



Química

FUERZAS DE ATRACCIÓN ENTRE PARTÍCULAS Y PROPIEDADES FÍSICAS DE LAS SUSTANCIAS

La disposición tridimensional de los átomos en una molécula se denomina geometría molecular (GM), si se trata de un ion, su disposición tridimensional se denomina geometría del ion (GI).

El estado de agregación en el que se presenta una sustancia a determinada temperatura y a determinada presión, y algunas propiedades físicas dependen de la intensidad de las fuerzas de atracción entre las partículas que la forman.

Dicha intensidad depende del tipo de partículas (iones o moléculas) que constituyen a las sustancias y de las fuerzas de atracción que actúan entre éstas.

Para identificar el tipo de fuerza de atracción presente en una sustancia molecular, es necesario conocer la geometría y la polaridad de las moléculas que la forman.

La geometría de las moléculas se puede predecir con bastante aproximación a partir del número de electrones que rodean al átomo central de una molécula, según su estructura de Lewis.

La disposición espacial que adoptan los electrones externos (compartidos y libres) alrededor del átomo central, se denomina geometría electrónica (GE). Los pares de electrones se ubican de manera de minimizar las repulsiones entre ellos. El número de pares de electrones alrededor del átomo central determina el tipo de geometría electrónica.

- Si hay dos pares de electrones alrededor del átomo central, la geometría electrónica es *lineal*.
- Si hay tres pares de electrones alrededor del átomo central, la geometría electrónica es *plana triangular*.
- Si hay cuatro pares de electrones alrededor del átomo central, la geometría electrónica es *tetraédrica*.

Teoría de repulsión de los pares electrónicos de valencia (TRePEV)

La teoría de repulsión de los pares electrónicos de valencia, permite predecir las geometrías y los ángulos de enlace de las moléculas y los iones poliatómicos.

Los postulados de esta teoría son los siguientes:

- Los pares de electrones libres se repelen con mayor intensidad que los pares compartidos.
- Los enlaces coordinados o dativos, dobles y triples se consideran equivalentes al de un enlace simple.

Geometría molecular

Para explicar las posibles geometrías, se consideran moléculas formadas por un átomo central A, rodeado por átomos de otro elemento, como por ejemplo: AB_2 , AB_3 y AB_4 .

Moléculas sin pares electrónicos libres rodeando al átomo central **AB_2 : dióxido de carbono, CO_2**

La estructura de Lewis de la molécula es:



Química

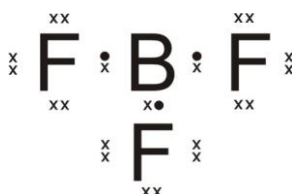
Debido a que los pares electrónicos se repelen entre sí, se ubican lo más alejados posible uno de otro, o sea, en los extremos opuestos, **la geometría electrónica (GE) es lineal**. Por lo tanto, los átomos se ubican siguiendo un ángulo que se establece entre éstos (O-C-O) de 180° y **la molécula presenta geometría lineal**.



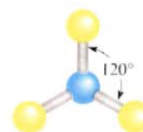
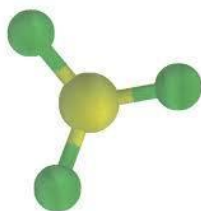
Modelo de esferas de la molécula de CO_2

AB_3 : trifluoruro de boro BF_3

La estructura de Lewis de la molécula es:



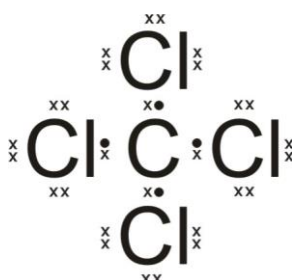
El trifluoruro de boro presenta tres uniones covalentes simples, formándose un triángulo equilátero, con el átomo de boro en el centro de la molécula. El triángulo queda determinado uniendo con segmentos los átomos de flúor. Tanto **la geometría electrónica** como la **geometría molecular** serán entonces **plana triangular**. Los cuatro átomos se encuentran en el mismo plano y el ángulo que se establece entre el átomo de boro y dos de los átomos de flúor es de 120° .



Modelos que representan la geometría plana triangular:

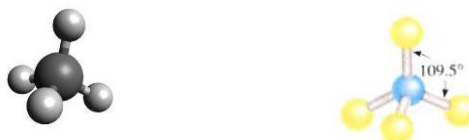
AB_4 : tetracloruro de carbono CCl_4

La estructura de Lewis de la molécula es:



Química

Hay cuatro pares de electrones formando uniones covalentes alrededor del átomo de carbono, C. La **geometría electrónica** del CCl_4 es **tetraédrica**. En este tipo de moléculas, el átomo central se ubica en el centro de un tetraedro y los otros átomos están en los vértices del mismo, siendo la **geometría de la molécula** también **tetraédrica**. Los ángulos de enlace entre el átomo central y dos de los átomos adyacentes, en un tetraedro regular son de $109,5^\circ$.



Modelos que representan la geometría tetraédrica:

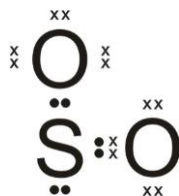
Moléculas con pares electrónicos libres rodeando al átomo central

Un par de electrones libres experimenta mayor repulsión que los pares enlazantes por lo tanto modifican el ángulo de enlace haciéndolo menor que lo que predice la teoría (TRePEV), con lo cual la geometría electrónica y la geometría molecular, son diferentes.

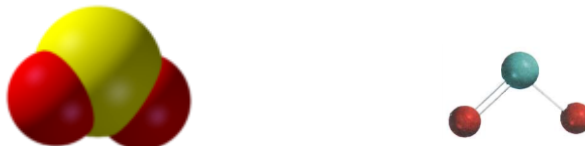
Para explicar las posibles geometrías, se considera el átomo central A, rodeado por átomos de otro elemento. A continuación se analizan las moléculas de fórmula general: AB_2 y AB_3 .

AB_2 : dióxido de azufre SO_2

La estructura de Lewis de la molécula es:



Debido a que los pares de electrones que forman enlaces y los electrones libres se consideran como zonas de alta densidad electrónica, en la molécula de SO_2 se cuentan tres zonas de alta densidad electrónica que rodean al átomo de S (átomo central), dos pares formando enlaces y un par libre. La **geometría electrónica** es **plana triangular**. Pero, debido a que la repulsión del par electrónico libre es mayor que la repulsión de los otros pares de electrones, Los enlaces azufre-oxígeno se acercan ligeramente y el ángulo de enlace O-S-O es menor a 120° . Por lo tanto, la **geometría molecular** es **angular**.

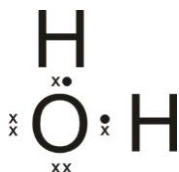


Modelos que representan la geometría angular.

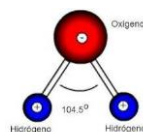
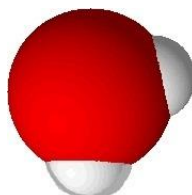
AB_2 : agua H_2O

La estructura de Lewis de la molécula de agua es:

Química



En la molécula de agua el átomo central, oxígeno, presenta cuatro pares de electrones, dos pares compartidos y dos pares libres, o sea cuatro zonas de alta densidad electrónica. La distribución de los cuatro pares de electrones es tetraédrica, siendo así la **geometría electrónica tetraédrica**. Debido a que, los dos pares de electrones libres que rodean al oxígeno se repelen con mayor intensidad el ángulo de enlace es menor a $109,5^\circ$. La **geometría de la molécula** de agua es **angular**.



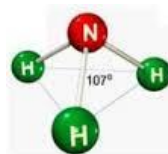
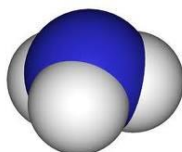
Modelos que representan la geometría angular.

AB₃: amoníaco NH₃

La estructura de Lewis de la molécula es:



En la molécula de amoníaco el átomo central, nitrógeno, presenta cuatro pares de electrones, tres pares compartidos y un par libre. La distribución para cuatro pares de electrones alrededor de un átomo central es **tetraédrica (GE)**. La presencia de un par de electrones libres, determina que el ángulo formado entre el átomo central y dos de los átomos adyacentes es menor al ángulo del tetraedro regular o sea, el ángulo es menor a $109,5^\circ$. La **geometría de la molécula** es **piramidal** con base triangular, (el átomo de N se encuentra en el extremo superior de la pirámide).



Modelos que representan la geometría piramidal.



Química

Moléculas formadas por un átomo central unido a átomos diferentes.

La teoría de repulsión de pares de electrones de valencia, permite predecir la geometría de moléculas formadas por un átomo central A unido a átomos de distintos elementos. El análisis es análogo al realizado en los ejemplos anteriores.

Por ejemplo, la molécula de ácido cianhídrico, HCN.

La estructura de Lewis es:






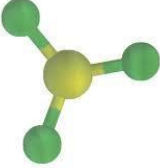
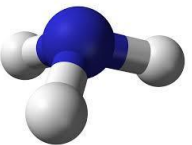

El átomo central, carbono, posee 2 zonas de alta densidad electrónica por lo que la geometría electrónica es lineal. Como no hay pares de electrones sin compartir en el átomo central, la geometría molecular es lineal.

A partir de los ejemplos analizados es posible concluir que:

- en las moléculas que no presentan pares de electrones libres rodeando al átomo central, la geometría electrónica es igual a la geometría molecular.
- en las moléculas que presentan pares electrónicos libres rodeando al átomo central, la geometría electrónica es distinta a la geometría molecular.

Química

Tabla 1. Geometría de moléculas sencillas del tipo AB_x .

Tipo de molécula	Pares de electrones que rodean al átomo central	Número de enlaces	Pares de electrones libres	Geometría
AB_2	2	2	0	Lineal 
AB_2	3	2	1	Angular 
AB_2	4	2	2	Angular 
AB_3	3	3	0	Plana triangular 
AB_3	4	3	1	Piramidal con base triangular 
AB_4	4	4	0	Tetraédrica 

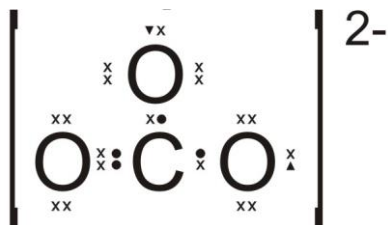
Geometría de iones

Como se mencionó anteriormente, la disposición tridimensional de los átomos en un ion poliatómico, se denomina geometría del ion. La teoría de repulsión de pares de electrones de valencia, permite predecir la geometría de los iones. El análisis es análogo al realizado para las moléculas AB_x .

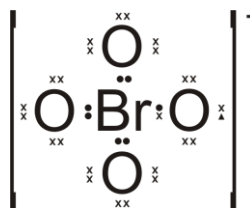
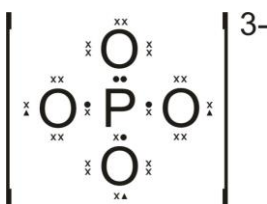
Química

Ejemplos:

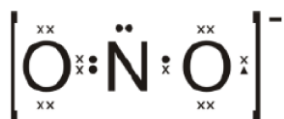
El anión carbonato es un ejemplo de un ion con geometría plana triangular. Su estructura de Lewis es



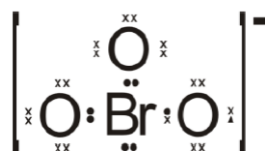
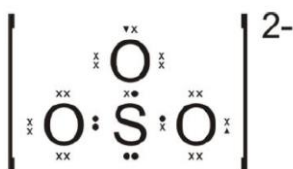
El catión amonio (NH_4^+) y los aniones ortofosfato (PO_4^{3-}) y perbromato (BrO_4^-) presentan geometría tetraédrica. Las estructuras de Lewis son:



El anión nitrito (NO_2^-) y el anión yodito (IO_2^-) son ejemplos de iones con geometría angular. Sus estructuras de Lewis son:



El anión sulfito (SO_3^{2-}) y el anión bromato (BrO_3^-) poseen geometría piramidal. Sus estructuras de Lewis son:



Química

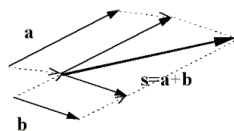
Polaridad de las moléculas

Como ya mencionamos en la unidad 2, el momento dipolar (μ) cuantifica la polaridad de un enlace y de las moléculas.

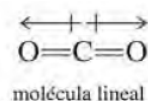
Las moléculas diatómicas formadas por átomos de elementos diferentes (ej. HF, HCl, NO) tienen un momento dipolar distinto de cero, $\mu \neq 0$ D y por lo tanto son moléculas polares. En cambio las moléculas diatómicas formadas por átomos del mismo elemento, (ej. Cl_2 , O_2 , H_2) presentan un momento dipolar nulo, $\mu = 0$ D por lo tanto son moléculas no polares.

Para determinar el momento dipolar en una molécula formada por tres o más átomos, se considera la polaridad de los enlaces y la geometría de la molécula. El momento dipolar de la molécula o momento dipolar total (μ_T) es la suma de los vectores que representan los momentos dipolares de cada uno de los enlaces.

Una forma de determinar la polaridad de una molécula es aplicar la regla del paralelogramo para realizar la suma vectorial de los momentos dipolares. La resultante o momento dipolar total obtenido permitirá predecir si dicho momento dipolar total será igual a cero (molécula no polar) o diferente de cero (molécula polar).



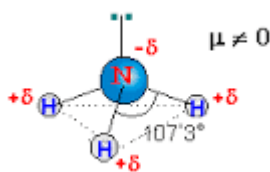
El dióxido de carbono CO_2 , por ejemplo, es una molécula triatómica, de geometría molecular lineal. El momento dipolar total de la molécula es la resultante de la suma vectorial de los momentos dipolares de los enlaces, $\text{C}=\text{O}$. Como ambos momentos dipolares de enlace poseen igual magnitud, igual dirección y sentido opuesto, la suma o momento dipolar total es 0 D. La molécula es no polar.



molécula lineal

$$\mu = 0 \text{ D}$$

La geometría de la molécula de NH_3 es piramidal. El átomo de N es más electronegativo que el átomo de H, por eso la densidad de la nube electrónica está desplazada hacia el primero. Como los momentos dipolares N-H no se anulan, la resultante de la sumatoria de los momentos dipolares es distinta de cero. Además que el átomo central (N) tiene un par de electrones libre, que afecta su polaridad. Por lo tanto la molécula es polar.



Es importante remarcar que los iones **no presentan momento dipolar**, ya que tienen una carga eléctrica neta, los cationes poseen carga eléctrica positiva y los aniones carga eléctrica negativa.



Química

Interacciones entre partículas y propiedades de las sustancias

Las sustancias iónicas, moleculares y metálicas poseen diferencias en sus propiedades físicas generales debido a que sus enlaces son de distinta naturaleza.

En los compuestos moleculares se pueden clasificar las fuerzas de atracción en dos clases, una es la que mantiene unidos a los átomos de una molécula, que son las fuerzas intramoleculares (unión covalente); y la otra es la que mantiene unidas a las moléculas entre sí, que son las fuerzas intermoleculares.

Las fuerzas intermoleculares son más débiles que las presentes entre los aniones y cationes de los compuestos iónicos, cationes y electrones presentes en metales o que las fuerzas intramoleculares, debido a esto, las sustancias moleculares poseen bajos puntos de fusión y ebullición.

Muchos de los compuestos moleculares son insolubles o poco solubles en agua, las sustancias polares son solubles o parcialmente solubles dependiendo de su polaridad y sus disoluciones acuosas no conducen la corriente eléctrica, (no son electrolitos), salvo en el caso particular de que puedan ionizarse (por ejemplo los ácidos). Los compuestos moleculares no conducen la corriente eléctrica.

Las sustancias iónicas, son sólidos cristalinos. La fuerza de atracción presente es del tipo electrostático entre iones (cationes y aniones) de elevada intensidad, por eso los compuestos iónicos son sólidos a temperatura ambiente y poseen elevados punto de fusión.

La mayoría de los compuestos iónicos son solubles en solventes muy polares, por ejemplo el agua, se denominan electrolitos ya que sus disoluciones acuosas conducen la corriente eléctrica. Los compuestos iónicos fundidos también pueden conducir la electricidad, ya que los cationes y aniones se mueven libremente. Son duros y quebradizos.

Las *fuerzas de atracción entre las partículas* son responsables de ciertas propiedades macroscópicas de la materia, como por ejemplo, el punto de fusión y de ebullición, el estado de agregación a cierta temperatura y presión. En general, los puntos de ebullición y fusión de las sustancias se relacionan con la intensidad y tipo de fuerzas presentes.

Fuerzas intermoleculares

En una sustancia, las moléculas se atraen por fuerzas intermoleculares. Las mismas permiten que las moléculas se unan entre sí por atracción electrostática entre los polos de carga opuesta.

Entre las fuerzas intermoleculares se encuentran las fuerzas dipolo-dipolo o dipolo permanente, las fuerzas de London o de dispersión, y las interacciones puente de hidrógeno.

Las fuerzas dipolo-dipolo son las fuerzas de atracción entre moléculas polares. A mayor momento dipolar total, mayor es la intensidad de este tipo de fuerza. Las moléculas se atraen por los extremos de densidad de carga opuesta de los dipolos siendo de origen electrostático

La fuerza de dispersión o de London se produce por la formación de dipolos instantáneos, llamados así porque duran una pequeña fracción de segundo. Estos dipolos se generan cuando los electrones se mueven a cierta distancia del núcleo con lo cual no son atraídos fuertemente por

Química

el núcleo y la nube electrónica se vuelve más difusa. La posición específica de los electrones hace que aparezca una densidad negativa en un determinado instante y luego cuando los electrones cambian de posición se genera otra zona de densidad negativa. De este modo, se induce un dipolo en un átomo vecino y así sucesivamente en los átomos vecinos.

La intensidad de las fuerzas de London se relaciona con el número de electrones que presenta un átomo o una molécula. La intensidad de estas fuerzas aumenta con la masa molar, debido a que las moléculas de mayor masa molar tienen más electrones.

Las moléculas no polares y los gases nobles, sólo presentan este tipo de fuerza, sin embargo está presente también entre moléculas polares.

Las interacciones de hidrógeno o puente de hidrógeno, son un tipo de atracción intermolecular de tipo dipolo-dipolo particularmente fuerte. Esta interacción se da entre el átomo de hidrógeno unido a un átomo de elevado valor de electronegatividad (N, O y F) de una molécula y el par electrónico sin compartir de un átomo electronegativo (N, O, y F) de otra molécula. Los enlaces puente de hidrógeno se representan generalmente con línea de puntos.

