

ENLACE QUÍMICO Y FUERZAS INTERMOLECULARES

Enlace químico

El enlace químico se puede entender de manera simple como la unión entre dos o más átomos, esta unión se asocia a su vez con una energía en la que están involucrados los electrones de valencia de los átomos.

El enlace químico surge como una necesidad conceptual para explicar las propiedades químicas de las sustancias. En este sentido es que se habla de que existen tres modelos generales de enlace que explican las propiedades de tres tipos generales de sustancias:

1. Modelo de enlace iónico.
2. Modelo de enlace metálico
3. Modelo de enlace covalente

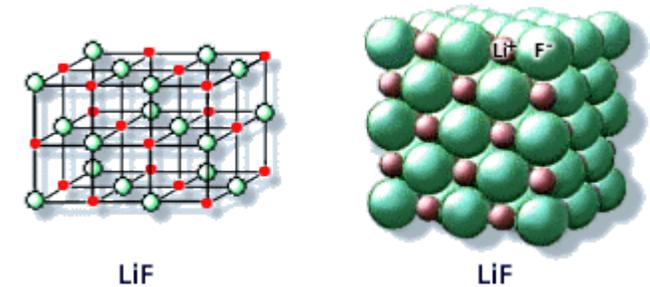


El **modelo de enlace iónico** se usa para explicar las propiedades de compuestos iónicos que son sustancias caracterizadas por ser sólidas (generalmente) y solubles en agua. Al ser disueltas o fundidas son buenos conductores de la electricidad. En estado sólido son materiales aislantes.

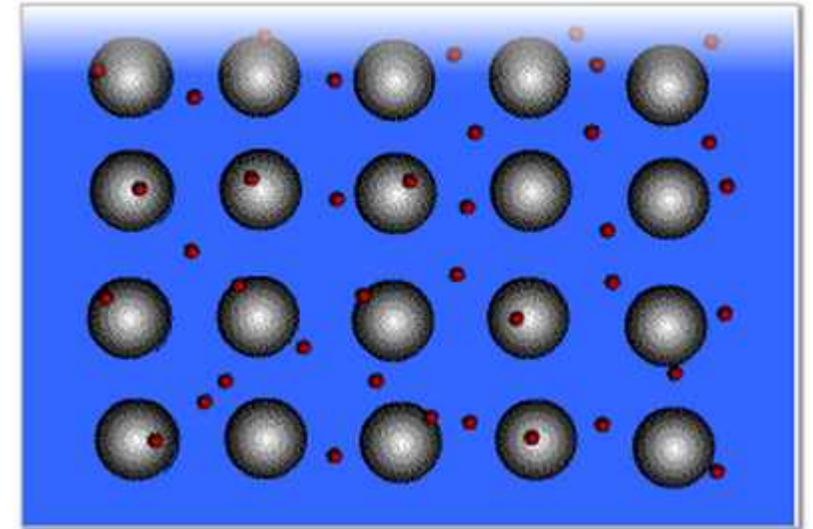
Las sales e hidróxidos metálicos de las familias 1 y 2 son los mejores representantes de compuestos iónicos. Para explicar sus propiedades se propone la existencia de redes tridimensionales infinitas y ordenadas de cationes y aniones. La interacción electrostática entre estos iones y la estabilidad estructural del arreglo tridimensional da estabilidad a los compuestos.

El enlace iónico es un enlace multidireccional que se define como el conjunto de interacciones electrostáticas entre iones positivos y negativos.

La existencia de iones positivos y negativos se explica como resultado de las bajas energías de ionización de los átomos metálicos de las familias 1 y 2.



El **modelo de enlace metálico** se usa para explicar las propiedades de los metales y sus aleaciones. Para visualizar cómo es el enlace metálico se propone la teoría del mar de electrones, según la cual los metales están constituidos por una red infinita y ordenada de cationes metálicos que se mantiene unida por un “mar de electrones” que es una especie de nube electrónica que permite la unión entre los cationes y al mismo tiempo explica la disponibilidad de electrones que es necesaria para que se presente tanto la conductividad térmica como eléctrica de estos materiales. Así, el enlace metálico es todo el conjunto de interacciones entre electrones y cationes.



El ***modelo de enlace covalente*** es el más extendido y estudiado de los modelos de enlace, surge para explicar las propiedades de sustancias moleculares como el agua, oxígeno, dióxido de carbono y sustancias orgánicas entre muchas otras.

Para abordar el estudio del modelo de enlace covalente considero pertinente dividir a las sustancias que tiene bajo estudio el modelo en dos grandes categorías: sustancias moleculares y sustancias no moleculares.



- Sustancias moleculares.

Son sustancias en cuya fórmula química encontramos generalmente átomos no metálicos, aunque esto no es una regla ya que hay sustancias moleculares en cuyas fórmulas hay átomos metálicos, aunque estos por lo general poseen altas energías de ionización. Se caracterizan por estar en estados físicos líquidos o gaseosos en condiciones normales de presión y temperatura ($P=101325$ Pa y 298.15 K). En caso de ser sólidos poseen puntos de fusión bajos que no superan los 350°C o 400°C . Además, al disolverse en agua no generan disoluciones electrolíticas.

Al calificarlos como sustancias moleculares se debe entender que están formados por entidades llamadas moléculas, cada una de las cuales es una entidad discreta formada por dos o más átomos unidos mediante enlace covalente y que representa la unidad estructural básica de la sustancia en cuestión.



- Sustancias no moleculares (sólidos covalentes).

Son sustancias sólidas en cuya fórmula química hay por lo general átomos no metálicos. Su punto de fusión es considerablemente elevado. Por lo general superior a 500°C.

Una sustancia no molecular no contiene unidades discretas, es un conjunto infinito de átomos unidos a través de enlaces covalentes.

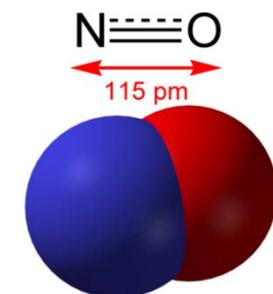
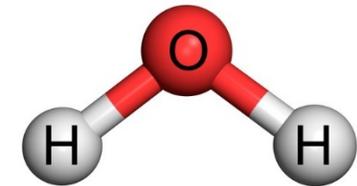
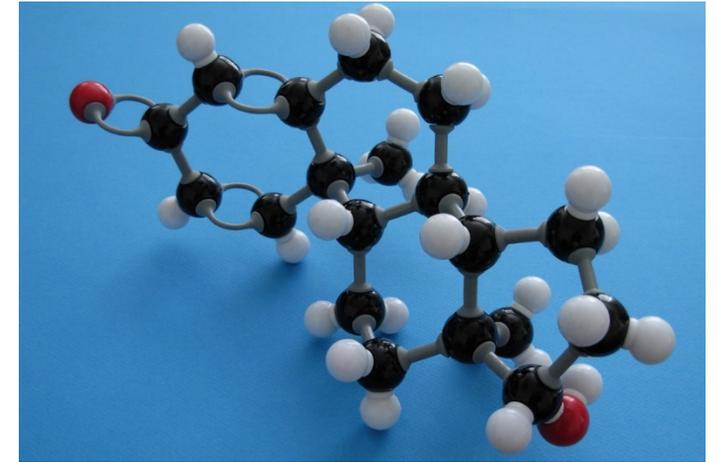


El estudio del enlace covalente se comienza con la descripción de este enlace en las moléculas de acuerdo con lo establecido en la teoría de Lewis. De ahí que sea pertinente iniciar dando el concepto de molécula.

Molécula

Es una especie química neutra y discreta que está integrada por dos o más átomos que se unen entre sí mediante enlaces covalentes. Representa la unidad estructural básica de una sustancia molecular y se caracteriza por tener las siguientes características:

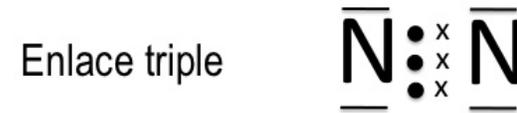
- Una **composición química** que queda descrita por una fórmula química.
- Una **conectividad** que se asocia a una estructura química en la que se indica cómo se unen los átomos entre sí.
- Una **configuración** que representa la orientación espacial de los enlaces y pares electrónicos que rodean a los átomos.
- Una **conformación** que indica la forma que la molécula adquiere en el espacio en función de la rotación a través de enlaces sencillos y la existencia de interacciones intermoleculares entre distintas zonas de la molécula (en polipéptidos y proteínas).



Desde la teoría de Lewis **el enlace covalente** se define de forma convencional como la unión unidireccional entre dos átomos mediante la compartición de pares de electrones.

A su vez la definición abre paso a una primera clasificación del enlace covalente en:

- Enlace covalente sencillo
- Enlace covalente doble
- Enlace covalente triple
- Enlace covalente coordinado



Polaridad del enlace covalente

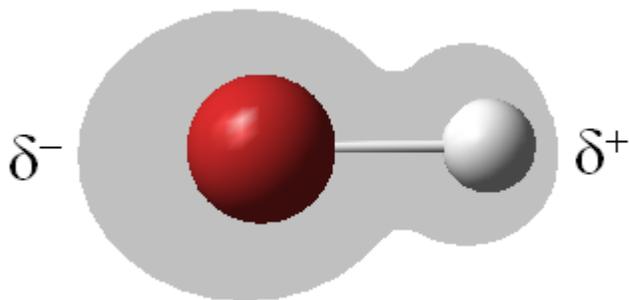
El enlace covalente definido como resultado de compartir pares de electrones nos puede llevar a la idea de que los electrones están equitativamente repartidos entre los dos átomos que se unen. Desde la perspectiva de Lewis esto es así, pues no hay argumentos para hablar de “inequidad en la repartición”. Pero esto no explica muchas evidencias experimentales relativas a la ruptura y formación de enlaces en las moléculas.

Para poder entender cuestiones vinculadas a la reactividad química es preciso utilizar la propuesta teórica de Linus Pauling para abordar la naturaleza del enlace químico y su reactividad química.

Pauling propone el concepto de electronegatividad y lo define de la siguiente manera:

La electronegatividad es la capacidad que posee un átomo de atraer hacia su núcleo los electrones del enlace covalente cuando forma parte de una molécula.

Así, cuando dos átomos de diferente naturaleza comparten electrones uno de ellos tendrá una mayor tendencia que el otro de atraer hacia su núcleo los electrones “compartidos”. De tal manera que se genera una distribución no equitativa de la densidad electrónica del enlace covalente que es interpretada como una mayor probabilidad de hallar a los pares electrónicos de enlace cerca de uno de los átomos que lo integran y genera por lo tanto una entidad dipolar que posee una zona de carga parcialmente negativa y otra de carga parcialmente positiva. Se dice entonces que el enlace covalente posee un dipolo eléctrico de enlace y está polarizado.



De acuerdo con este criterio el enlace covalente sólo puede ser polar o puro.

El **enlace covalente polar** se presenta entre átomos de diferente naturaleza entre los cuales siempre existirá una cierta diferencia de electronegatividad mientras que el **enlace covalente puro** se dará cuando estén unidos dos átomos del mismo elemento.

No está de más comentar que los enlaces covalentes polares representan una amplia gama de posibilidades de acuerdo con su grado de polaridad y es en este sentido que se debe hablar de la diferencia de electronegatividad como criterio para evaluar este grado de polaridad. Así, tendremos enlaces covalentes poco polares cuyos valores de $\Delta\chi$ son pequeños y enlaces covalentes polares cuya $\Delta\chi$ sea grande.

Si usamos los criterios vertidos en algunos libros de texto de Química podemos decir que los enlaces covalentes polares se clasificarían de la siguiente forma:

Si $0 < \Delta\chi < 2$ tenemos un enlace covalente polar

Si $\Delta\chi > 2$ tenemos un enlace covalente con importantes características iónicas

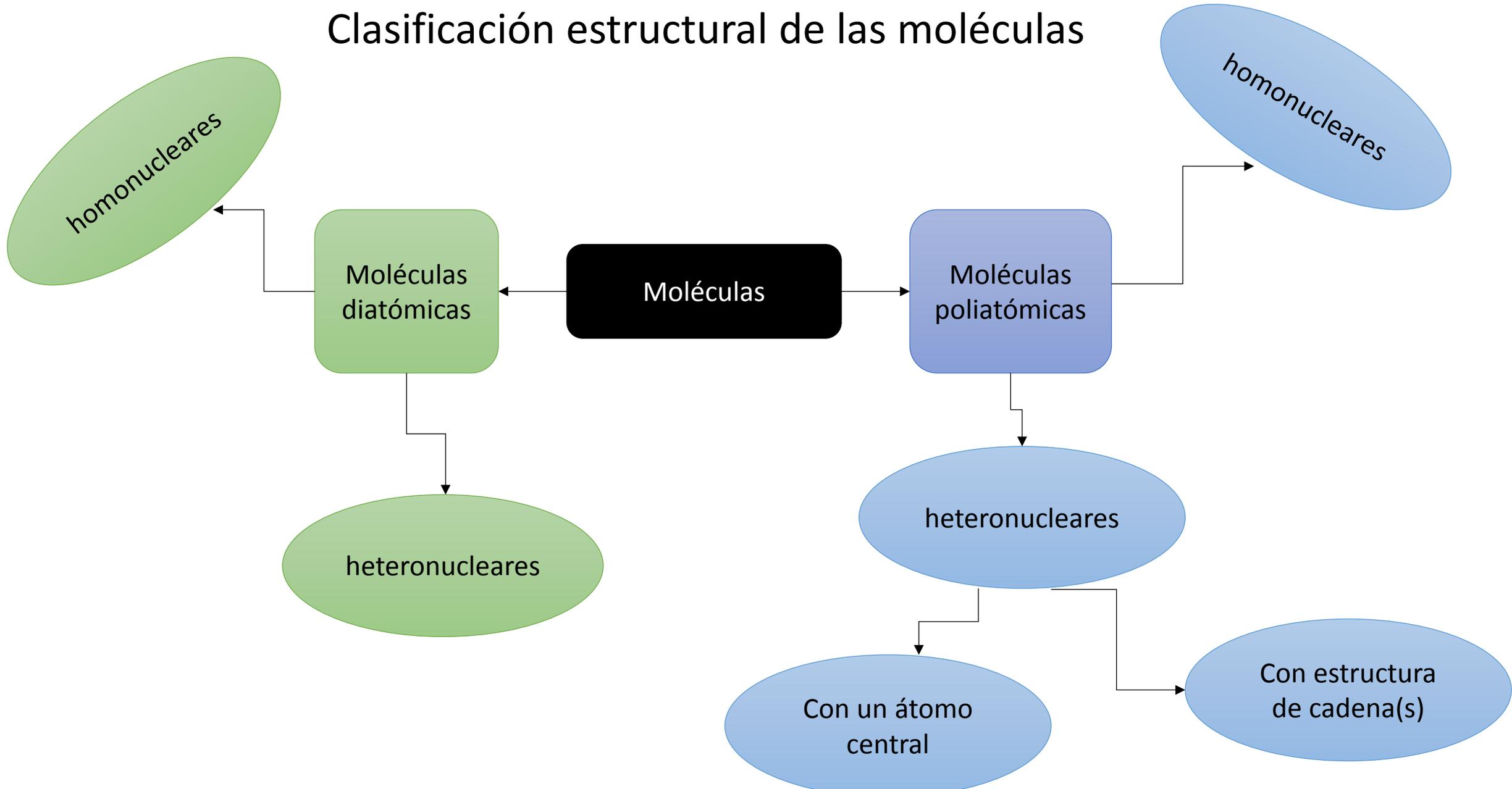
Polaridad de moléculas

La polaridad de una molécula es una propiedad que se relaciona con la existencia o ausencia de un dipolo eléctrico resultante asociado a su estructura química. La existencia de este dipolo depende del **grado de polaridad de los enlaces covalentes**, de la **conectividad entre los átomos** y de **la configuración espacial que estos adquieran en virtud de la unidireccionalidad del enlace covalente** (es decir de la geometría molecular). La polaridad de las moléculas permite explicar entre otros fenómenos la solubilidad y la miscibilidad entre sustancias.

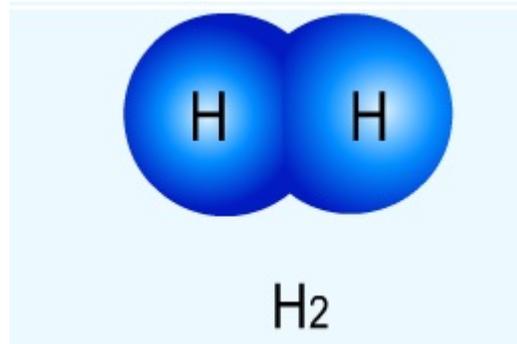
Para determinar si una molécula es polar o no polar es fundamental conocer su estructura química (conectividad entre sus átomos y orientación espacial de los mismos).

Con la finalidad de simplificar esta tarea se propone la siguiente clasificación estructural de las moléculas y una indicación de cuáles serán los criterios para determinar si la molécula es polar o no polar.

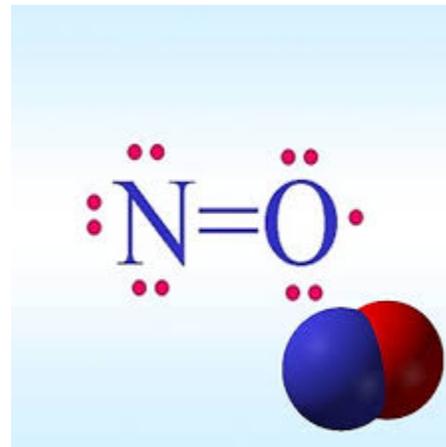
Clasificación estructural de las moléculas



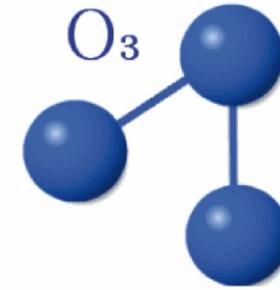
Las **moléculas diatómicas homonucleares** son **no polares** debido a que su único enlace es covalente puro.



Las **moléculas diatómicas heteronucleares** son **polares**, en virtud de que su único enlace es polar. Aquí se debe hablar de distintos grados de polaridad que dependen del valor de la diferencia de electronegatividad entre los átomos.

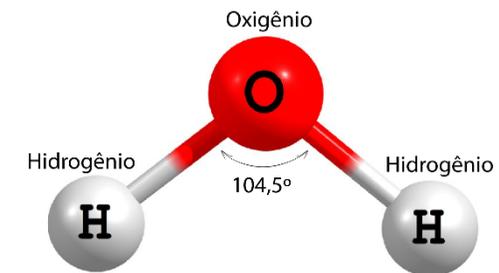


Las ***moléculas poliatómicas homonucleares*** son **no polares** ya que los enlaces covalentes que unen a sus átomos son enlaces covalentes puros.



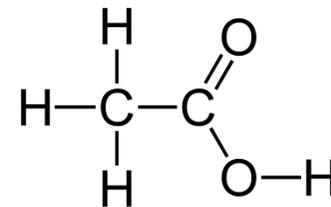
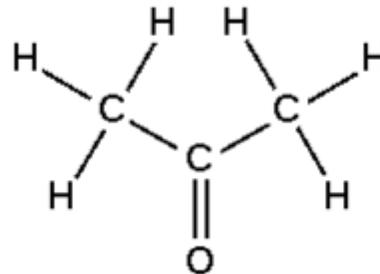
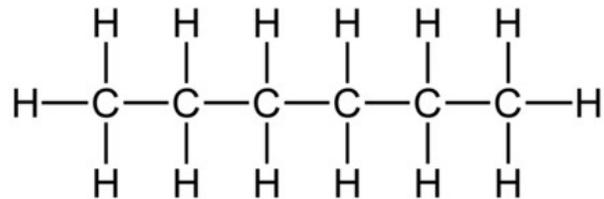
Para determinar si una ***molécula poliatómica heteronuclear con un solo átomo central*** es polar o no polar se deberá:

1. Evaluar el grado de polaridad de cada enlace covalente que esté representado en la estructura de Lewis
2. Determinar la geometría alrededor del átomo central y determinar si los dipolos de enlace se suman o se cancelan vectorialmente.



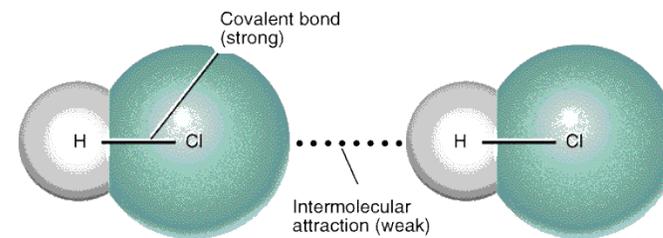
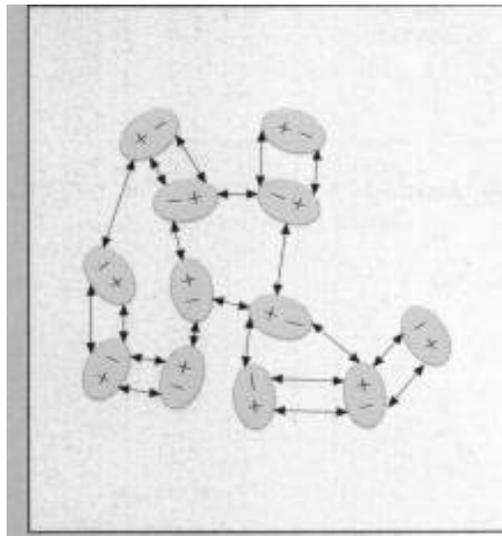
Para determinar si una **molécula poliatómica heteronuclear con estructura de varios átomos en cadena** es polar o no polar se debería aplicar el criterio anterior a cada uno de los átomos de la estructura. Sin embargo, se pueden usar los siguientes tres criterios a manera de aproximación:

1. Si en la estructura de la molécula sólo hay enlaces cuya diferencia de electronegatividad sea igual o menor a 0.4. La molécula se considera **no polar**.
2. Si en la estructura de la molécula hay al menos un enlace cuya diferencia de electronegatividad sea mayor a 0.4 la molécula se considera **polar** o bien, la zona de la molécula que contenga este o estos enlaces será una zona polar.
3. Si en la estructura de la molécula hay enlaces O-H o N-H, la molécula o bien la zona de la molécula que los contenga será **polar**.



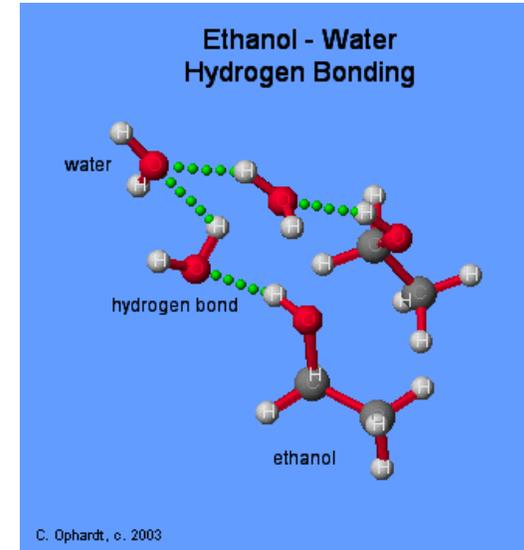
Fuerzas intermoleculares

Son fuerzas de naturaleza electrostática que se presentan entre las moléculas que integran a una sustancia, son comparativamente de menor intensidad que las fuerzas de enlace y son responsables de las **propiedades físicas** de las sustancias formadas por moléculas.



Entre las fuerzas intermoleculares se incluyen

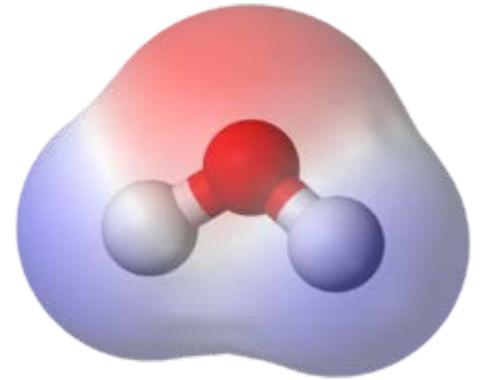
- Las fuerzas dipolo-dipolo
- Los puentes de hidrógeno
- Las fuerzas ion-dipolo
- Las fuerzas de dispersión
 - Fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido
 - Fuerzas dipolo-dipolo inducido
 - Fuerzas ion-dipolo inducido



Clasificación de las fuerzas intermoleculares

Se pueden clasificar de acuerdo con el tipo de moléculas entre las que se presentan en los siguientes grupos:

- Fuerzas intermoleculares entre moléculas polares
- Fuerzas intermoleculares entre moléculas no polares
- Fuerzas intermoleculares entre moléculas polares y moléculas no polares
- Fuerzas intermoleculares entre iones y moléculas polares
- Fuerzas intermoleculares entre iones y moléculas no polares

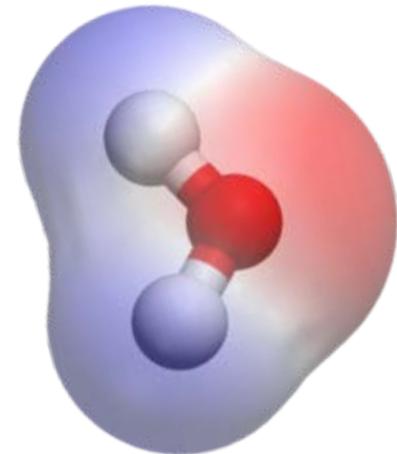
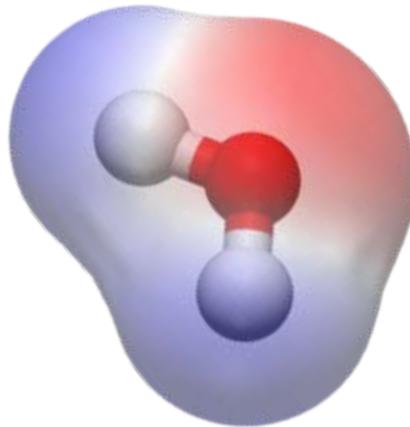
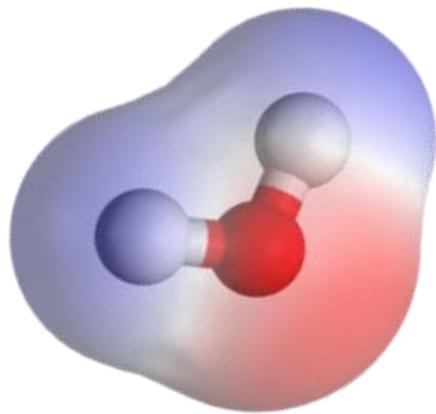


Fuerzas intermoleculares entre moléculas polares

Cuando sólo interaccionan entre sí moléculas polares hay la posibilidad de que se presenten dos tipos de fuerzas intermoleculares:

- Fuerzas dipolo-dipolo
- Puentes de hidrógeno

Las **fuerzas dipolo-dipolo** se presentarán entre moléculas polares que carezcan de enlaces O-H, N-H o H-F mientras **que los puentes de hidrógeno** sólo se presentarán entre moléculas en cuya estructura existan enlaces O-H, N-H y F-H

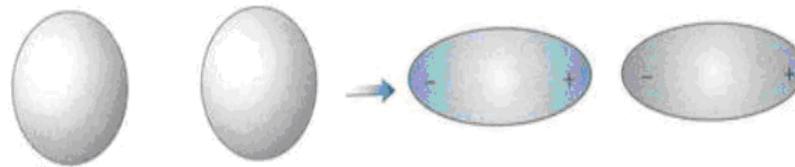


Fuerzas intermoleculares entre moléculas no polares

Cuando sólo interaccionan entre sí moléculas no polares las fuerzas que permiten su atracción reciben el nombre de **Fuerzas de dispersión de London del tipo “dipolo inducido-dipolo inducido”**. Las cuales son interacciones de atracción relativamente débiles cuando actúan de manera separada pero muy intensas al sumarse.

De acuerdo con Fritz London, estas fuerzas se originan como resultado de la interacción de dipolos inducidos presentes en las moléculas y los cuales son a su vez causados por el movimiento aleatorio de los electrones.

En principio, las **fuerzas de dispersión del tipo “dipolo inducido-dipolo inducido”** están presentes en todas las moléculas pero son más importantes en las moléculas no polares donde hay ausencia de dipolos eléctricos permanentes.

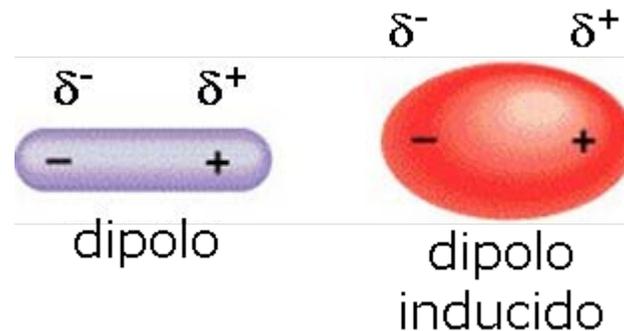


Fuerzas intermoleculares en mezclas de moléculas polares y moléculas no polares

Cuando interaccionan moléculas polares y no polares se presenta un tipo de interacción de atracción que recibe el nombre de **Fuerza de dispersión de London del tipo “dipolo - dipolo inducido”**.

En la que el dipolo permanente de una molécula interacciona con dipolos inducidos presentes en la molécula no polar.

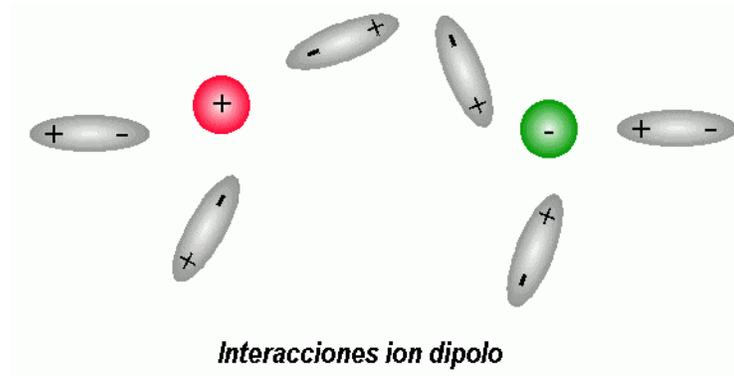
La interacción en sí es débil, pero permite explicar cómo es posible mezclar pequeñas cantidades de sustancias polares en sustancias no polares.



Fuerzas intermoleculares entre iones y moléculas polares (disoluciones acuosas de electrolitos - sales en agua)

Cuando se disuelve de manera parcial o total una sal en agua se presenta un tipo de fuerzas que se clasifican como fuerzas intermoleculares y que reciben el nombre de **fuerzas ion-dipolo**, ya que son el resultado de la atracción electrostática entre los iones y las moléculas polares de una sustancia.

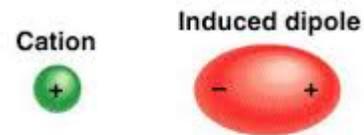
Las fuerzas ion-dipolo son las responsables de los fenómenos de hidratación de iones que se presentan cuando una sal se disuelve en agua, o bien cuando se generan estructuras hidratadas de naturaleza cristalina (ordenada).



Fuerzas intermoleculares entre iones y moléculas no polares (disoluciones acuosas de electrolitos -sales en agua)

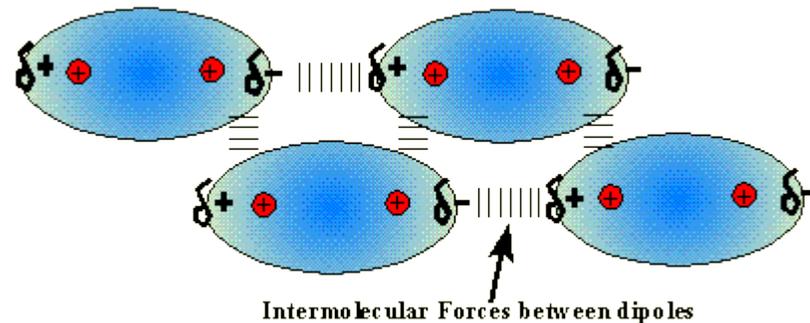
Cuando se disuelve de manera parcial una sal en una sustancia no polar se presenta un tipo de interacción débil que se clasifica dentro de las fuerzas de dispersión y que recibe el nombre de **fuerza de dispersión ion-dipolo inducido**.

Esta interacción se presenta entre los iones y los dipolos inducidos presentes en una molécula no polar. Es una fuerza que en general es de naturaleza débil pero permite explicar la disolución de ciertas sales en disolventes orgánicos.



La fuerza dipolo-dipolo

También llamada “fuerza dipolo-dipolo”. Es una fuerza de naturaleza electrostática que se forma cuando la parte parcialmente positiva de una molécula polar, interacciona con la parte parcialmente negativa de otra molécula polar.



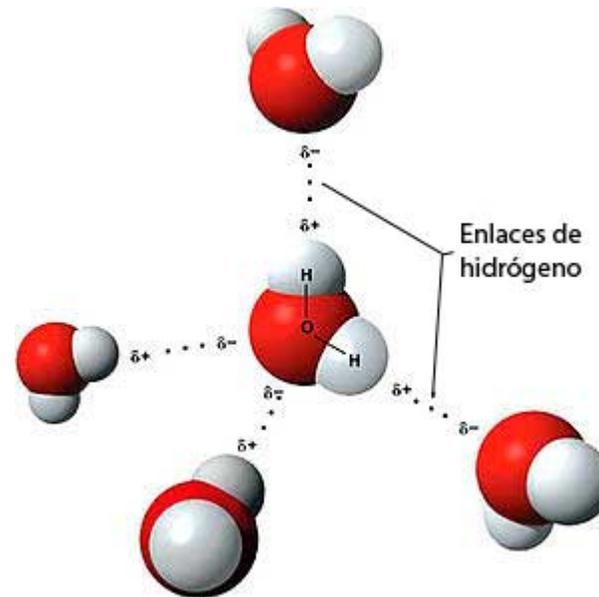
Es una fuerza intermolecular de intensidad media

El puente de hidrógeno.

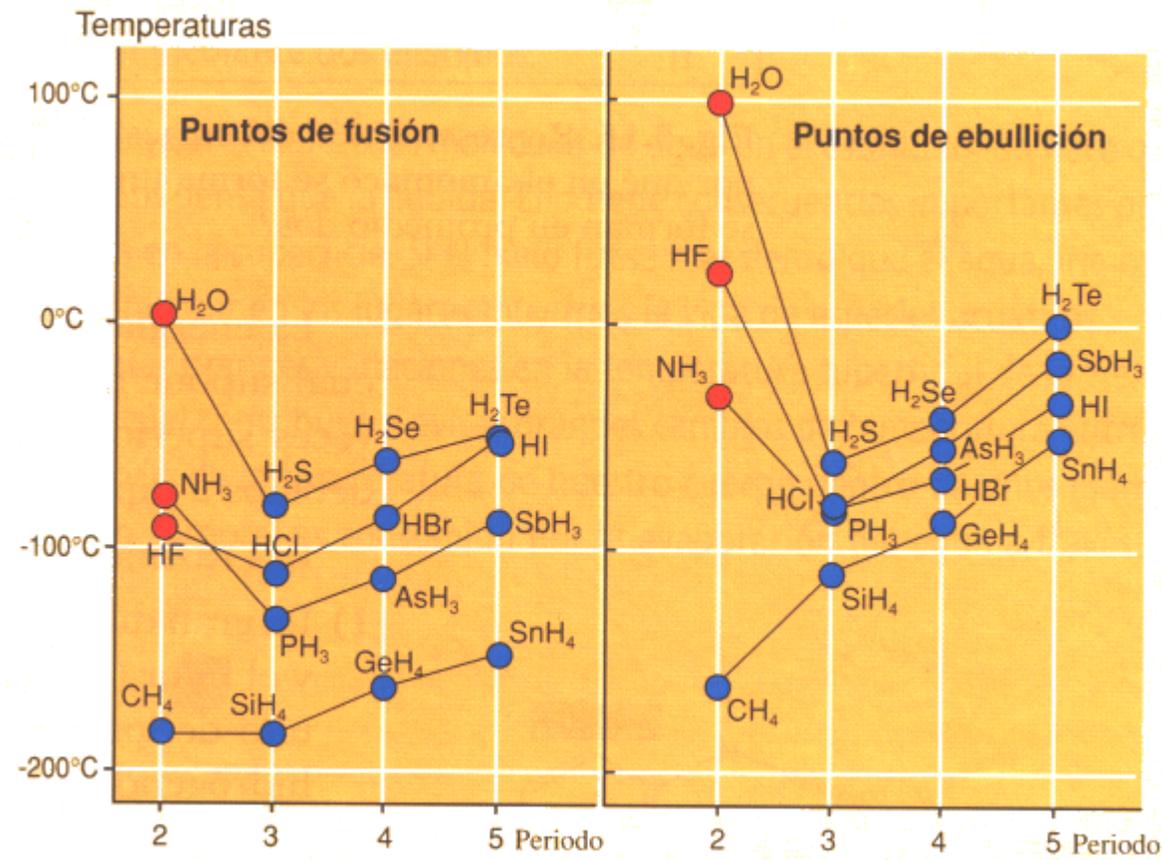
Es un tipo especial de interacción dipolo-dipolo, que sólo se presenta entre moléculas que contienen enlaces covalentes O-H, N-H y F-H en su estructura.

El puente de hidrógeno se forma cuando el átomo de hidrógeno de una molécula polar, que está unido por enlace covalente a un átomo altamente electronegativo (como F, O o N), es atraído electrostáticamente por un átomo altamente electronegativo de otra molécula.

En el caso de puentes de hidrógeno entre moléculas de agua, el átomo de hidrógeno de una molécula es atraído electrostáticamente por un átomo de oxígeno de otra molécula de agua.



El puente de hidrógeno se propuso como fuerza intermolecular para explicar el valor “inesperado” para el punto de ebullición del agua, con respecto a lo que se esperaba teóricamente para este compuesto.

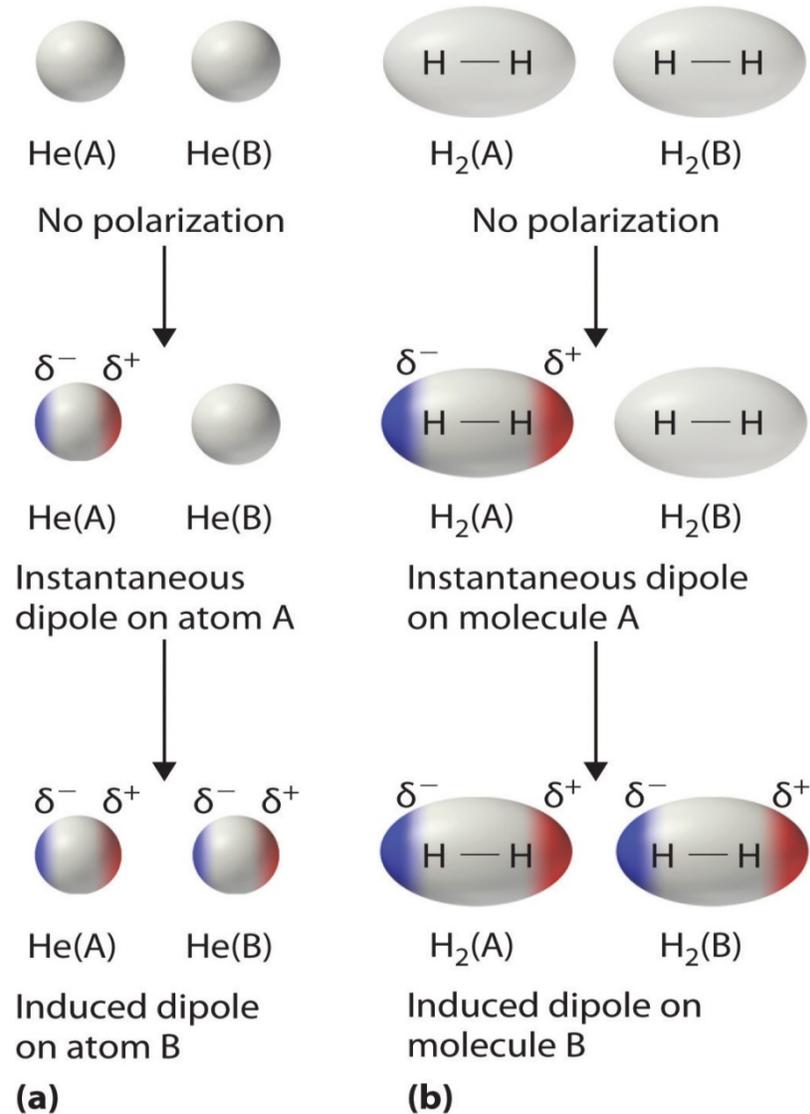


Elaboró M. en C. Miguel Angel Jaime Vasconcelos (2016)

Fuerzas de dispersión

Las fuerzas de dispersión son un conjunto de interacciones que **se presentan en todas las moléculas**, tanto polares como no polares, pero que adquieren importancia en la explicación de propiedades físicas de moléculas no polares y de las mezclas en las que participan.

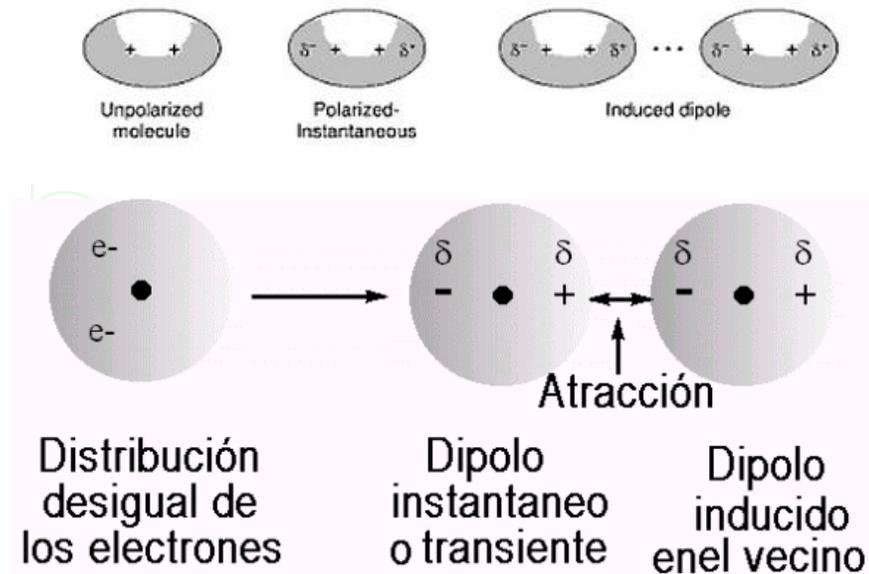
Fueron propuestas por el físico alemán Fritz London a partir de considerar el movimiento aleatorio de los electrones al interior de los átomos que integran a una molécula.



Este movimiento aleatorio de los electrones en un átomo, tiene como consecuencia la generación de “dipolos instantáneos” en el átomo y en toda la molécula de la cuál forma parte integral.

Los dipolos instantáneos que se han generado, tienen la capacidad de inducir dipolos en una zona dentro de la misma molécula, o bien en alguna molécula vecina.

La generación de dipolos inducidos es un evento que genera a su vez otros dipolos inducidos en muchas moléculas más; de la misma manera en que la caída de una ficha de dominó provoca la caída de otras fichas.



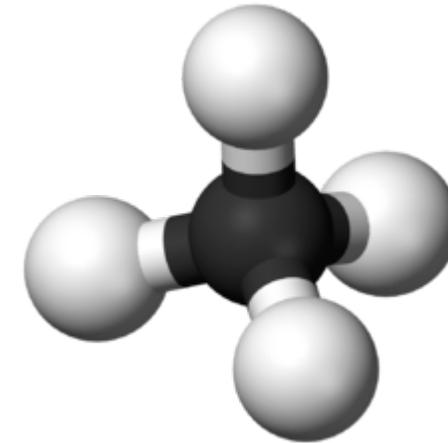
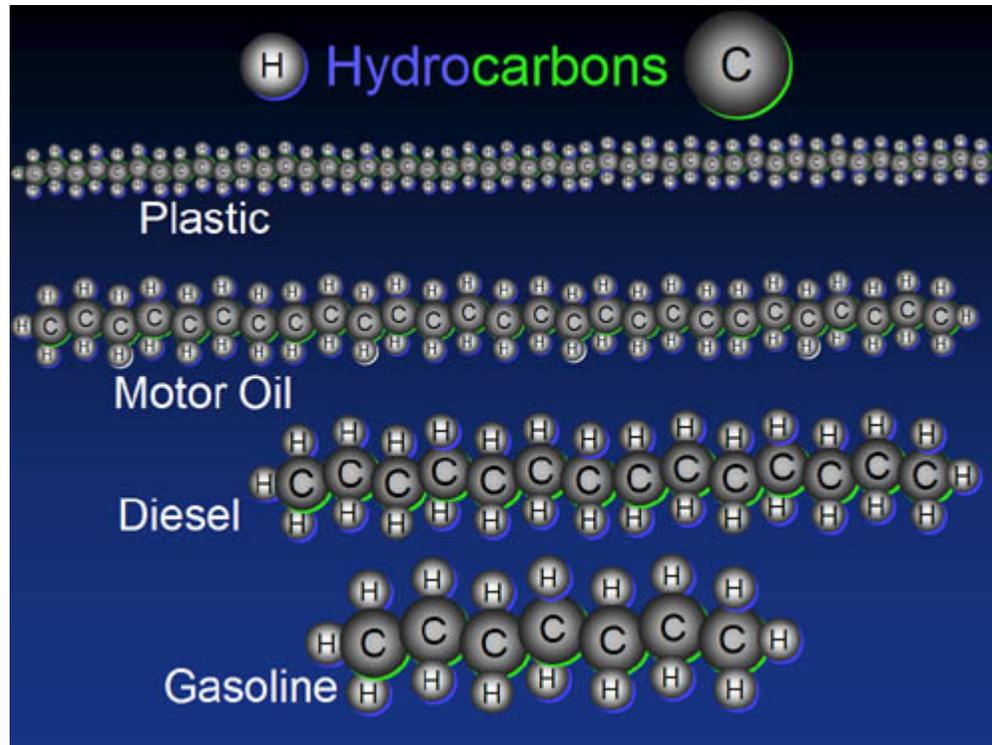
El número de dipolos instantáneos se incrementa al aumentar el número de electrones que hay en la molécula, lo cual significa que al existir más dipolos instantáneos las moléculas interactúan con más fuerza.

De esta manera, si una molécula está formada por muchos átomos o por átomos muy pesados, posee muchos electrones y tiene la posibilidad de generar muchos **dipolos instantáneos** que producirán a su vez muchos más **dipolos inducidos** y que permitirán a esta molécula tener un gran número de interacciones con otras moléculas.

Es decir, **las moléculas más pesadas generan un mayor número de fuerzas de dispersión entre ellas.**



Esta serie de eventos explica la regla empírica de laboratorio que afirma de forma general que *las propiedades físicas (punto de ebullición, punto de fusión, densidad, viscosidad, etc) de una familia de sustancias aumentan su valor al incrementarse el “peso molecular”*.



Plot of Boiling and Melting Points of Linear Alkanes vs. Number of Carbon Atoms in Alkane Chains

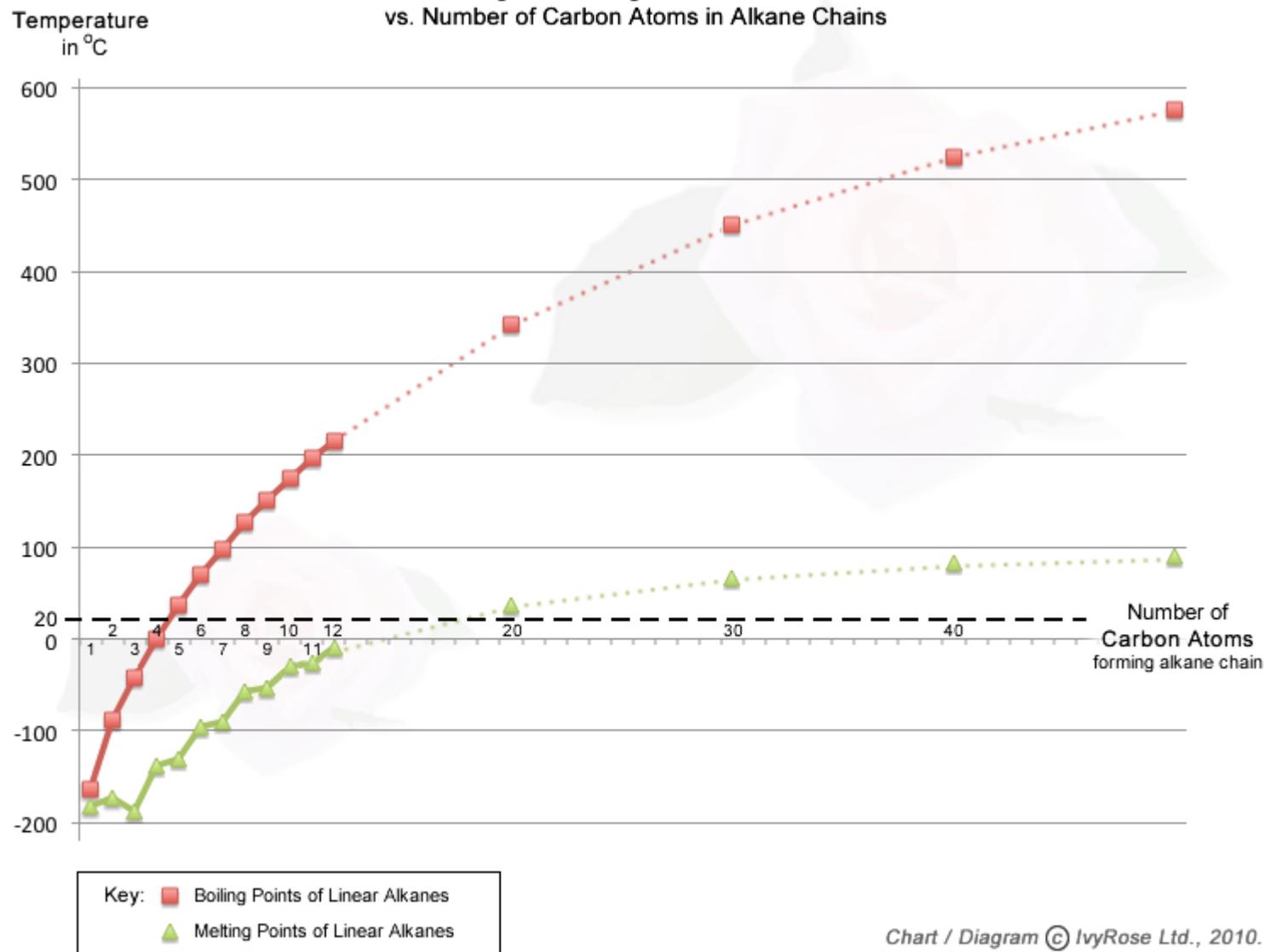


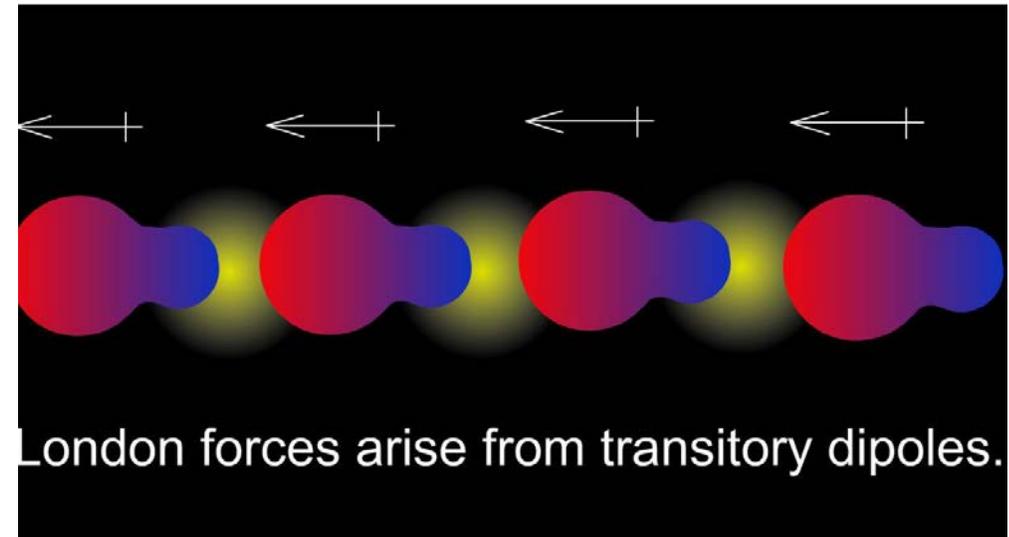
Chart / Diagram © IvyRose Ltd., 2010.

<http://www.ivy-rose.co.uk/Chemistry/Organic/Boiling-Points-of-Alkanes.php>

Las fuerzas de dispersión se presentan en todas las moléculas y mezclas en las que estas participen. Dependiendo del tipo de moléculas y de las interacciones entre ellas, es que se clasifican las fuerzas de dispersión.

Los tres tipos de fuerzas de dispersión son:

- Fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido
- Fuerzas dipolo-dipolo inducido
- Fuerzas ion-dipolo inducido



Identificación del tipo de fuerzas intermoleculares

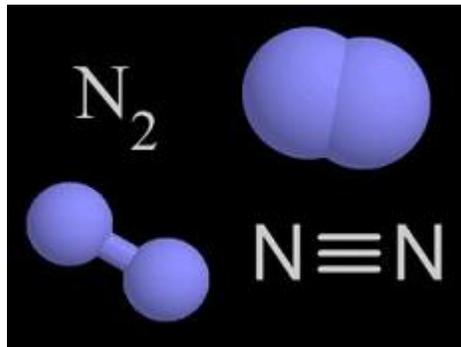
La identificación de las fuerzas intermoleculares que están presentes entre las entidades que integran a una sustancia o a una mezcla comienza con el reconocimiento de la naturaleza de estas entidades participantes (moléculas o iones) en función de su naturaleza y su estructura.

- Las moléculas polares interactúan entre sí a través de fuerzas dipolo-dipolo o bien a través de puentes de hidrógeno.
- Las moléculas no polares interactúan entre sí a través de fuerzas de dispersión dipolo inducido-dipolo inducido.
- Las moléculas polares y no polares interactúan entre sí a través de fuerzas dipolo-dipolo inducido.
- Las moléculas polares y los iones interactúan mediante fuerzas ion-dipolo.
- Las moléculas no polares y los iones interactúan a través de fuerzas ion-dipolo inducido.

Ejemplo:

Sustancia: Nitrógeno líquido (N_2)

Estructura de la molécula:



Polaridad de la molécula: Molécula no polar



En una muestra de nitrógeno líquido hay desde trillones a cuatrillones de **moléculas no polares de N_2 interaccionando** entre sí a través de:

Fuerzas dipolo inducido-dipolo inducido