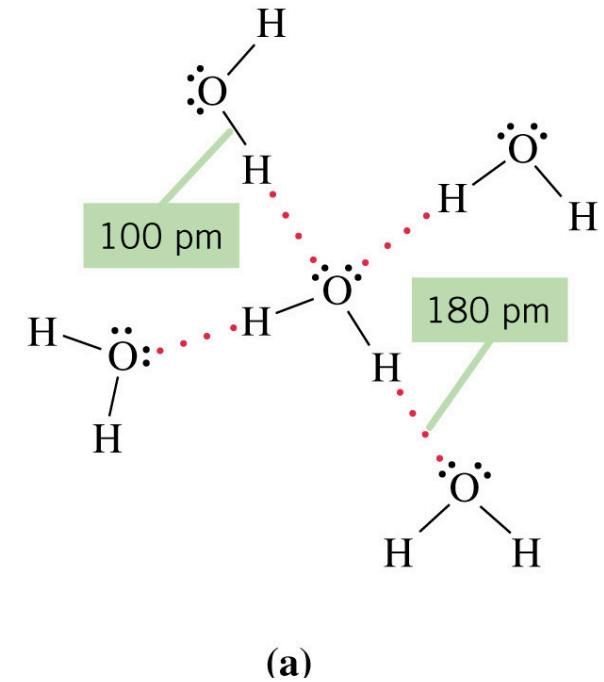
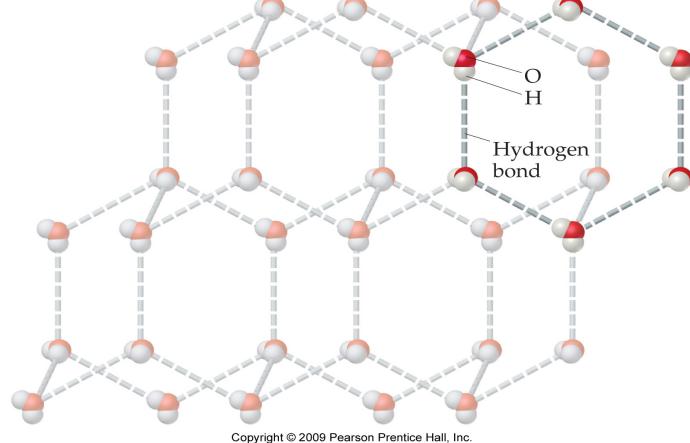
Muchas de las singulares propiedades del agua se deben a la formación de este enlace de hidrógeno

- La mayoría de los sólidos aumentan su volumen cuando se funden; el agua se expande cuando se congela
- La mayoría de sólidos son más densos que sus líquidos correspondientes; el hielo es menos denso que el agua
- El agua tiene un punto de fusión de al menos 100 °C más alto que lo esperado para la serie H₂O, H₂S, H₂Se, H₂Te. **¿Os imaginais un mundo en el que el agua congelara a -90°C?**
- El agua tiene un punto de ebullición de, al menos, 200 °C más alto que lo esperado en la serie H₂O, H₂S, H₂Se, H₂Te
- El agua tiene una mayor tensión superficial que cualquier otro líquido común (excepto el Hg)
- El agua tiene una viscosidad inusualmente grande
- El agua es un disolvente excelente
- El agua tiene una capacidad calorífica mayor que cualquier otro líquido

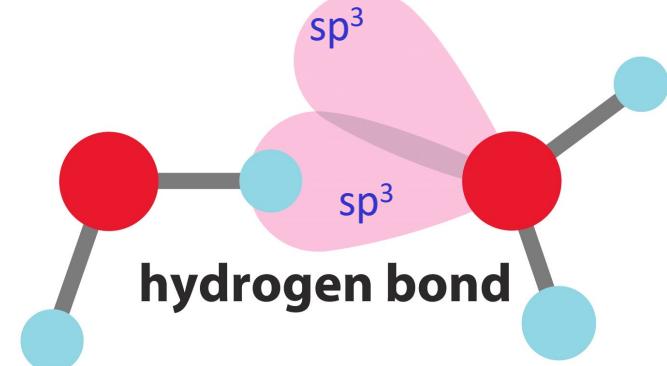


Hielo

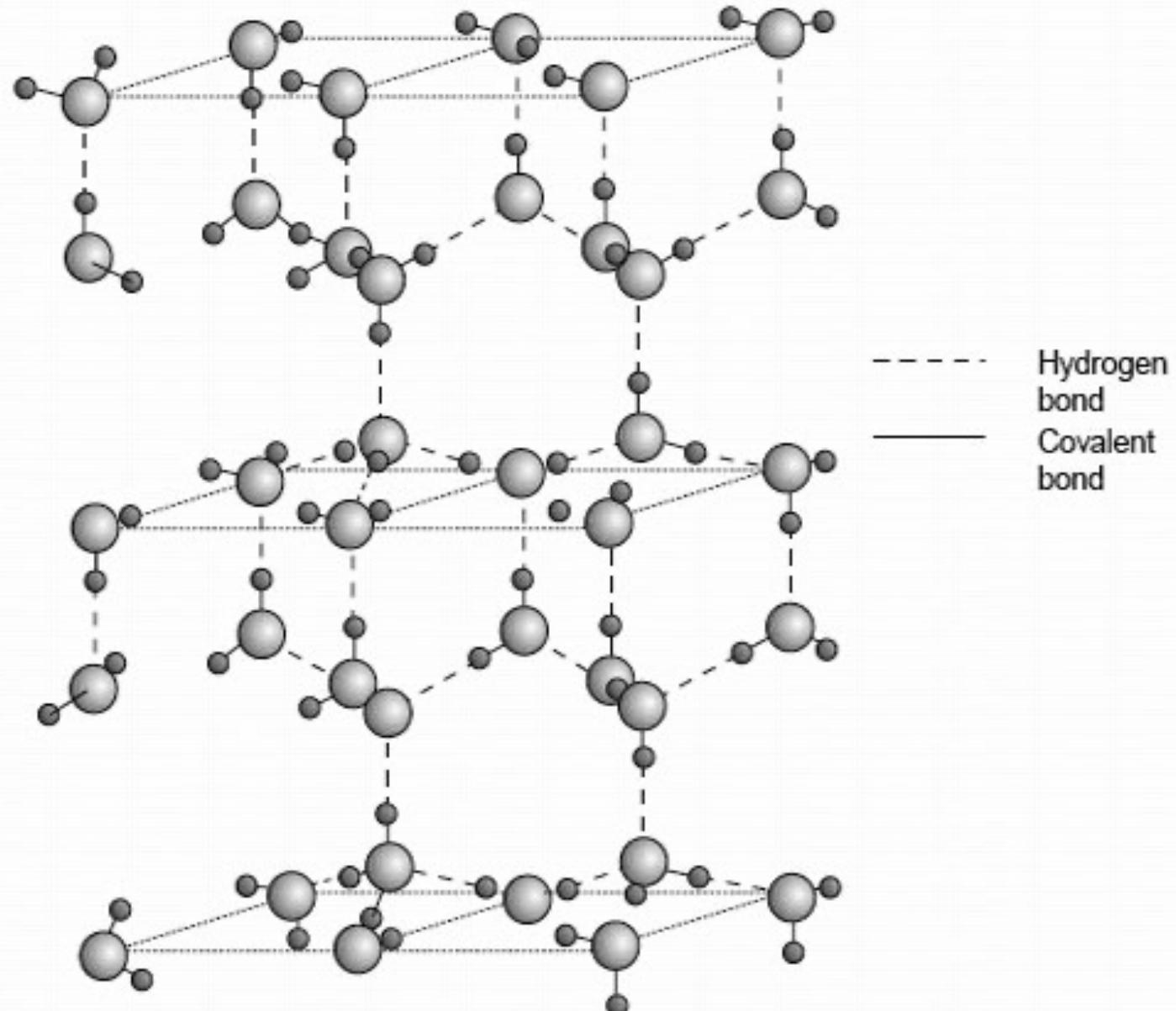
- En el hielo, cada molécula de H_2O mantiene 4 interacciones por enlace de hidrógeno con moléculas vecinas.
- Esta topología de enlaces, provoca una organización de las moléculas en redes hexagonales



(a)

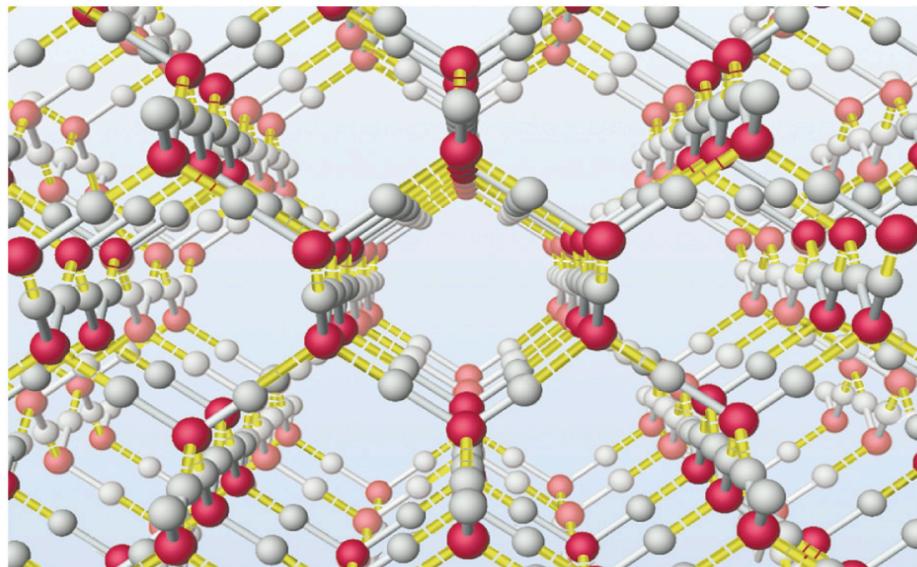


Enlace de hidrógeno en el hielo



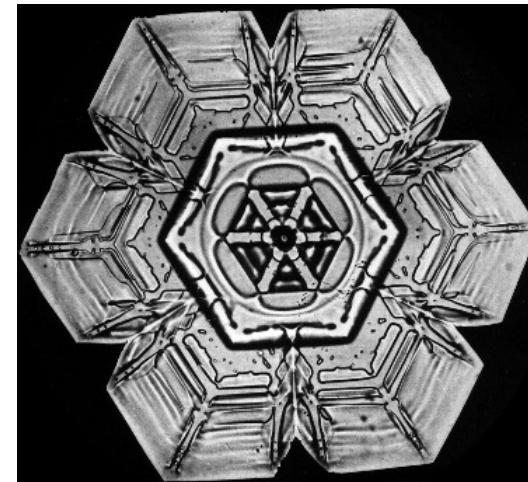
Estructura del hielo

Enlace de hidrógeno organiza las moléculas de agua de una manera hexagonal abierta



(a)

Copyright © 2005 Pearson Prentice

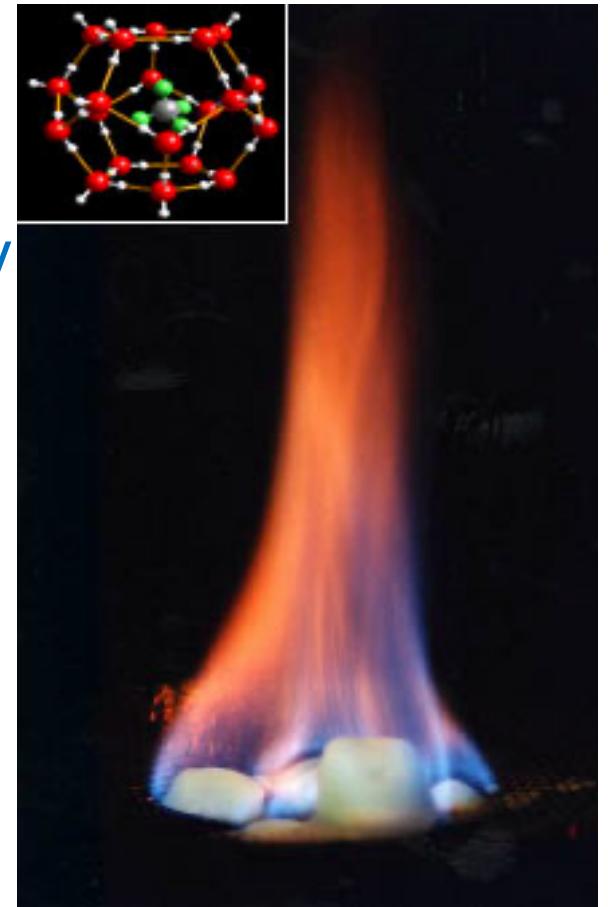


los cristales de hielo muestran esta distribución hexagonal. La distribución abierta hace que la densidad del hielo sea inferior a la del agua líquida



Metano ocluido en hielo

- Un **clatrato** (del latín *clathratus*, "rodeado o protegido, enrejado") es una sustancia química formada por una red de un determinado tipo de molécula, que atrapa y retiene otro tipo de molécula.
- Los hidratos de metano capturan ingentes cantidades de metano en hielo, que se pueden mantener estables gracias a las presiones elevadas del fondo del mar
- Su liberación accidental puede provocar alteraciones notables de la cantidad de metano en la atmósfera. Como gas de efecto invernadero supera al CO₂



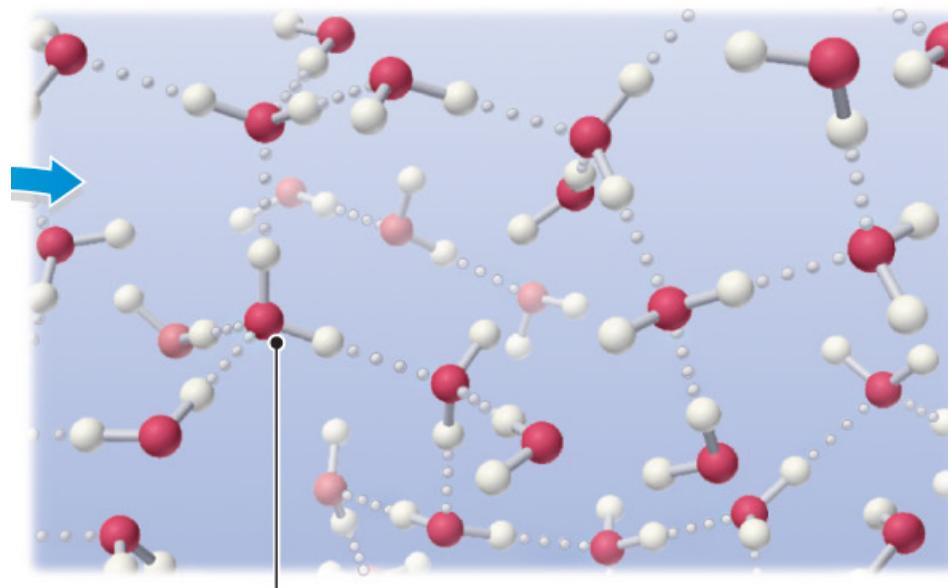
Gases de efecto invernadero

Compuesto	Concentración en la atmósfera (ppm)	Contribución(%)
<u>Vapor de agua</u> y nubes	10–50 000 ^(A)	36–72%
<u>Dióxido de carbono</u>	~400	9–26%
<u>Metano</u>	~1.8	4–9%
<u>Ozono</u>	2–8 ^(B)	3–7%

(A) El vapor de agua varía mucho localmente(B) La concentración en la estratosfera. Alrededor del 90% del ozono de la atmósfera terrestre está contenido en la estratosfera.

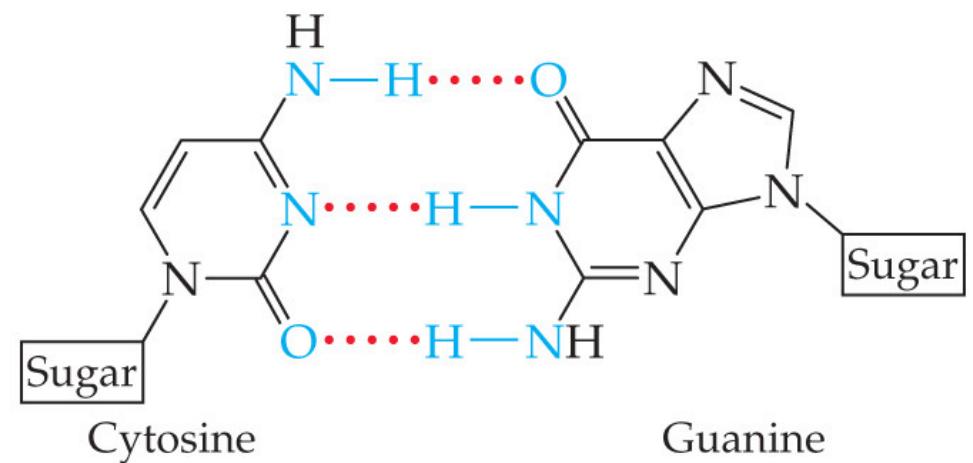
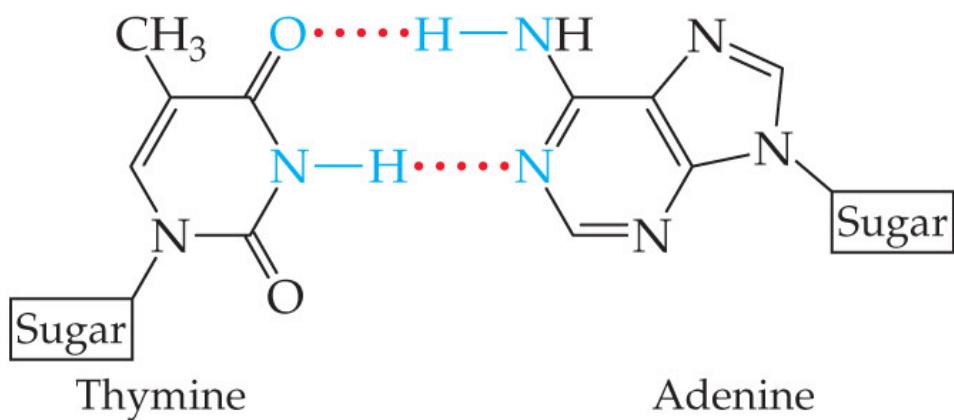
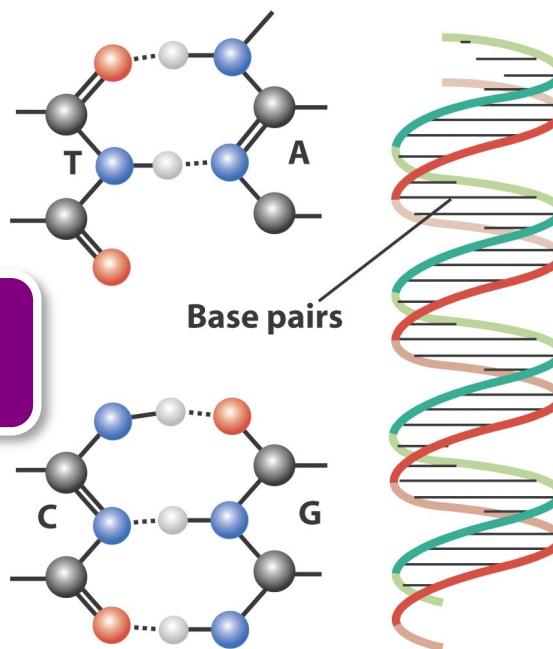
¿En el agua líquida existen enlaces de hidrógeno?

- Si
- En el agua líquida existe una vasta red de enlaces de hidrógeno que se forman y se rompen con mucha rapidez debido a la movilidad de las moléculas

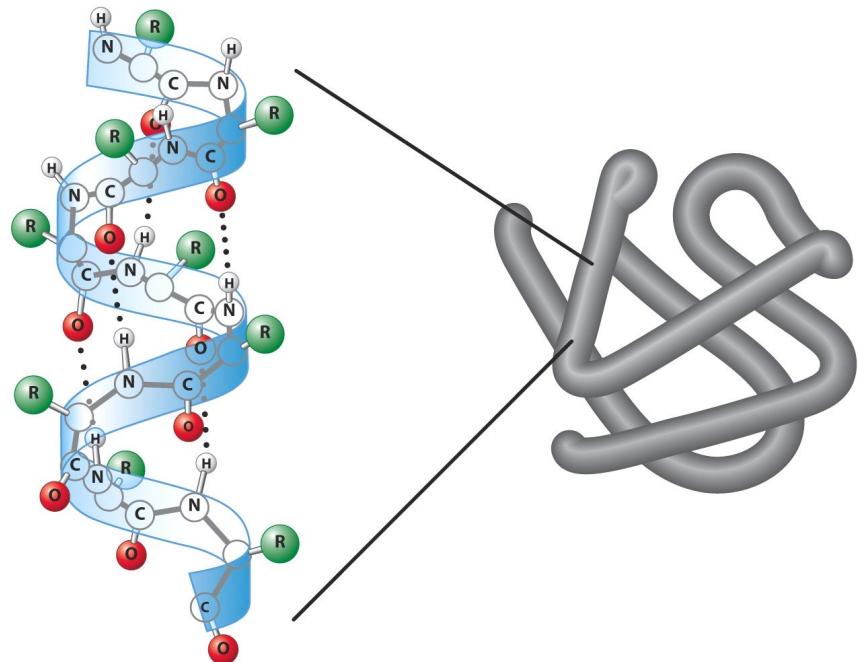


Enlace de hidrógeno en el ADN

¿Qué par de bases es más fácil de separar?

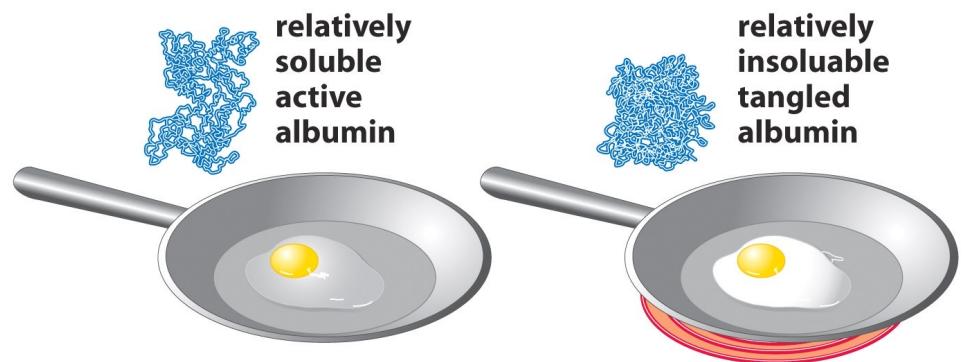


Estructura terciaria de las proteínas



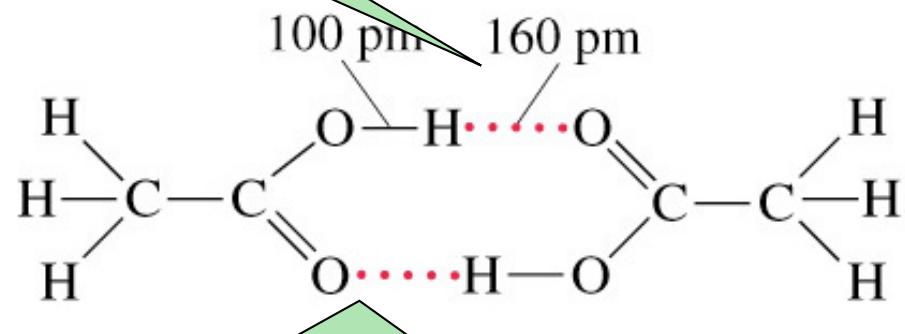
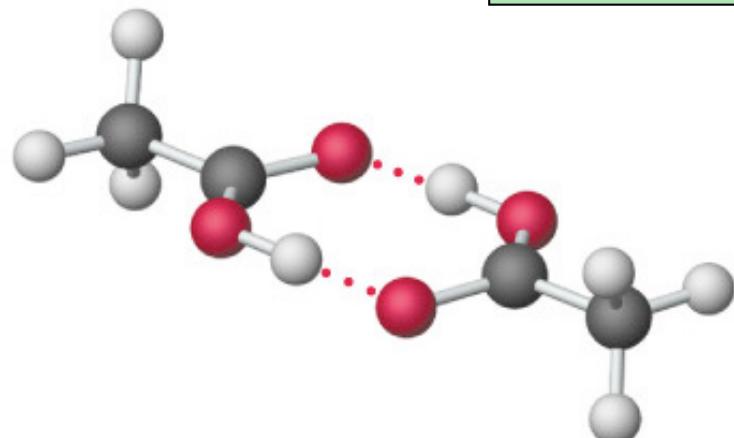
Las proteínas están plegadas (forma activa). Muchas de las interacciones que mantienen esta estructura plegada son **enlaces de hidrógeno**. Si rompemos estos enlaces, la estructura terciaria colapsa y desnaturalizamos la proteína (deja de ser activa)

las denominadas láminas- β están mantenidas por enlaces de hidrógeno



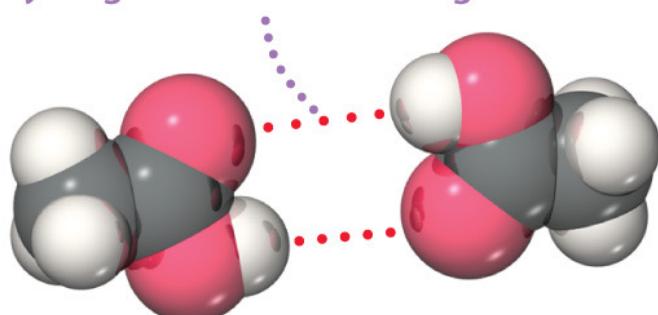
Enlace de hidrógeno en el ácido acético

Enlace de hidrógeno intermolecular.



Las moléculas se dimerizan

Each molecule can form two hydrogen bonds with a neighbor

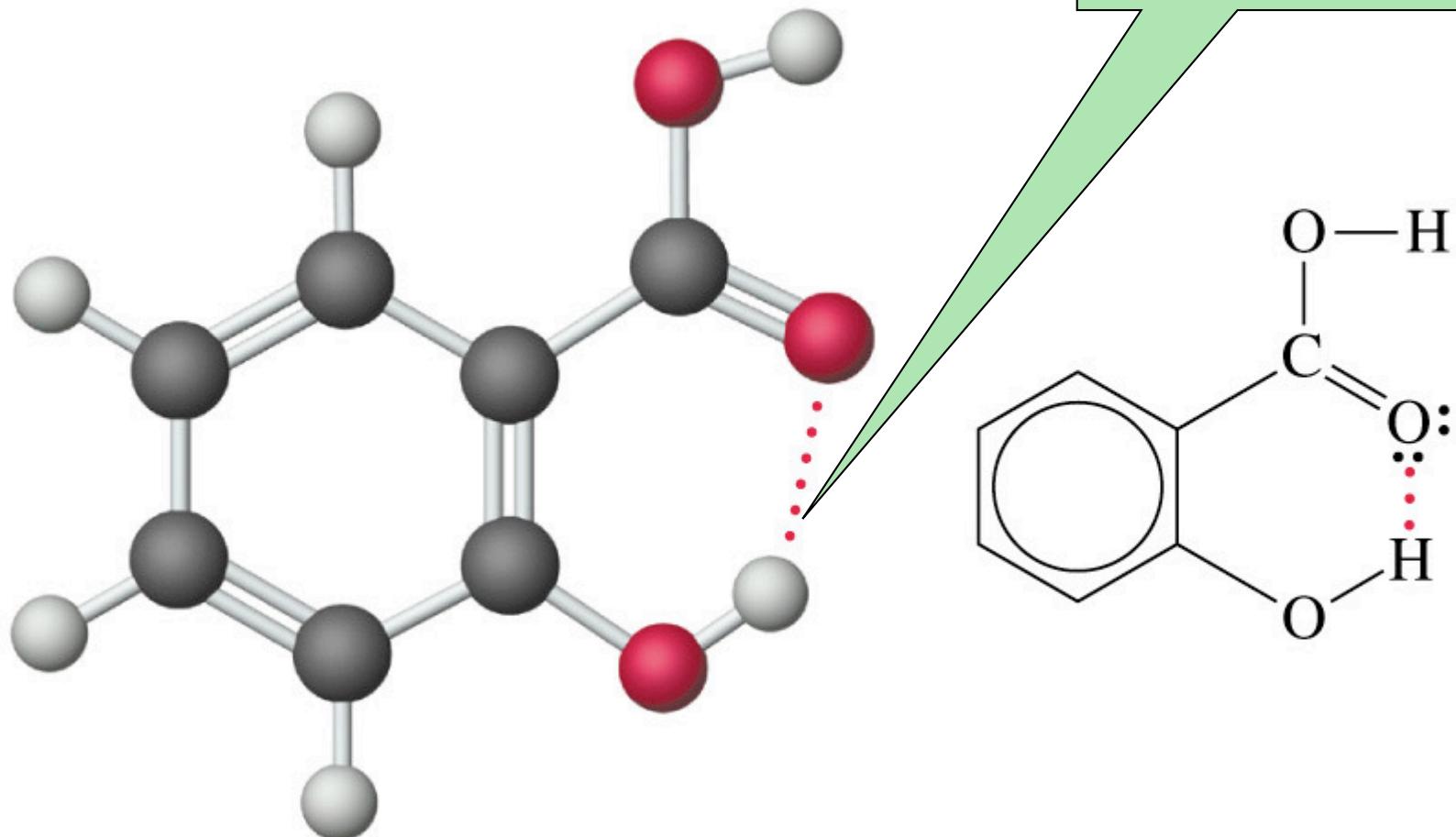


Acetic acid, CH_3COOH
MW = 60 amu
bp = 391 K

Enlace de hidrógeno intramolecular

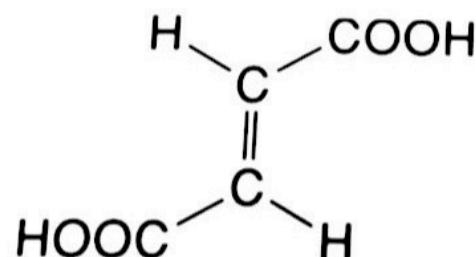
ácido salicílico

Enlace de
hidrógeno
intramolecular



Enlace de hidrógeno intramolecular

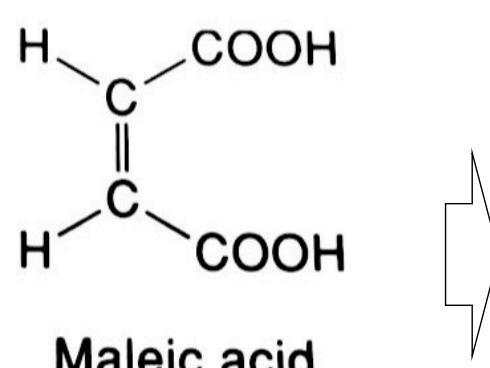
- Ácido fumárico y maleico son dos ácidos dicarboxílicos ISÓMEROS
- Fíjate en las constantes de acidez:
 - ◆ la primera es mas alta para el maleico porque las interacciones estéricas en la forma cis hacen que sea mas fácil que se libere el protón
 - ◆ Sin embargo la segunda constante para el maleico es anormalmente baja. El segundo protón es mucho mas difícil de ser liberado. ¿Por qué?
 - puede formar una interacción por enlace de hidrógeno intramolecular



Fumaric acid

$$K_1 = 9.6 \times 10^{-4}$$

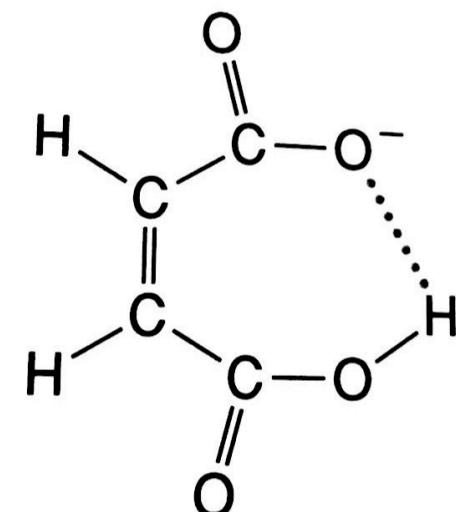
$$K_2 = 4.1 \times 10^{-5}$$



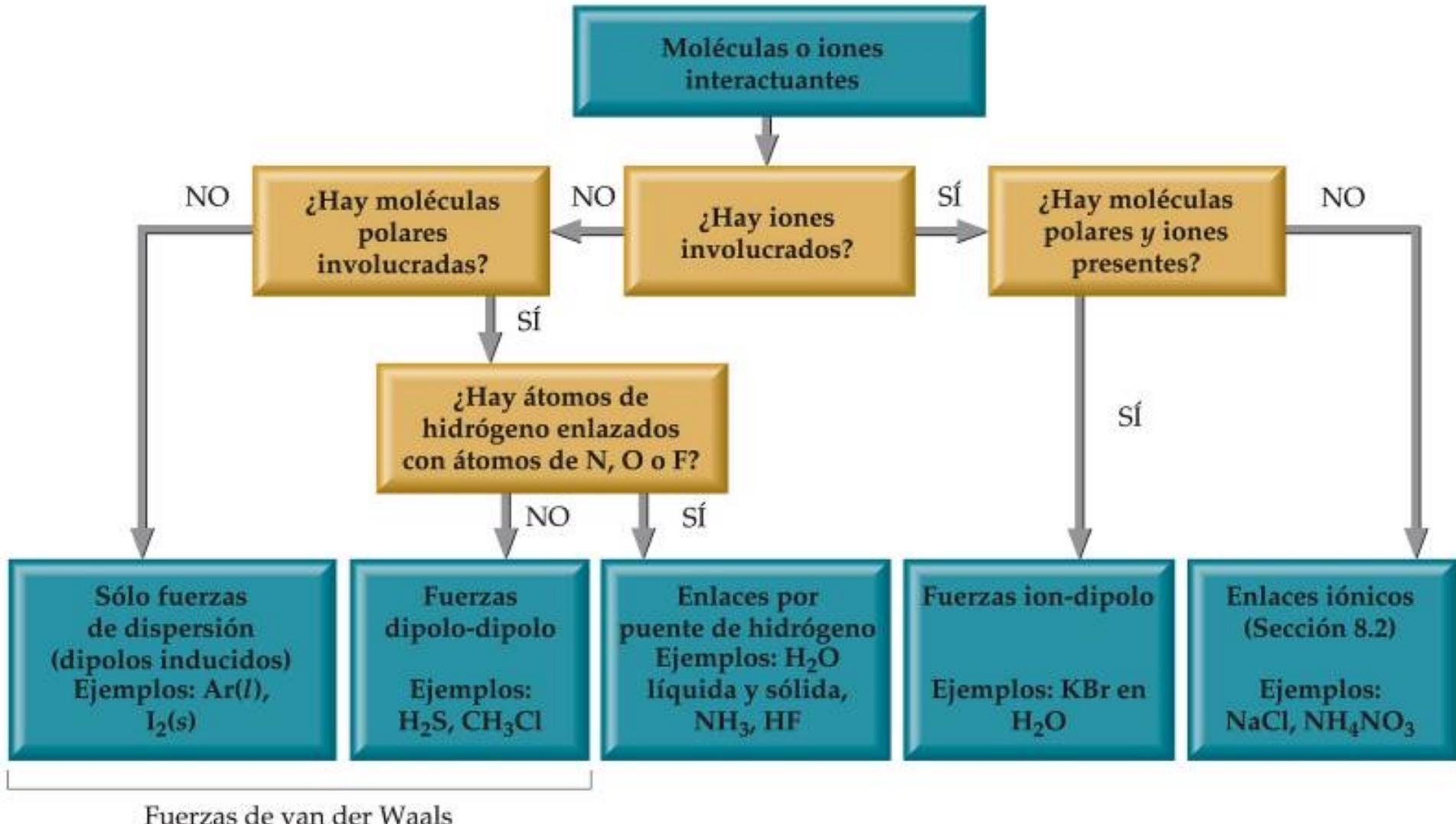
Maleic acid

$$K_1 = 1.2 \times 10^{-2}$$

$$K_2 = 6.0 \times 10^{-7}$$



Resumen de las fuerzas intermoleculares

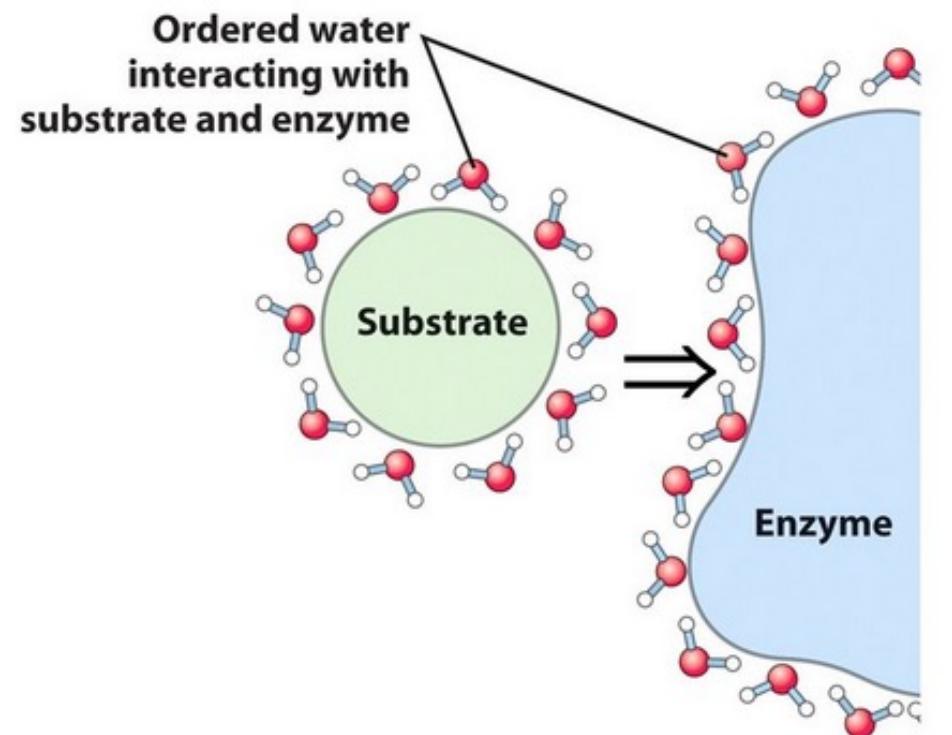
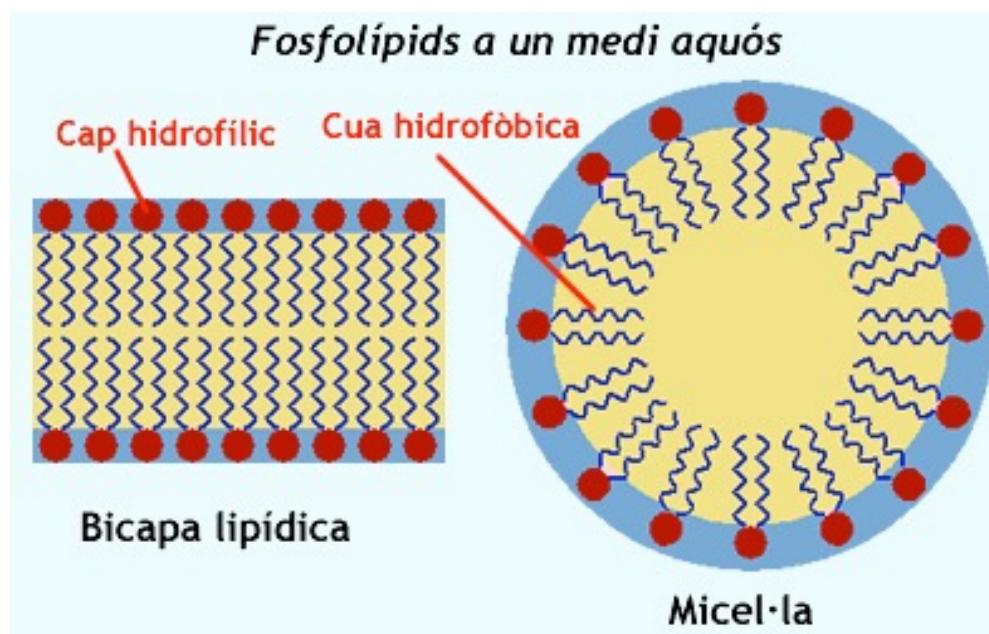


Magnitud de las interacciones

Tipo de interacción	Orden de magnitud (kJ·mol ⁻¹)
enlace covalente	200-800
ión-ión	40-400
ión-dipolo	5-60
dipolo-dipolo	0,5-15
ión-dipolo inducido	0,4-4
dipolo-dipolo inducido	0,4-4
dispersión	4-40
enlace de hidrógeno	4-40

Interacciones hidrofóbicas: el papel del agua

- El efecto hidrofóbico es la tendencia observada de las moléculas apolares a asociarse en disoluciones acuosas y de este modo minimizar las interacciones con las moléculas de agua.
- Este efecto favorece el mantenimiento de las estructuras plegadas de las proteínas, la organización de las biomembranas o la interacción enzima-sustrato



June Sutor y los enlaces de hidrógeno

- En la década de los 60 investigó la estructura cristalina de purinas y llegó a la conclusión de que la distancia entre algunos H de grupos metilo y oxígenos de otras moléculas eran anormalmente cortas
 - ◆ formuló la hipótesis de que era debido a enlace de hidrógeno C–H... O,
 - ◆ A pesar de que C e H tienen electronegatividades muy semejantes....
- Sus ideas fueron radicalmente rechazadas por la comunidad científica del momento (... era mujer en los '60)



June Sutor. Imagen: [Wikimedia Commons](#).



Letter | Published: 07 July 1962

The C–H... O Hydrogen Bond in Crystals

D. JUNE SUTOR

Nature 195, 68–69 (1962) | Download Citation ↴

Abstract

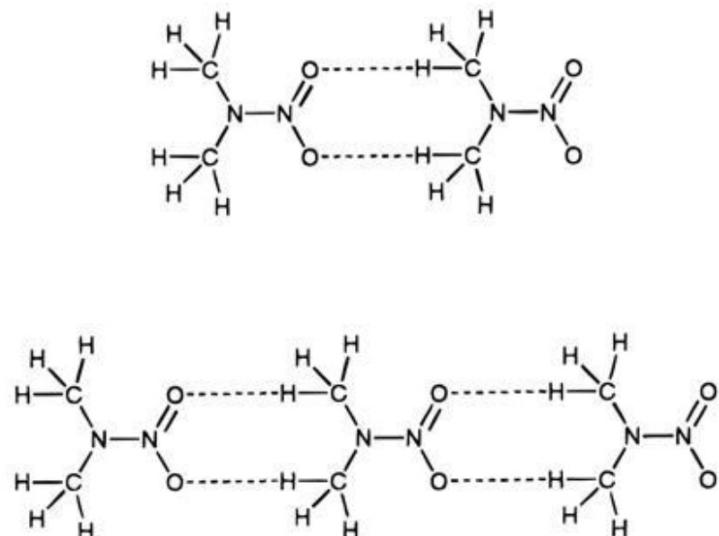
OVER the past ten years, numerous examples of 'short' intermolecular distances between a carbon atom with at least one hydrogen atom attached to it and an oxygen atom have appeared in papers on the crystal structures of organic molecules. By 'short' it is meant that the intermolecular distance is considerably less than the sum of the van der Waals radii for the atoms or groups concerned. In practically all cases, the significance of these interactions has not been noted.

FEATURES

The forgotten female crystallographer who discovered C-H···O bonds

BY ANDY EXTANCE | 8 JULY 2019

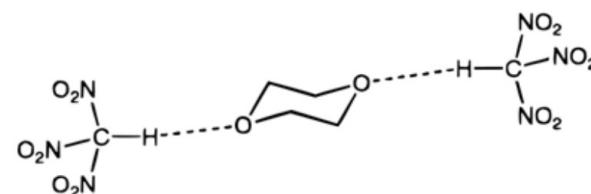
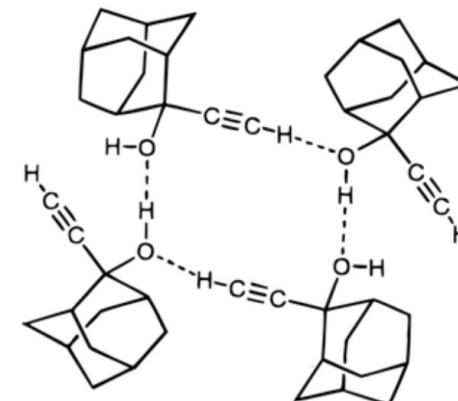
SOURCE: © SWINDLER & SWINDLER/FOLIO ART



Source: © American Chemical Society

Some example of C-H···O bonds from a review article by Gautam Desiraju (reference 8)

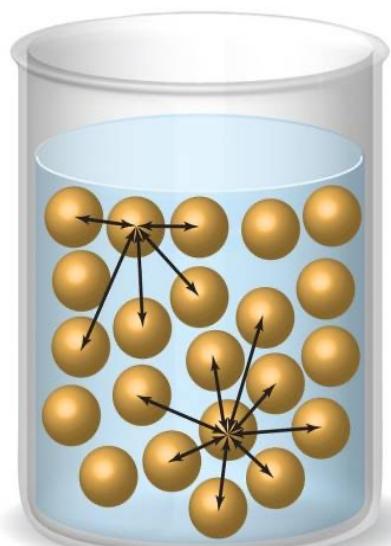
A. Extance, *The forgotten female crystallographer who discovered C-H···O bonds*, Chemistry World, 8 julio 2019



Source: © American Chemical Society

More examples from Desiraju's review article (ref 8)

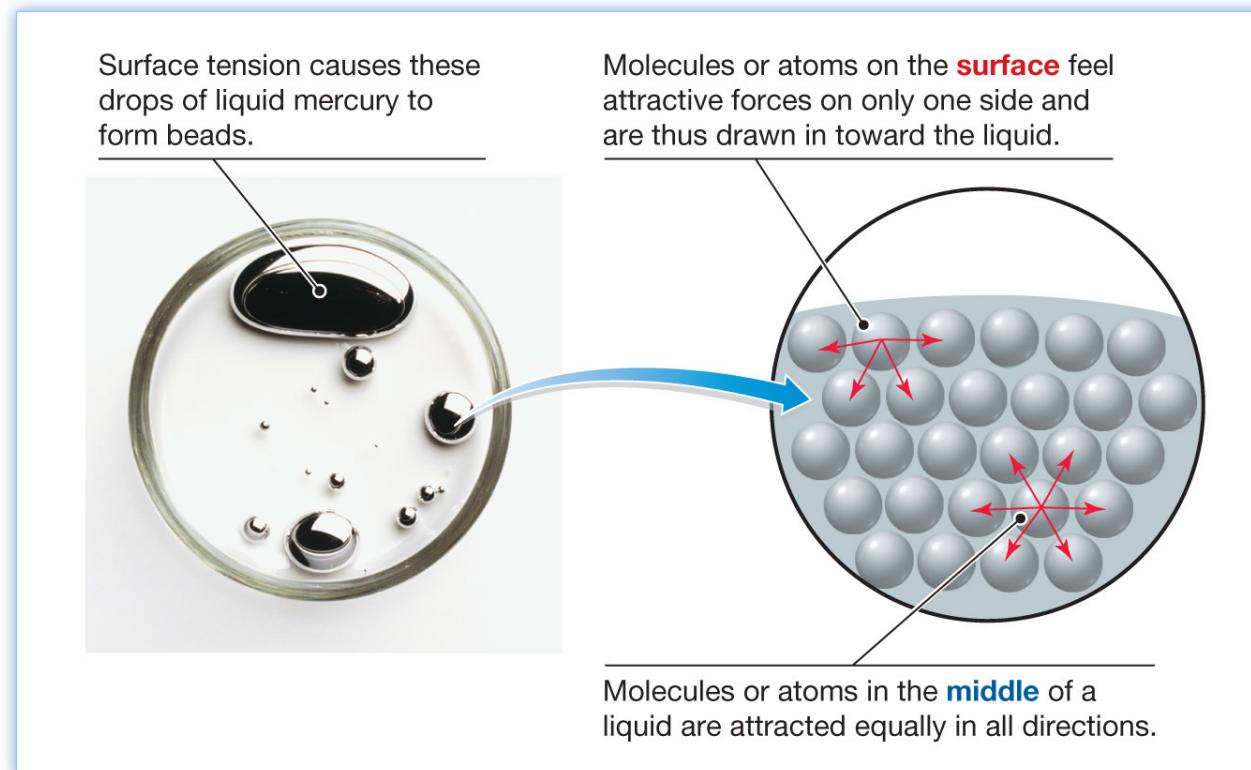
Propiedades macroscópicas de las sustancias en estado líquido



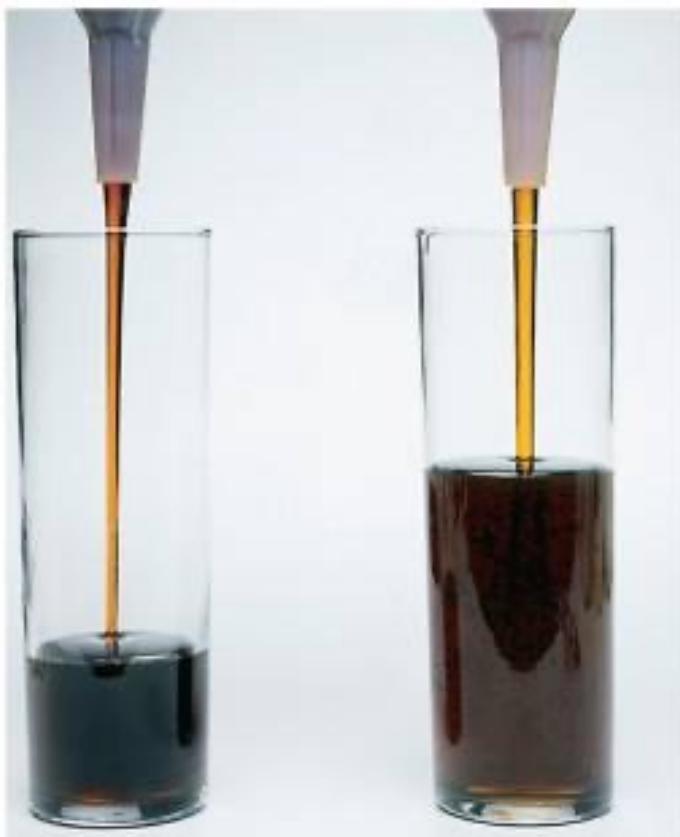
La intensidad de las atracciones intermoleculares puede afectar enormemente las propiedades de una sustancia o disolución.

Propiedades macroscópicas de los líquidos que dependen de las fuerzas intermoleculares

Viscosidad Tensión superficial



Viscosidad

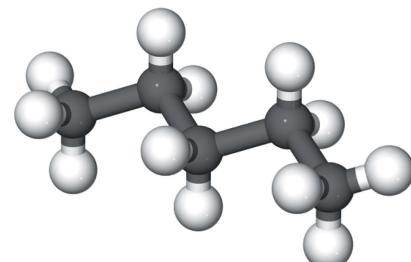


- A la resistencia de un líquido a fluir se le llama viscosidad.
- Está relacionada con la facilidad con la que las moléculas pueden moverse entre sí.
- La viscosidad aumenta conforme aumentan las fuerzas intermoleculares
- Depende de la temperatura. La viscosidad disminuye con el aumento de la temperatura. ¿Por qué?

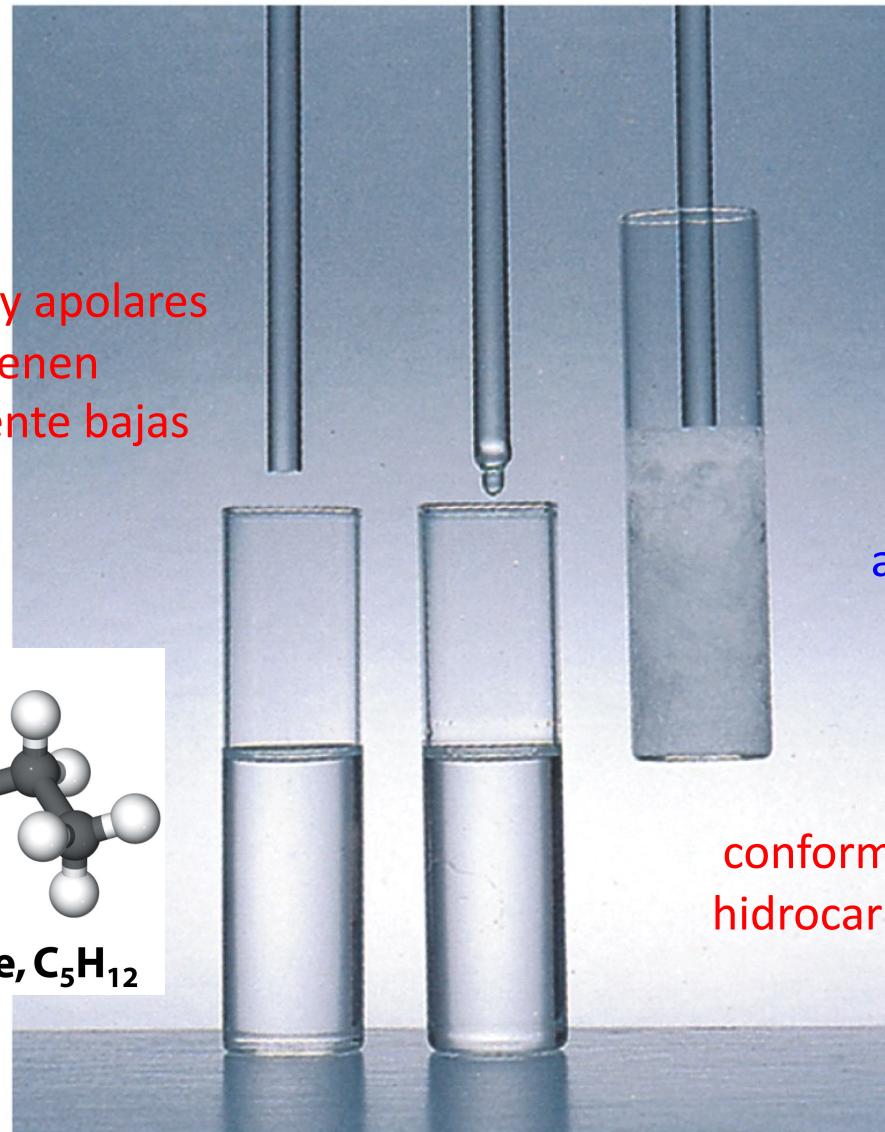
Sustancia	Fórmula	Viscosidad (kg/m-s)
Hexano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	3.26×10^{-4}
Heptano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4.09×10^{-4}
Octano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	5.42×10^{-4}
Nonano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	7.11×10^{-4}
Decano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	1.42×10^{-3}

Aumento de la viscosidad

las moléculas pequeñas y apolares
como el pentano tienen
viscosidades relativamente bajas



8 Pentane, C₅H₁₂



aumento de densidad
y viscosidad

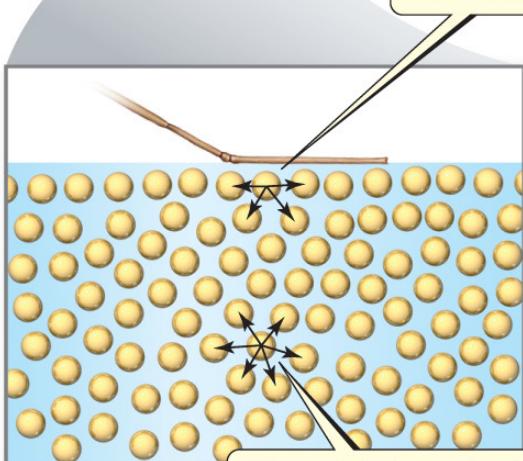
conforme aumenta el tamaño del
hidrocarburo, lo hace la viscosidad

Tensión superficial

La tensión superficial es una medida de la resistencia del líquido a aumentar su área superficial



On any surface molecule, there is no upward force to cancel the downward force, which means each surface molecule "feels" a net downward pull



On any interior molecule, each force is balanced by a force pulling in the opposite direction, which means that interior molecules "feel" no net pull in any direction

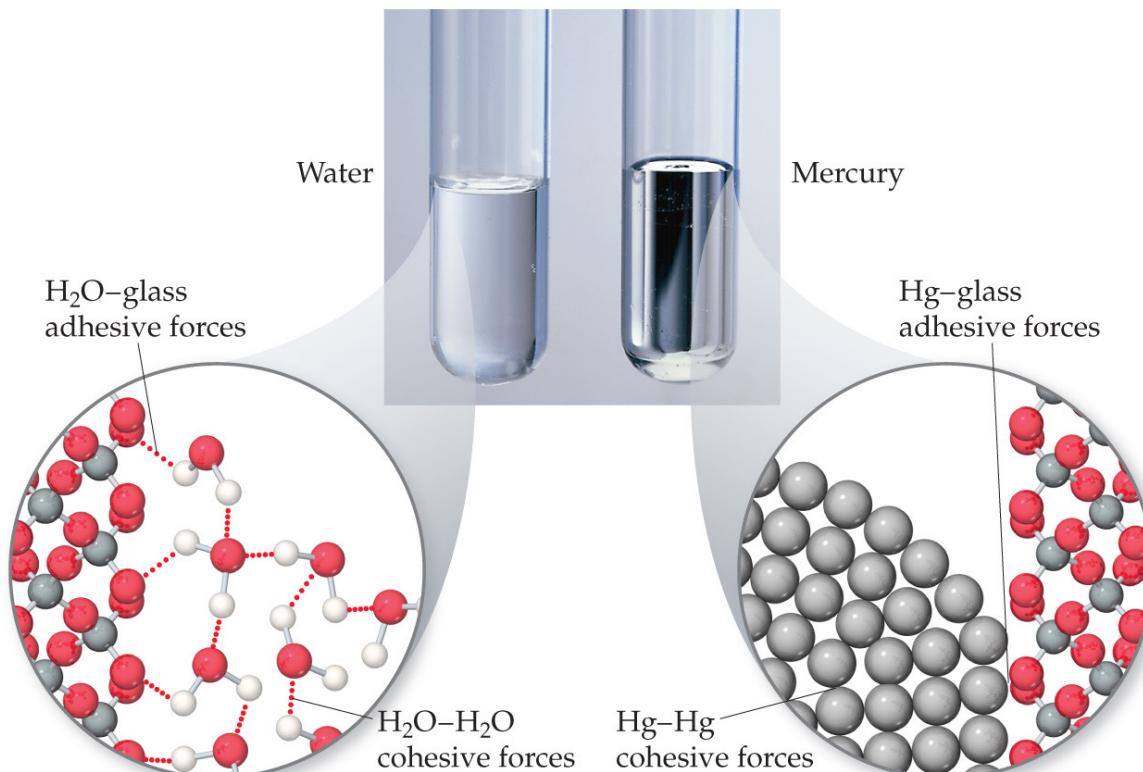
En la superficie de un líquido, hay un desequilibrio de las fuerzas intermoleculares. La Resultante es una fuerza que tira de las moléculas hacia el interior del líquido

La tensión superficial resulta de la fuerza interna neta experimentada por las moléculas en la superficie de un líquido. Fuerza a que las gotas tiendas a ser esféricas.



Tensión superficial

El agua moja las paredes del tubo de vidrio y forma un menisco cóncavo. El mercurio no moja al vidrio y lo forma convexo. La tensión superficial en el mercurio es 10 veces mayor que en el agua. Es el resultado de un enlace metálico



Because adhesive > cohesive,
H₂O molecules touching glass
adhere to the wall more than
to each other, forming
concave surface

Because cohesive > adhesive,
Hg molecules touching glass
adhere to the wall less than
to each other, forming
convex surface

Las moléculas de agua
presentan unas
fuerzas de adhesión
con el vidrio de
mayor intensidad que
las fuerzas de
cohesión internas. En
el mercurio sucede lo
contrario

Tensión superficial agua:
 $7,29 \cdot 10^{-2} \text{ J/m}^2$
Tensión superficial agua:
 $4,6 \cdot 10^{-1} \text{ J/m}^2$

Propiedades de algunos líquidos

Nombre	formula	viscosidad (N·s/m ²)	tensión superficial (J/m ²)
Pentano	C ₅ H ₁₂	2,4·10 ⁻⁴	1,61·10 ⁻²
Benceno	C ₆ H ₆	6,5·10 ⁻⁴	2,89·10 ⁻²
Agua	H ₂ O	1,00·10 ⁻³	7,29·10 ⁻²
Etanol	C ₃ H ₅ OH	1,20·10 ⁻³	2,23·10 ⁻²
Mercurio	Hg	1,55·10 ⁻³	4,6·10 ⁻¹
Glicerol	C ₃ H ₅ (OH) ₃	1,49	6,34·10 ⁻²