

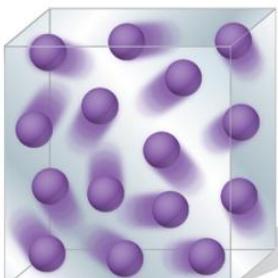
Tema 4. LÍQUIDOS, SÓLIDOS Y GASES

FUERZAS INTERMOLECULARES

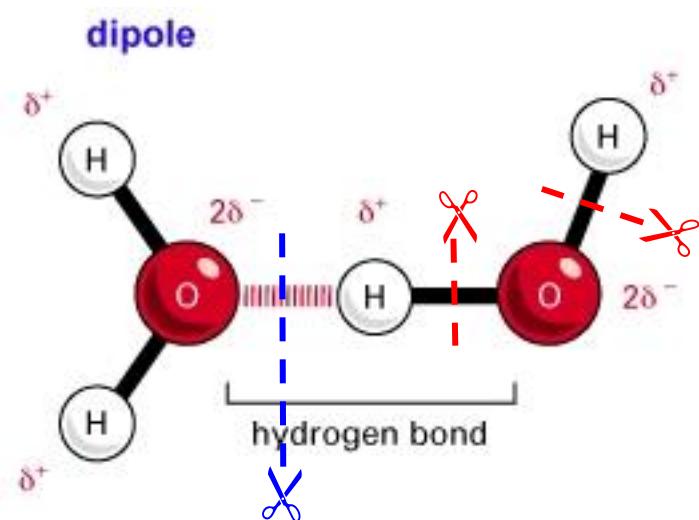
El estado de agregación de una sustancia a temperatura y presión determinada, depende de dos entidades antagonistas:

- Energía cinética de las partículas
- Fuerza de atracción entre partículas

Estados de la materia

		Al bajar la temperatura la energía térmica disminuye. Si las interacciones entre partículas son más fuertes que la energía térmica, la materia condensa, pudiendo llegar a solidificar.	
			
Gas	Liquid	Crystalline solid	
Total disorder; much empty space; particles have complete freedom of motion; particles far apart	Disorder; particles or clusters of particles are free to move relative to each other; particles close together	Ordered arrangement; particles are essentially in fixed positions; particles close together	
Cool or compress ↔ Heat or reduce pressure	Cool ↔ Heat		
Assumes both the volume and shape of its container Is compressible Flows readily Diffusion within a gas occurs rapidly	Liquid	Solid	Assumes the shape of the portion of the container it occupies Does not expand to fill container Is virtually incompressible Flows readily Diffusion within a liquid occurs slowly Retains its own shape and volume Is virtually incompressible Does not flow Diffusion within a solid occurs extremely slowly

Fuerzas intramoleculares ⇔ estabilidad de la molécula



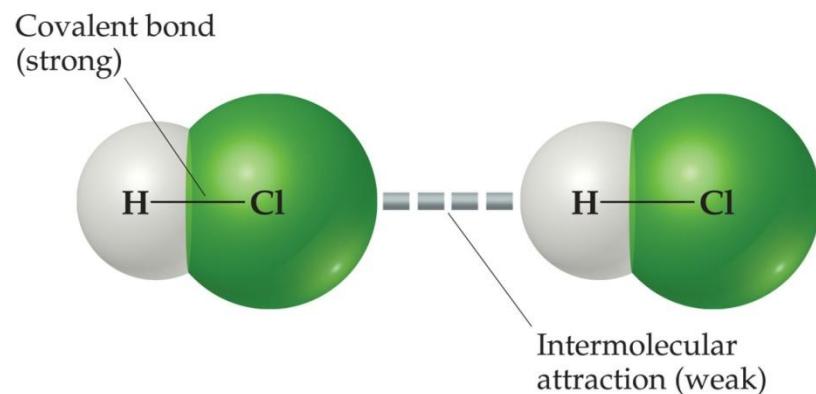
requiere $980 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
 $E_{\text{enlace}} (\text{O-H})$

Fuerzas:
Intramolecular > Intermolecular

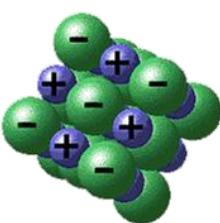
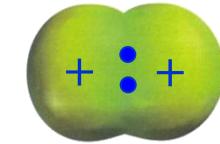
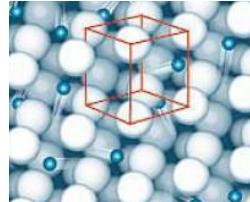
requiere ca. $40 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Entalpía de vaporización, ΔH_v

Fuerzas intermolecular ⇔ propiedades de sólidos y líquidos
(ejemplo: p.f., p. eb. ...)



Comparemos fuerzas de enlace...

Fuerza	Modelo	Atracción	Energía	Ejemplo
Iónico		Catión – anión	400–4000 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	NaCl
Covalente		Núcleos compartiendo par de e^-	150–1100 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	H–H
Metálico		Electrones deslocalizados	75–1000 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	Fe

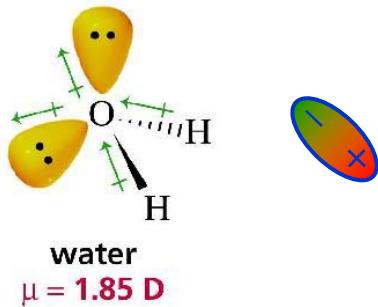
... y de no enlace (Van der Waals): max. $40 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

1. Fuerzas ion – dipolo

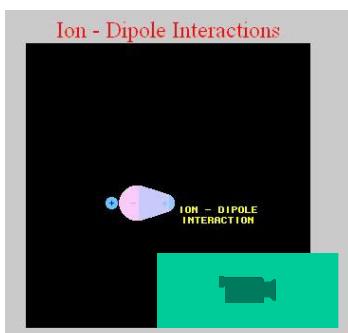
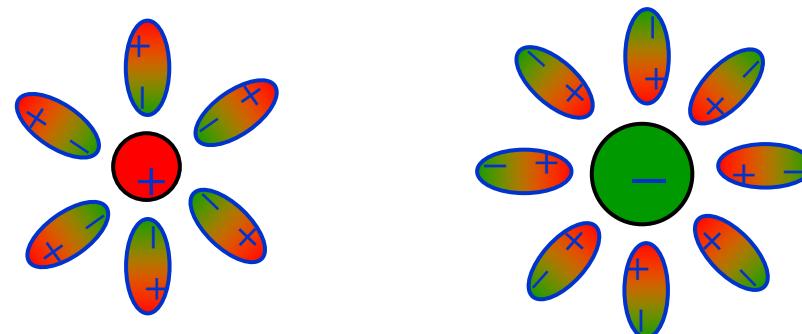
Se producen entre un ion y una molécula polar.

Son las fuerzas que actúan entre un compuesto iónico y un disolvente no polar (Ejemplo: NaCl en H₂O).

- La molécula polar se considera como dipolo eléctrico permanente.
- Cargas están desplazadas

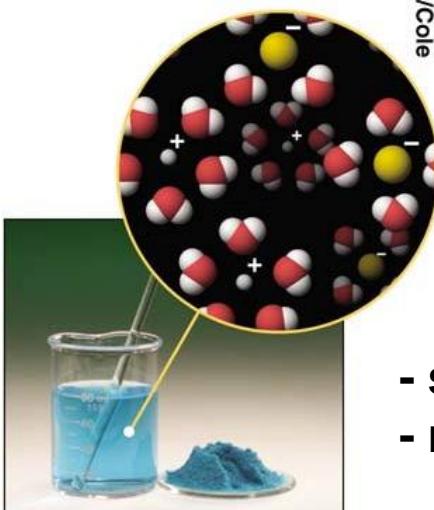
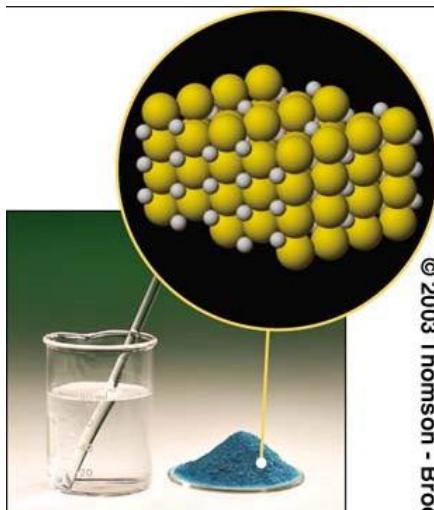


Campo eléctrico producido por un ion
En presencia de un campo eléctrico el dipolo se alinea y orienta según el gradiente de campo

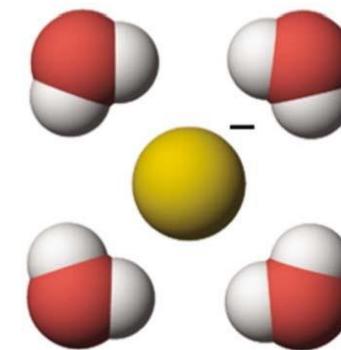
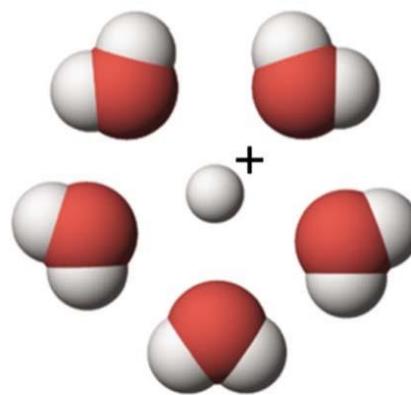


Importante para la solubilidad en agua, por ejemplo de medicamentos,...

Disolución de CuCl₂ en agua



- similar al enlace iónico
- más débil: $1/r^2$ en vez de $1/r$



$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|Q^\pm| \mu_D}{r^2}$$

Q ... Carga del ion
 μ ... momento dipolar molecular
 r... distancia entre los centros de ion y dipolo

2. Fuerzas ion – dipolo inducido

Se producen entre un ion y una molécula no polar.

Son las fuerzas que actúan entre un compuesto iónico y un disolvente no polar.
(Ejemplo: NaCl - C₆H₁₂)

Molécula no polar o átomo cerca de un ion



Distorsión de la nube electrónica



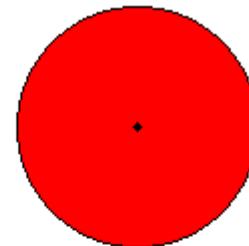
Dipolo inducido

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_{\pm}^2 \alpha}{2r^4}$$

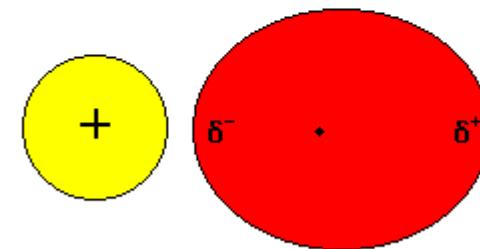
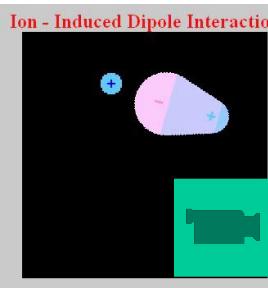
Z ... carga ion

α ... Polarizabilidad molécula o átomo

Muy débil: 1/r⁴



Spherical atom with no dipole.
The dot indicates the location of the nucleus.

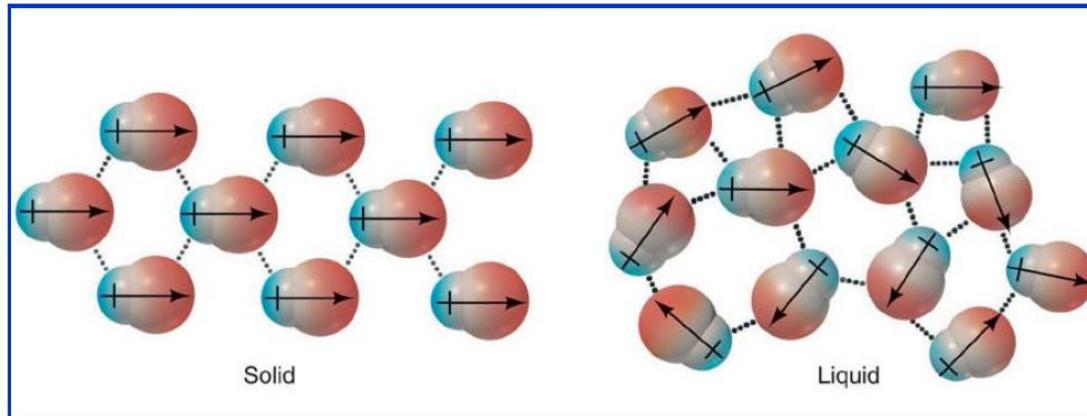


Upon approach of a charged ion, electrons in the atom respond and the atom develops a dipole.

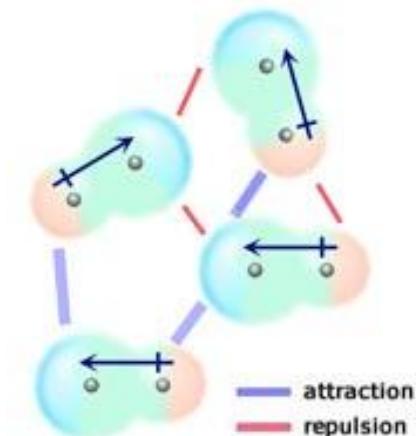
3. Fuerzas de Van der Waals

a.) Interacción dipolo – dipolo

Se producen entre dos moléculas polares

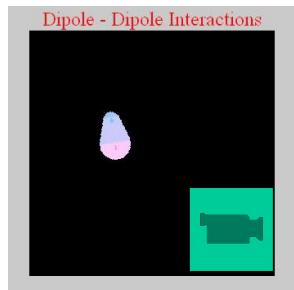


Ejemplo: H_2O , $\text{H}_2\text{O} - \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$



Orientación de moléculas polares en estado sólido o líquido

Atracción de una molécula polar por otra molécula polar.
En fase líquida o sólida se alinean los dipolos.

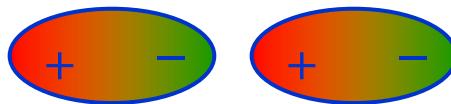


$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\mu_1\mu_2}{r^3}$$

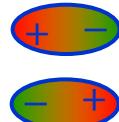
$\mu_1, \mu_2 \dots$ momentos dipolares moleculares

Interacción débil: $1/r^3$

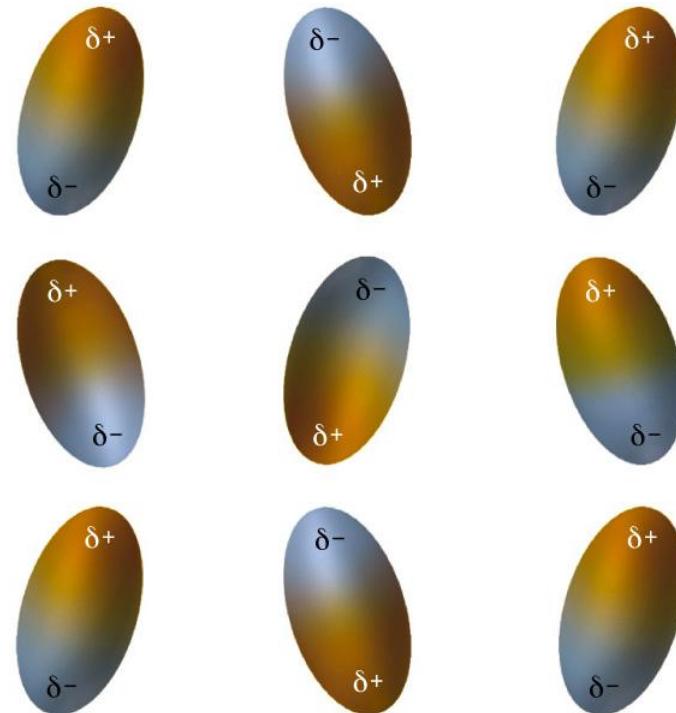
Dos posibles configuraciones



Configuración cabeza-cola
moléculas voluminosas

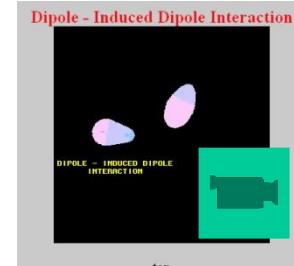


Configuración antiparalela
moléculas pequeñas



3.2. Fuerzas dipolo – dipolo inducido

Se producen entre una molécula polar y otra no polar
(Ejemplo: H₂O - CCl₄)



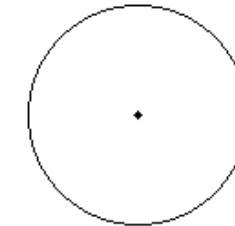
Molécula no polar o átomo cerca de una molécula polar



Distorsión de la nube electrónica



dipolo inducido

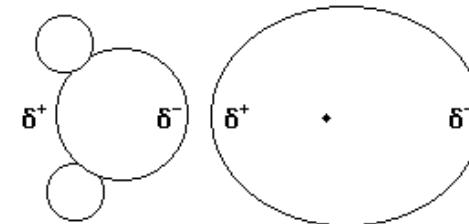


Spherical atom with no dipole.
The dot indicates the location
of the nucleus.

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

μ...momento dipolar
α...polarizabilidad

Interacción muy débil: 1/r⁶

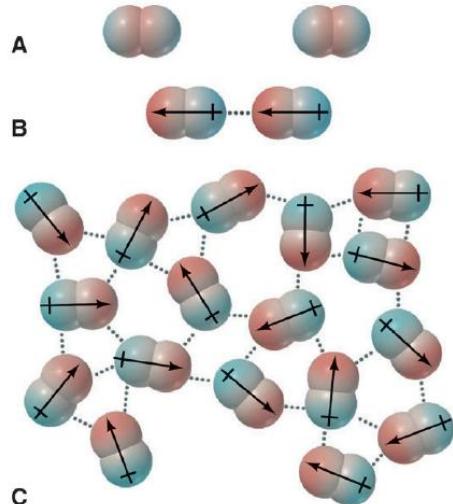


Upon approach of a molecule with a dipole, electrons in the atom respond and the atom develops a dipole.

Moléculas o átomos grandes son más polarizables que pequeños.

3.3. Fuerzas de dispersión de London (dipolo instantáneo-dipolo inducido)

- Atracción molécula apolar – molécula apolar.
- Están presentes en todas las moléculas y átomos
- Por lo general son muy débiles



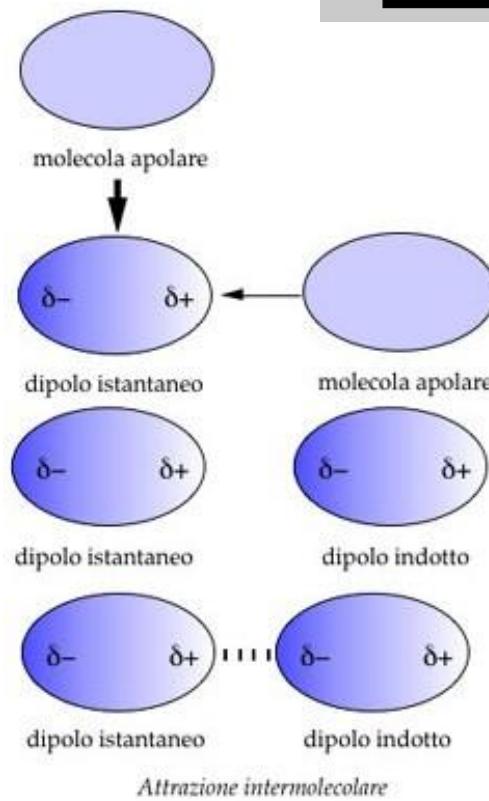
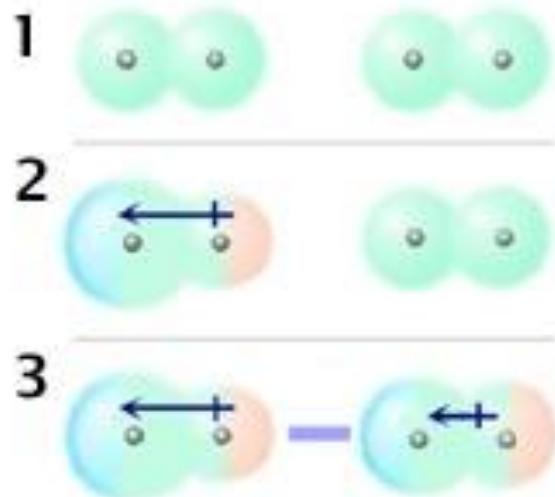
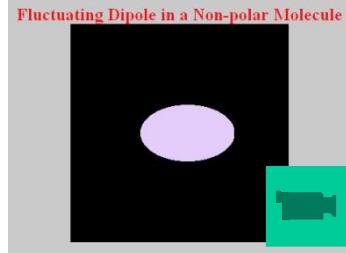
Salamanquesas tienen patas “pegajosas”.

$$E = -\frac{3\alpha_1\alpha_2}{2(4\pi\epsilon_0)r^6} \quad \alpha \dots \text{polarizabilidad}$$

Interacción muy débil: $1/r^6$



Fritz London
(1900-1954)

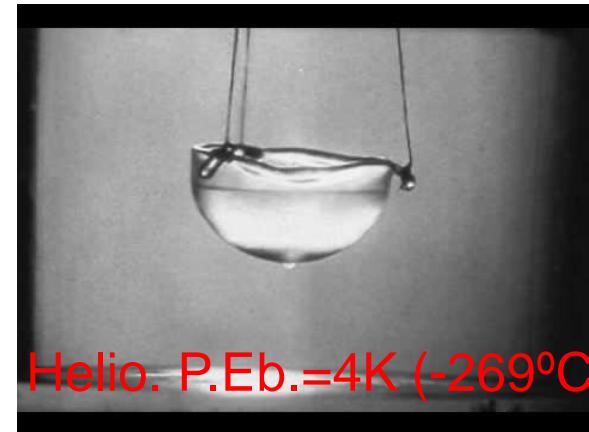


Movimiento de los electrones

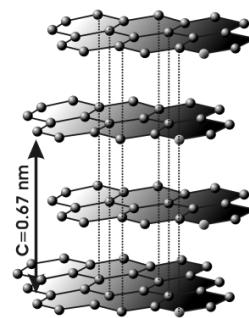
Dipolo instantáneo

Dipolo inducido en molécula continua

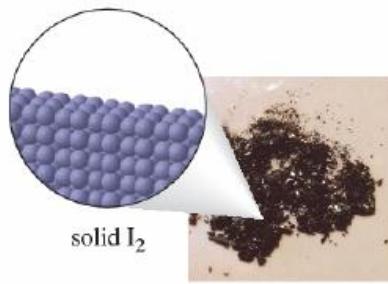
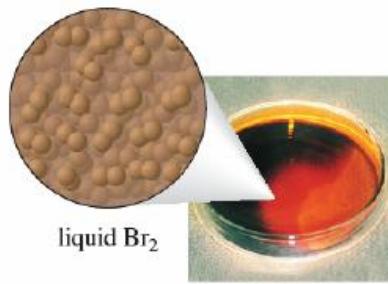
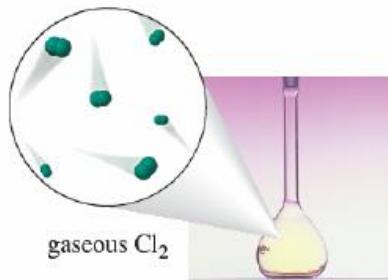
Responsables de la condensación y cristalización de sustancias apolares (moléculas, átomos)



Unión débil entre láminas de carbono en el grafito. Uso en minas de lápices y como lubricante sólido.

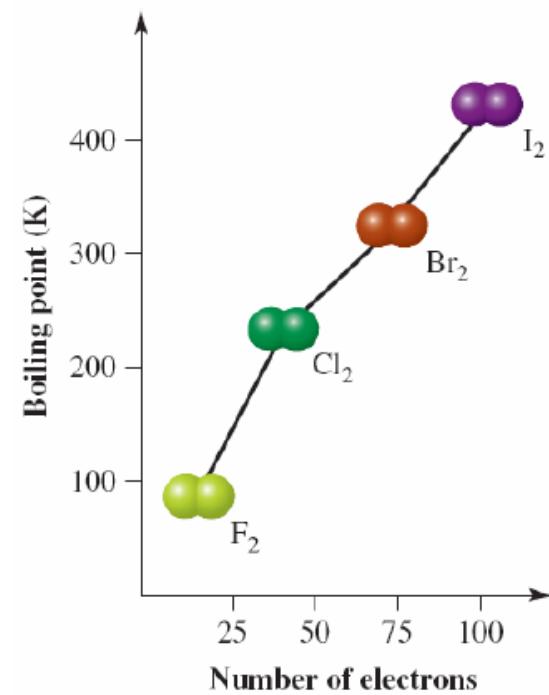


Puntos de ebullición de los halógenos

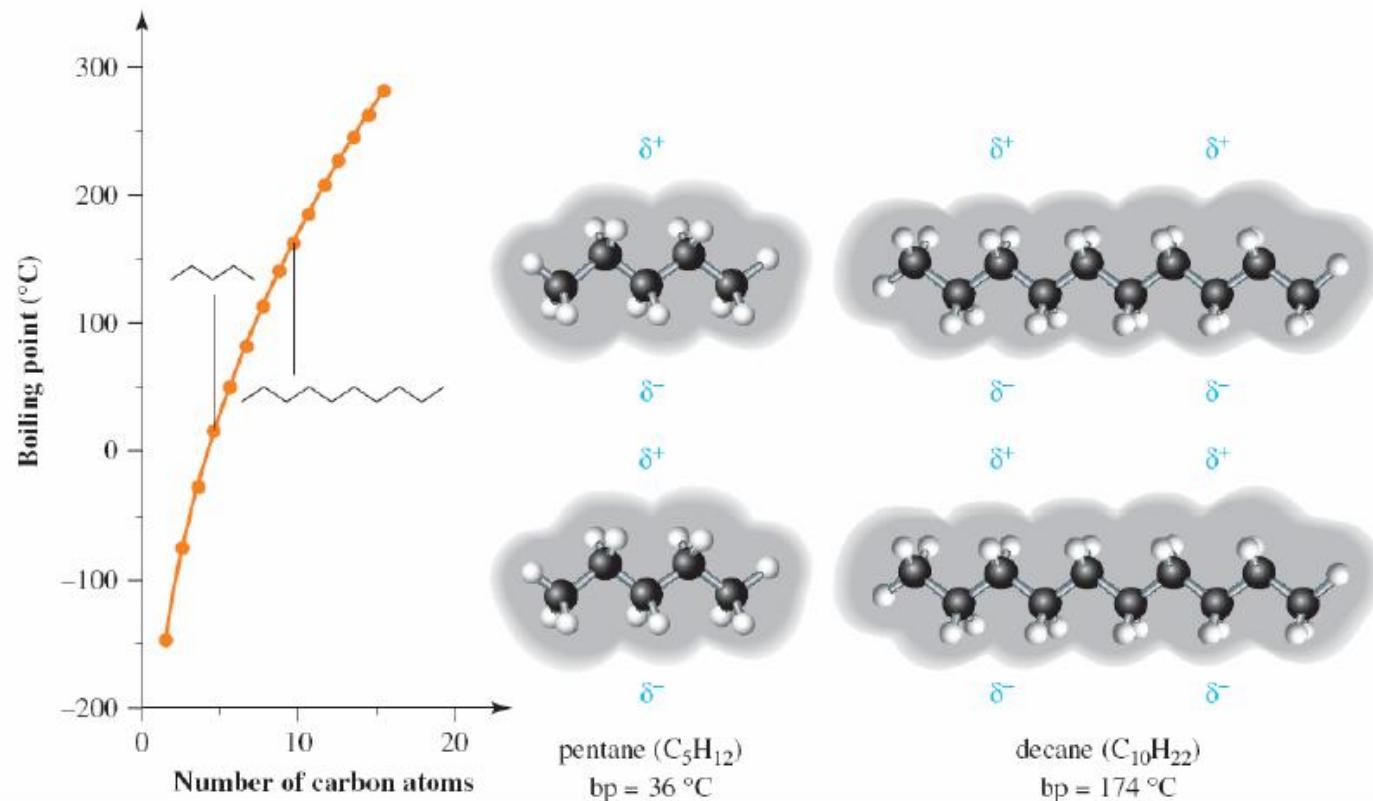


El punto de ebullición de una sustancia (molecular) es una medida de la fuerza con la que se une.

Fuerzas de dispersión son responsables de la variación de los puntos de ebullición de estos elementos.

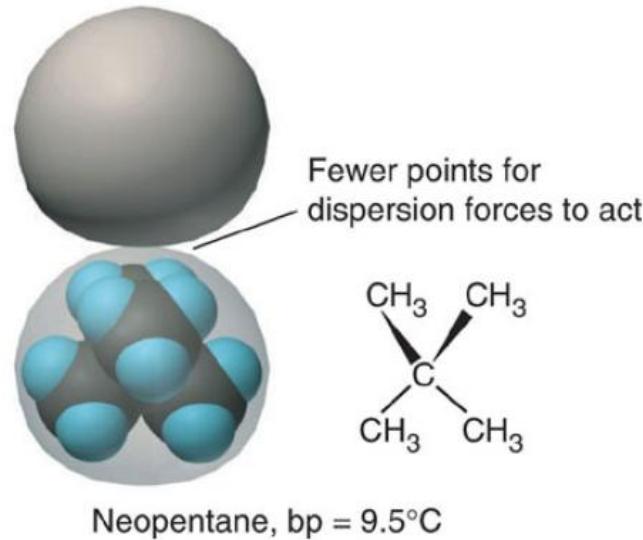
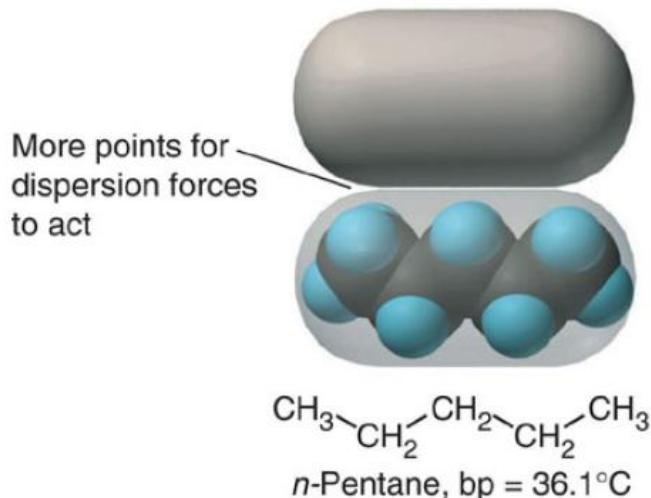


Longitud de cadena en alkanos y punto de ebullición



El punto de ebullición de alkanos aumenta con la longitud de cadena debido a más interacciones y a mayor polarizabilidad.

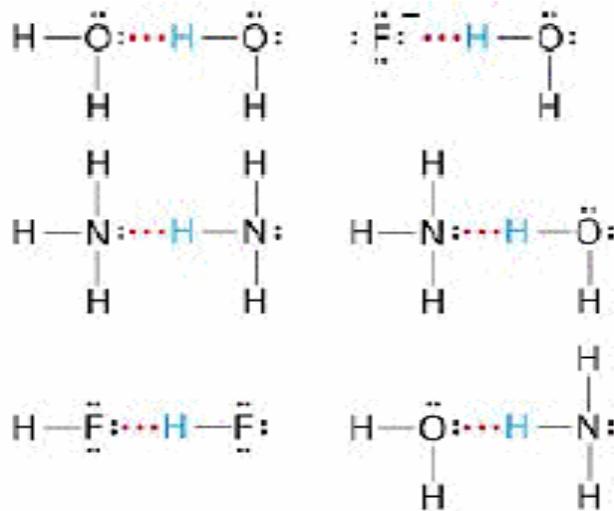
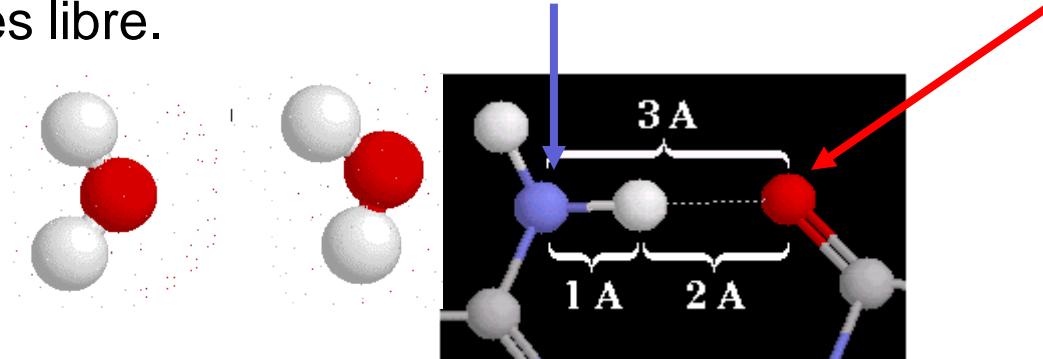
Forma molecular y punto de ebullición



El punto de ebullición depende de **todas las interacciones intermoleculares**, la masa de un compuesto es sólo una guía!!!

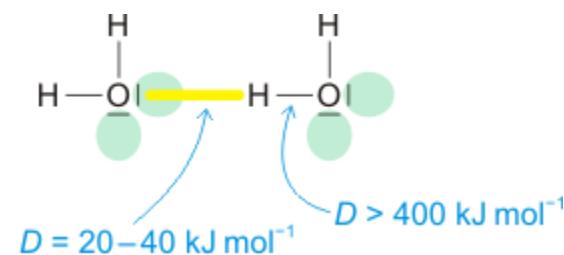
4. Enlace de hidrógeno

Se produce entre un átomo **H** enlazado a **F, O o N** y un átomo **N, O o F** con un par de electrones libre.



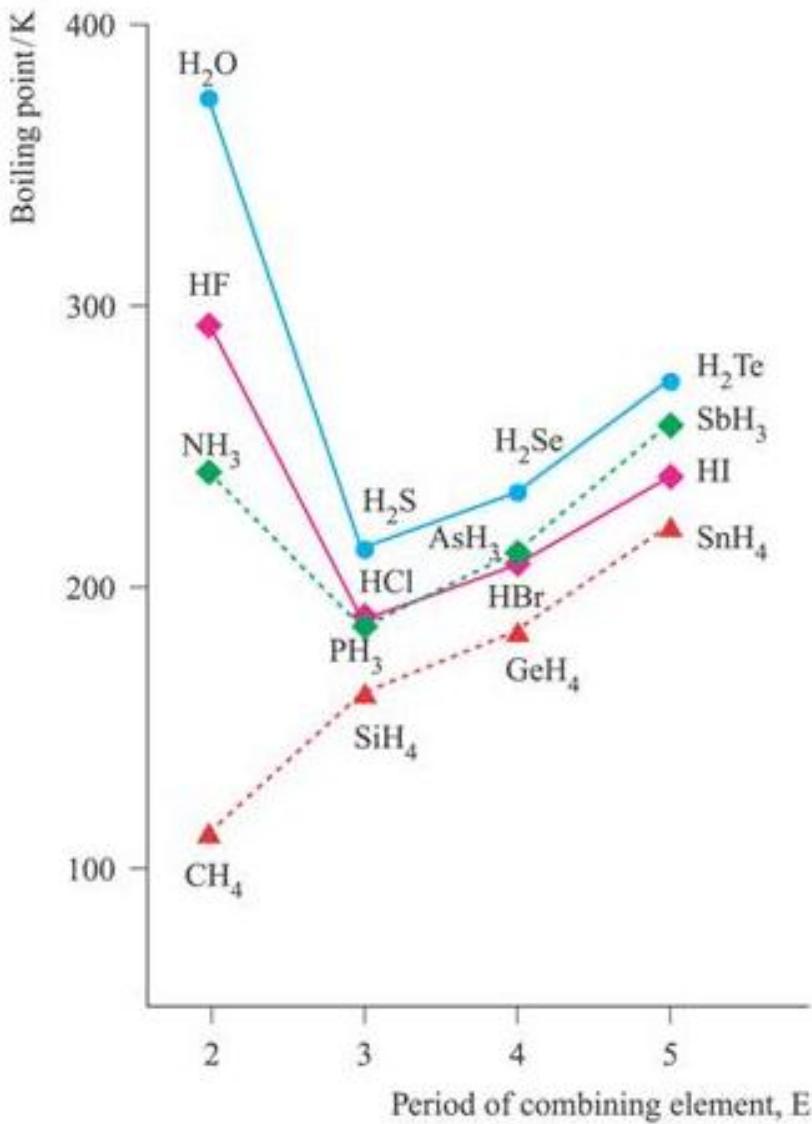
$$d_{\text{O-H}} < d_{\text{O}\cdots\text{H}}$$

$$E_{\text{O-H}} > E_{\text{O}\cdots\text{H}}$$

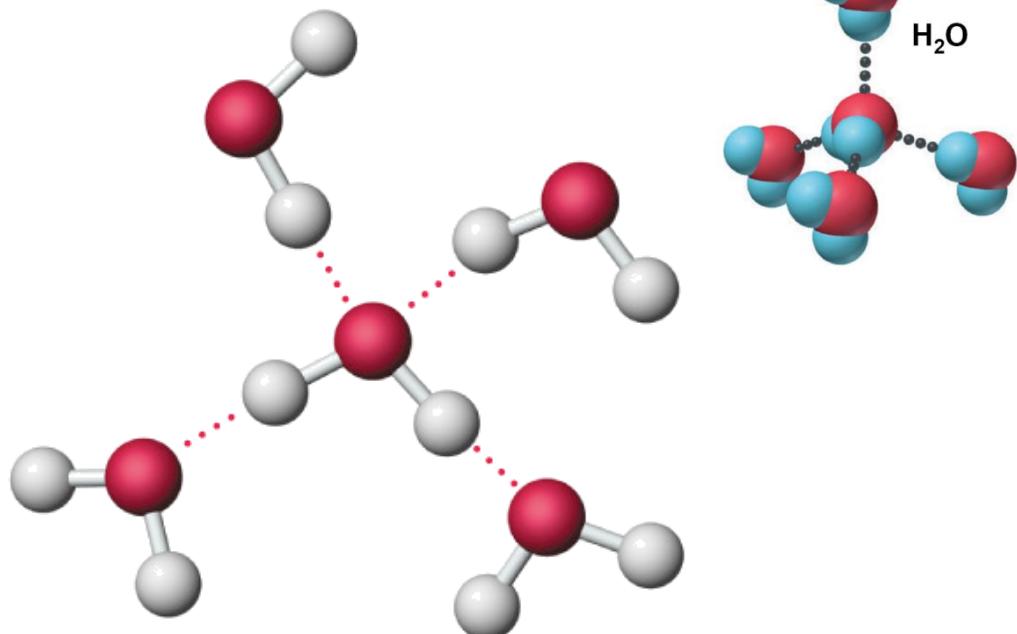
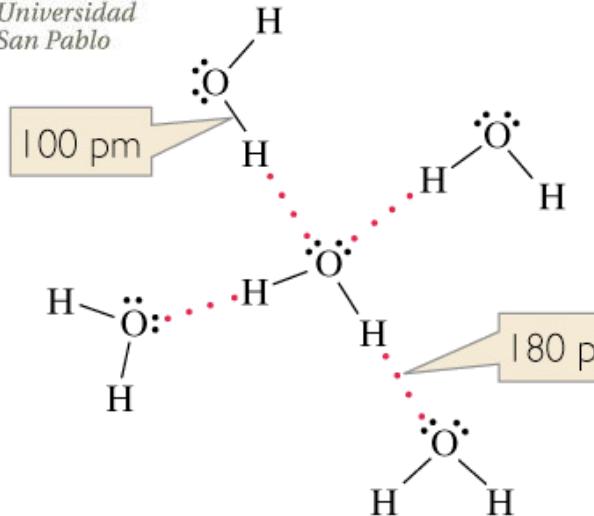


Energía media enlace de hidrógeno > energía dipolo-dipolo

Evidencias para el enlace de hidrógeno

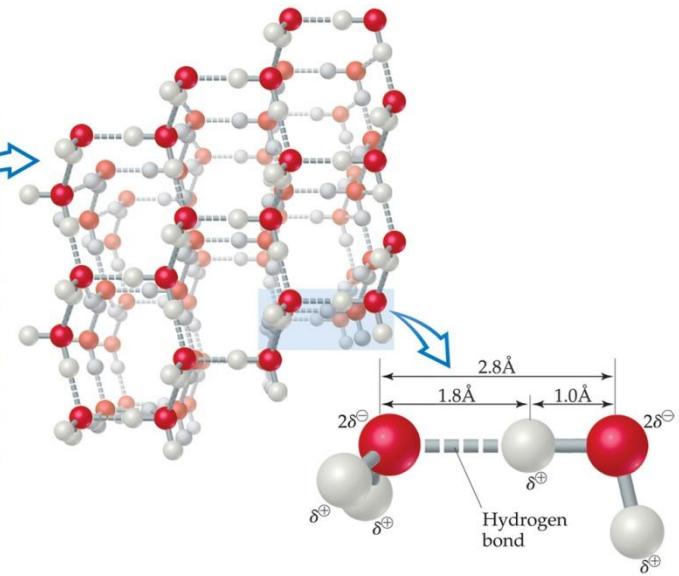


- La serie apolar del grupo 14 (SnH_4 to CH_4) sigue la tendencia esperada.
- Las series polares del grupo 16 siguen la tendencia desde H_2Te hasta H_2S , pero agua es totalmente anómalo.
- Lo mismo se observa en las series del grupo 15 y 17.

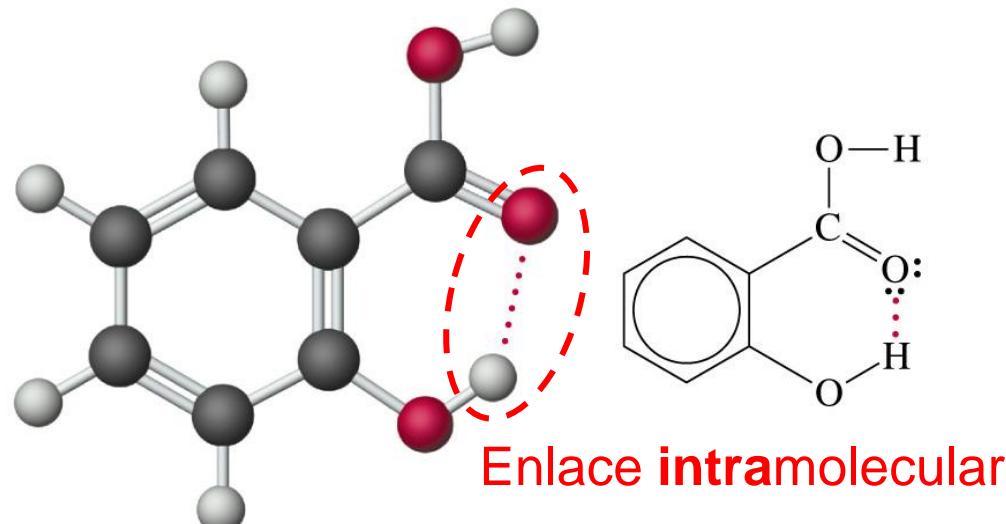
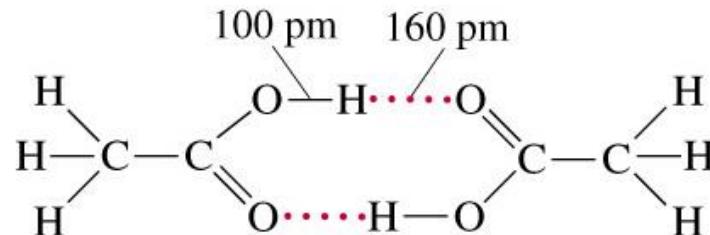
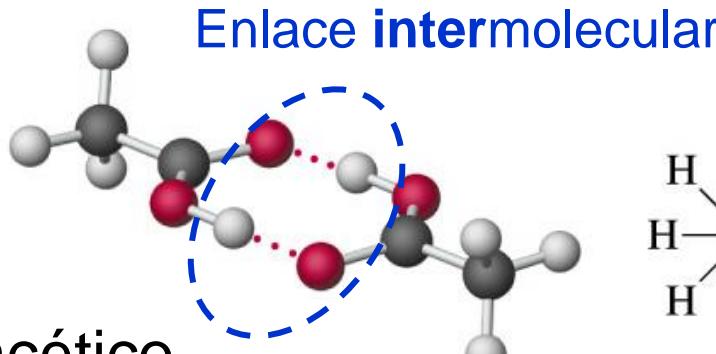


(a)

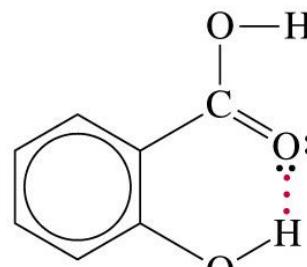
(b)



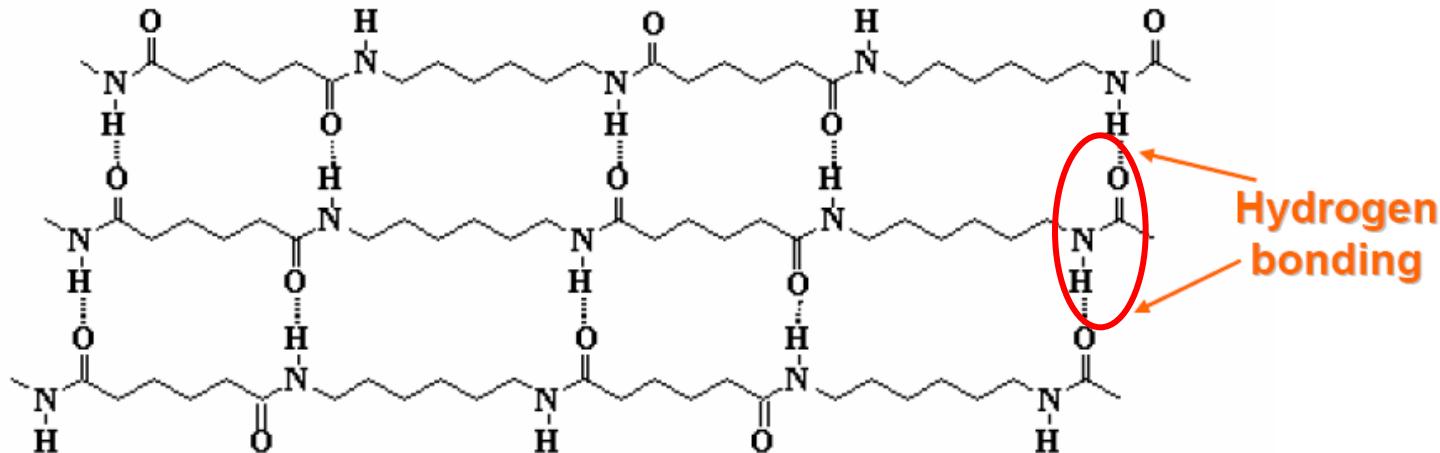
Enlaces de hidrógeno inter e intramoleculares



Ácido salicílico



Nylon

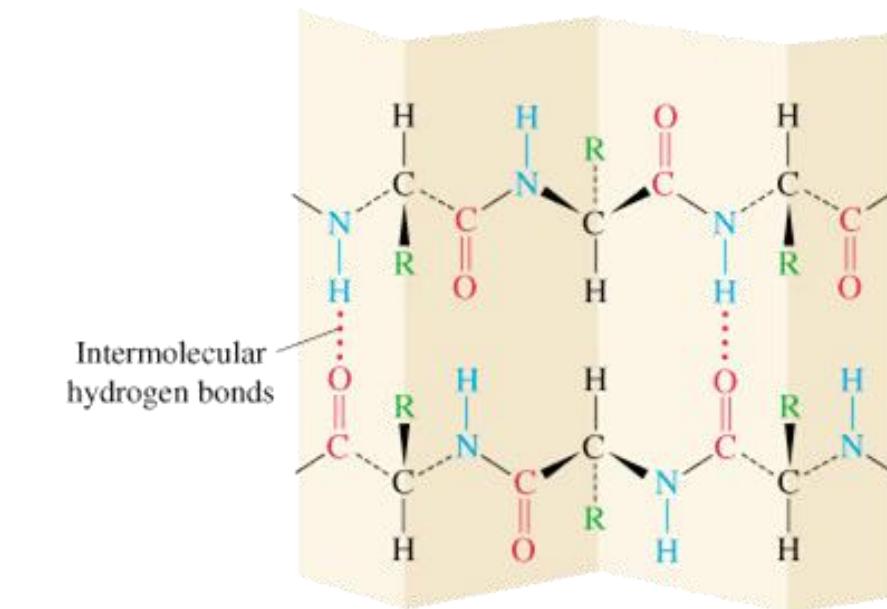
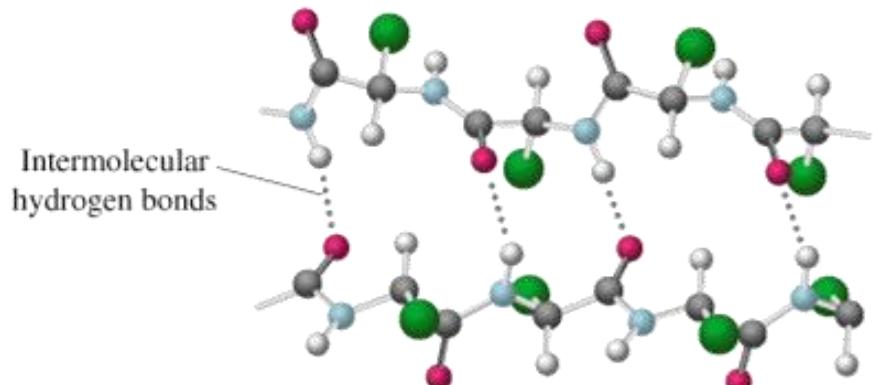


In nylon 6,6, the carbonyl oxygens and amide hydrogens can hydrogen bond with each other. This allows the chains to line up in an orderly fashion to form fibers.

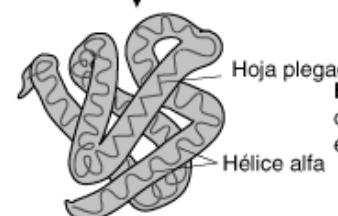
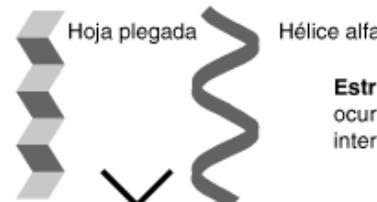
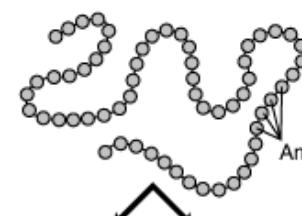
Enlaces de hidrógeno confieren una alta estabilidad al nylon.



Proteínas



Plegamiento de la cadenas: hojas



Niveles de organización de las proteínas

Estructura primaria de las proteínas

Es la secuencia de una cadena de aminoácidos

Estructura secundaria de las proteínas

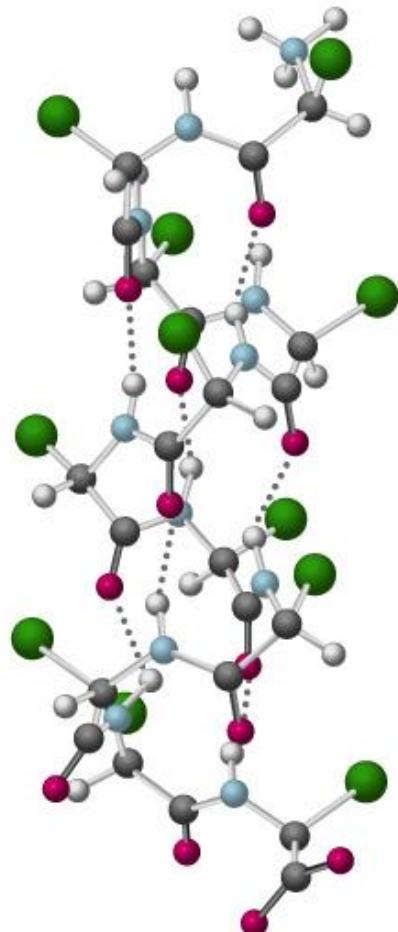
ocurre cuando los aminoácidos en la secuencia interactúan a través de enlaces de hidrógeno

Estructura terciaria de las proteínas

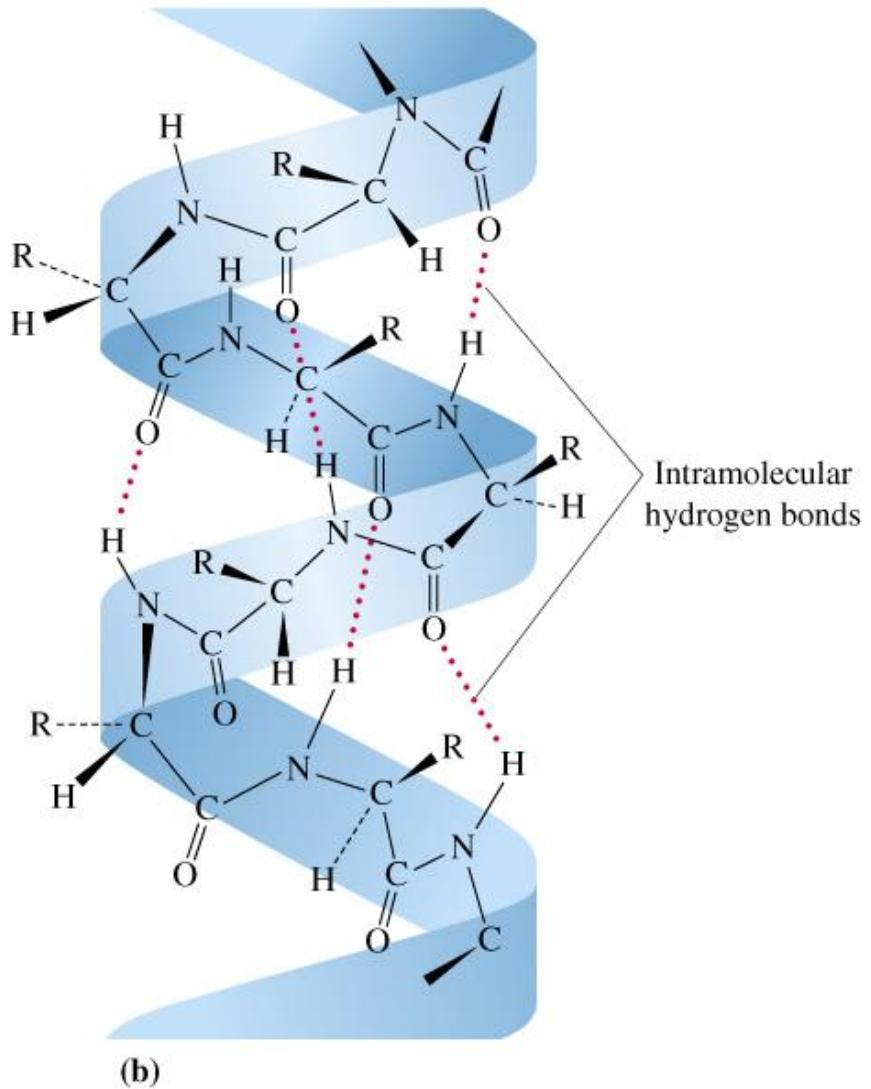
ocurre cuando ciertas atracciones están presentes entre hélices alfa y hojas plegadas

Estructura cuaternaria de las proteínas

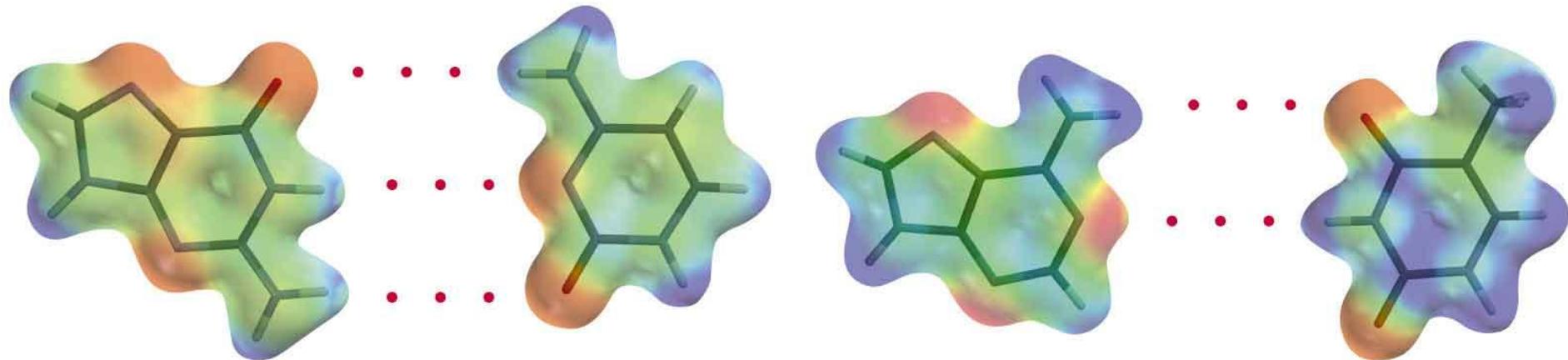
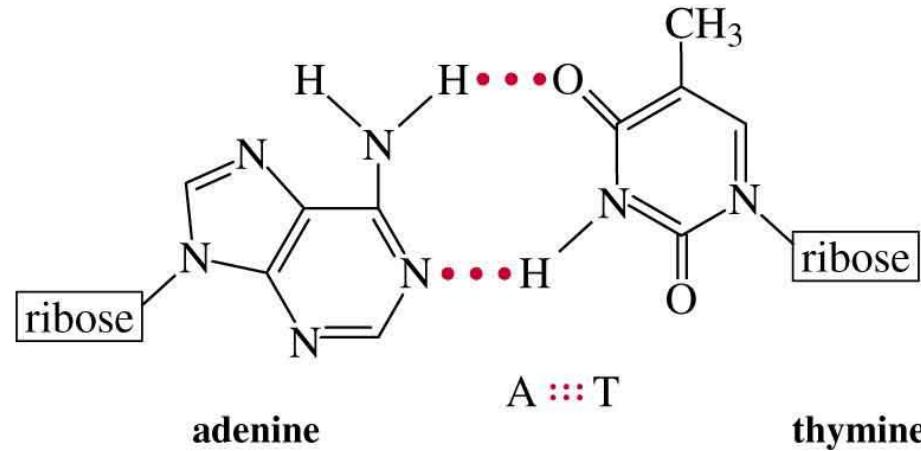
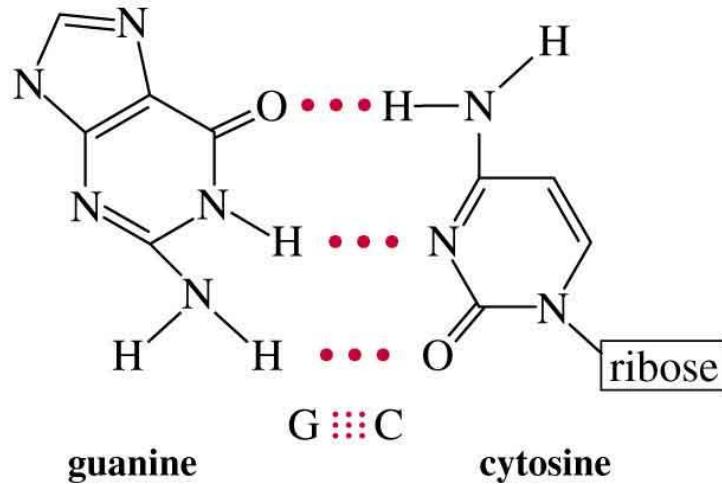
es una proteína que consiste de más de una cadena de aminoácidos



hélices

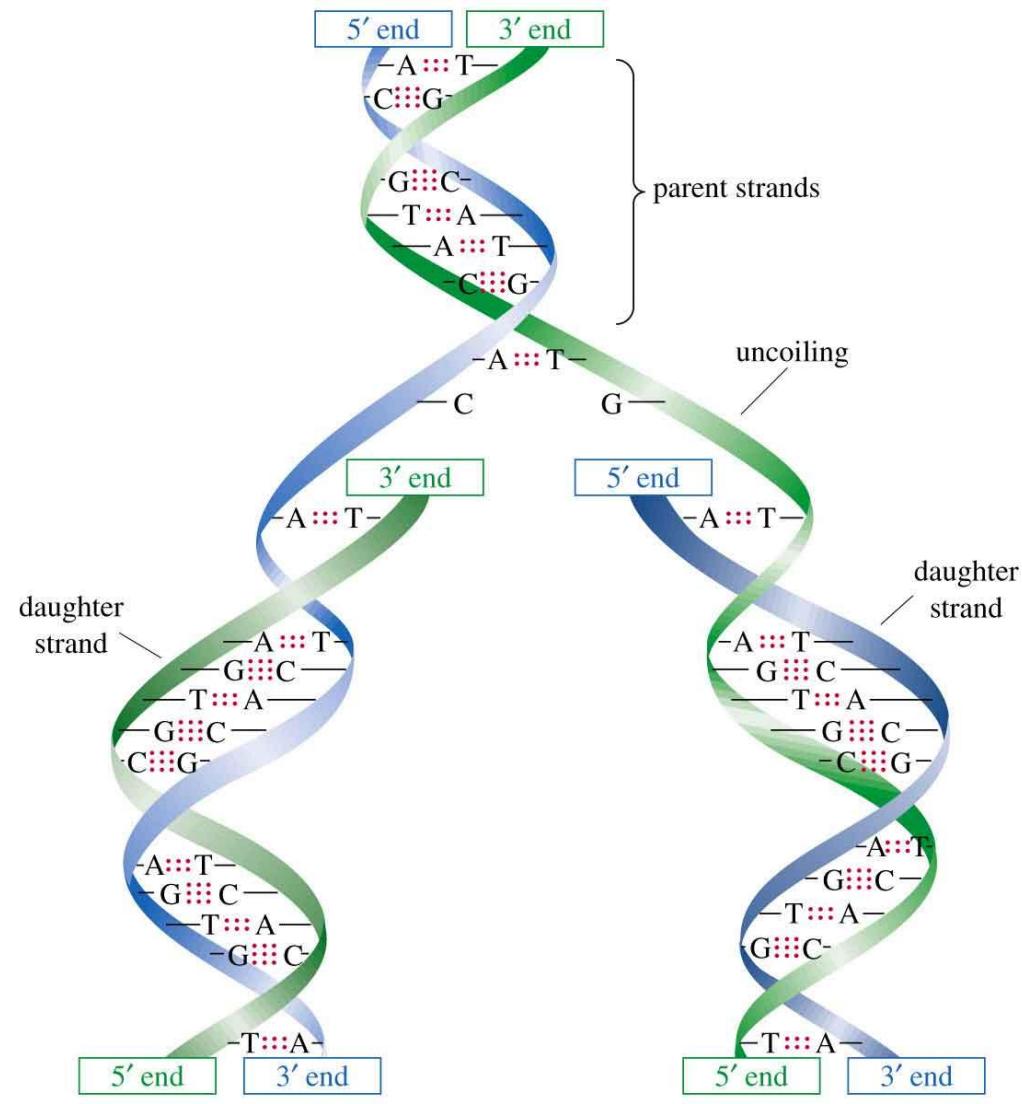
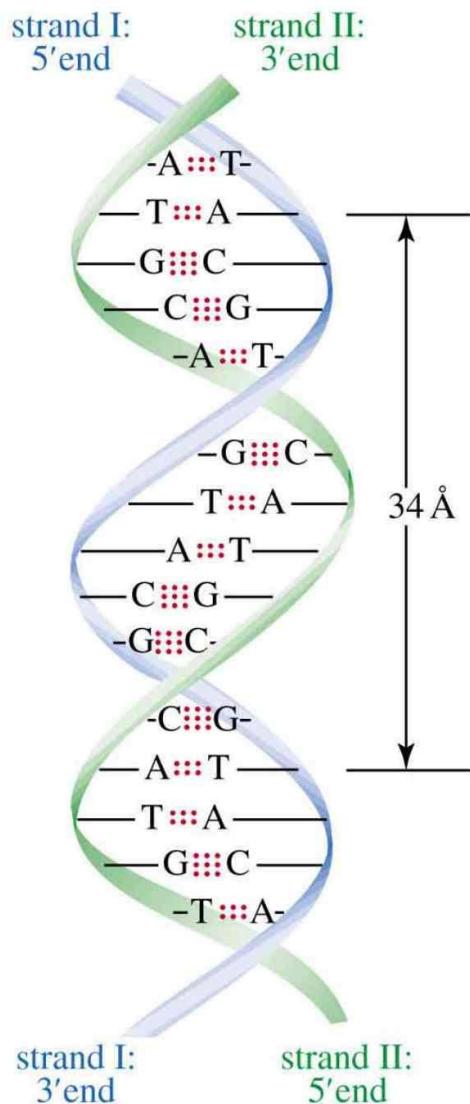


Pares de bases en ADN

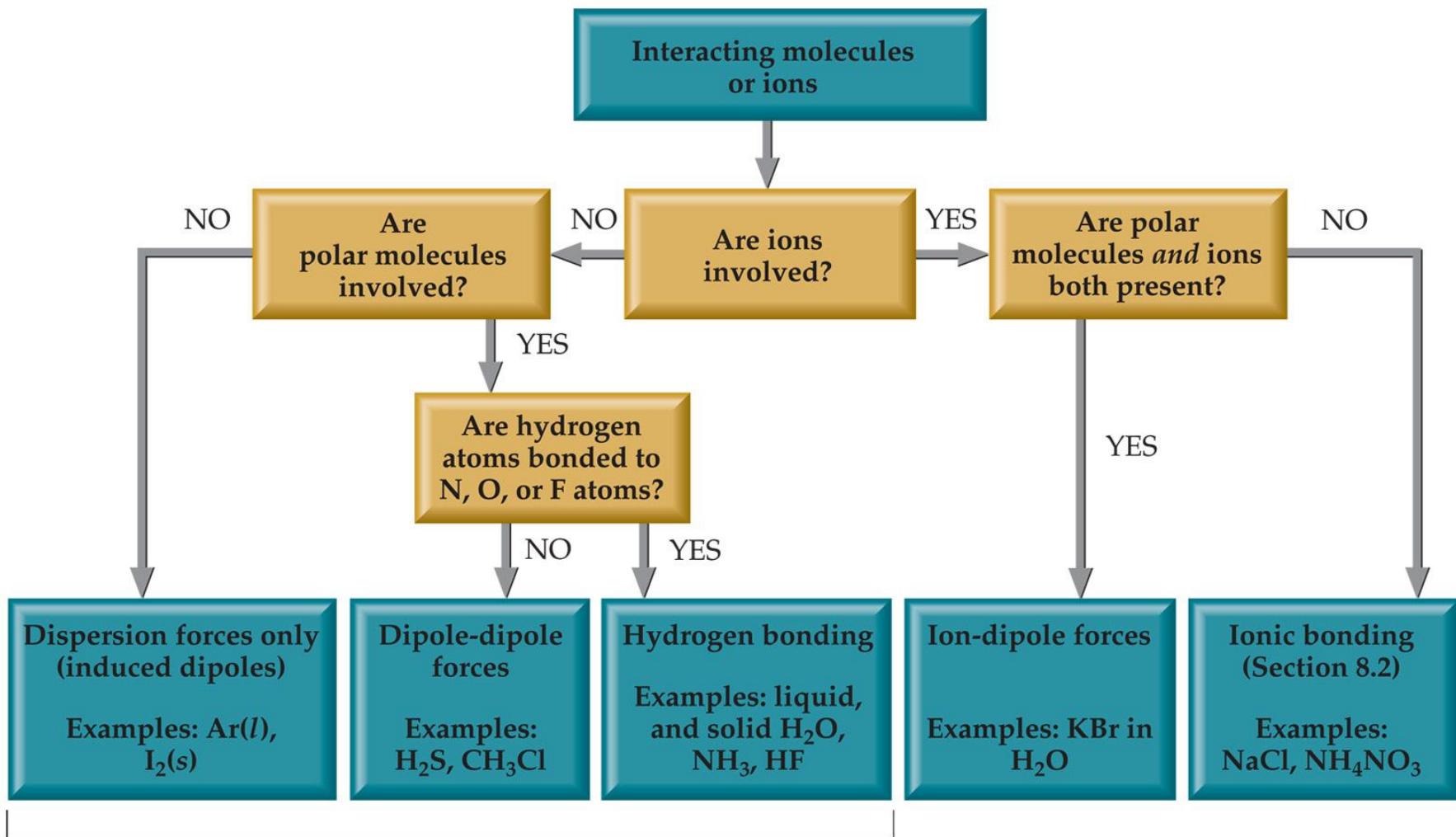




CEU

Universidad
San Pablo

Resumen



van der Waals forces