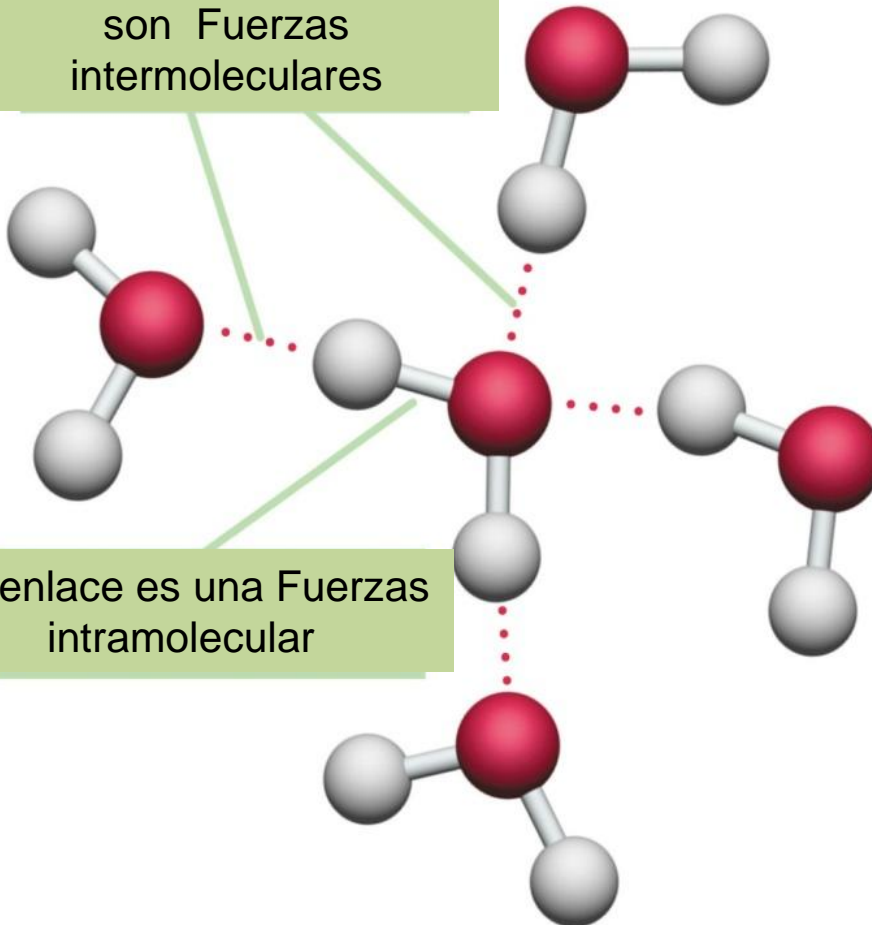


# Propiedades Físicas Estructuras Moleculares

Las **Fuerzas Intermoleculares** son fuerzas de atracción entre las moléculas, y son las principales responsables de las propiedades macroscópicas de las moléculas

Fuerzas entre moléculas son Fuerzas intermoleculares



Un enlace es una Fuerzas intramolecular

## Factores:

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

Estas fuerzas pueden ser atractivas o repulsivas

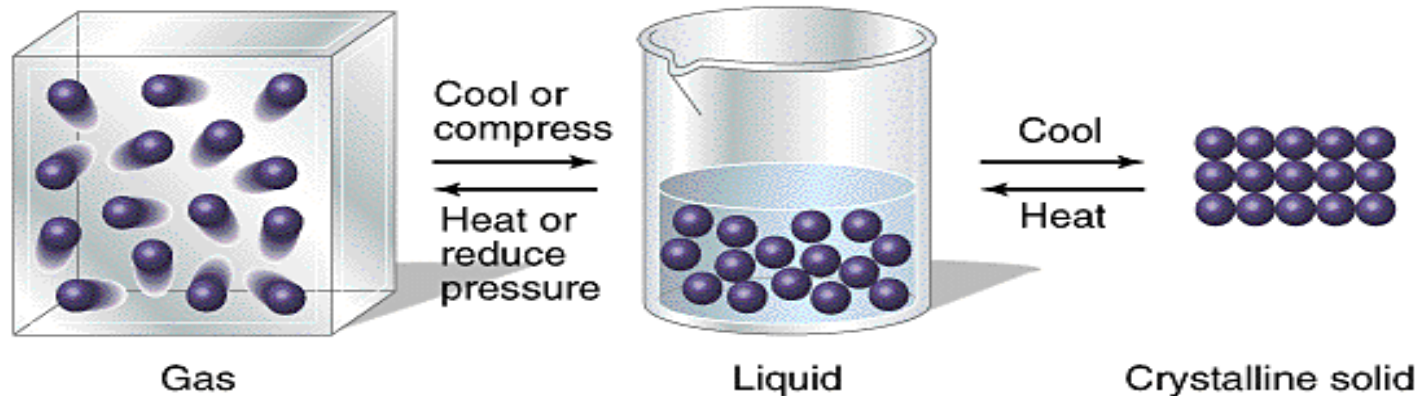
# Propiedades Físicas

Punto de fusión y ebullición

Solubilidad

Densidad

Viscosidad



Gas

Liquid

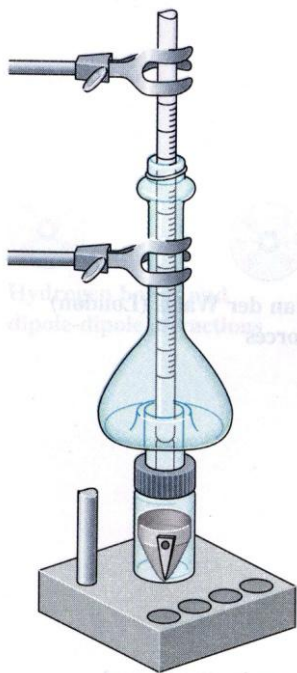
Crystalline solid

Desorden total.  
Hay mucha distancia entre una molecula y otra.

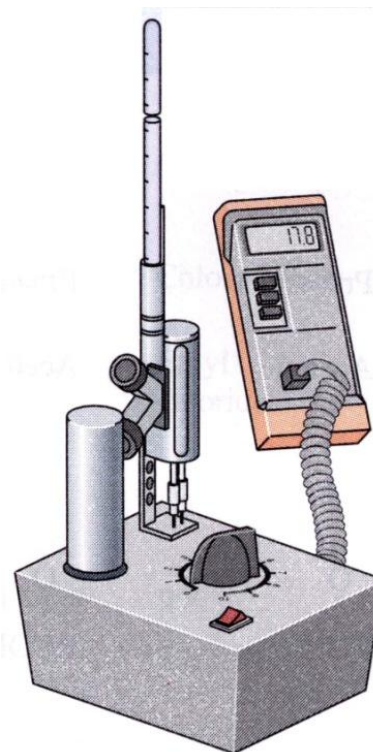
Existe un cierto grado de desorden.  
Hay movimiento relativo entre una molecula y otra.  
Las moleculas estan relativamente cercas

Hay una arreglo y las moleculas estan en posiciones fijas y muy cercanas entre ellas.

# Punto de Ebullición

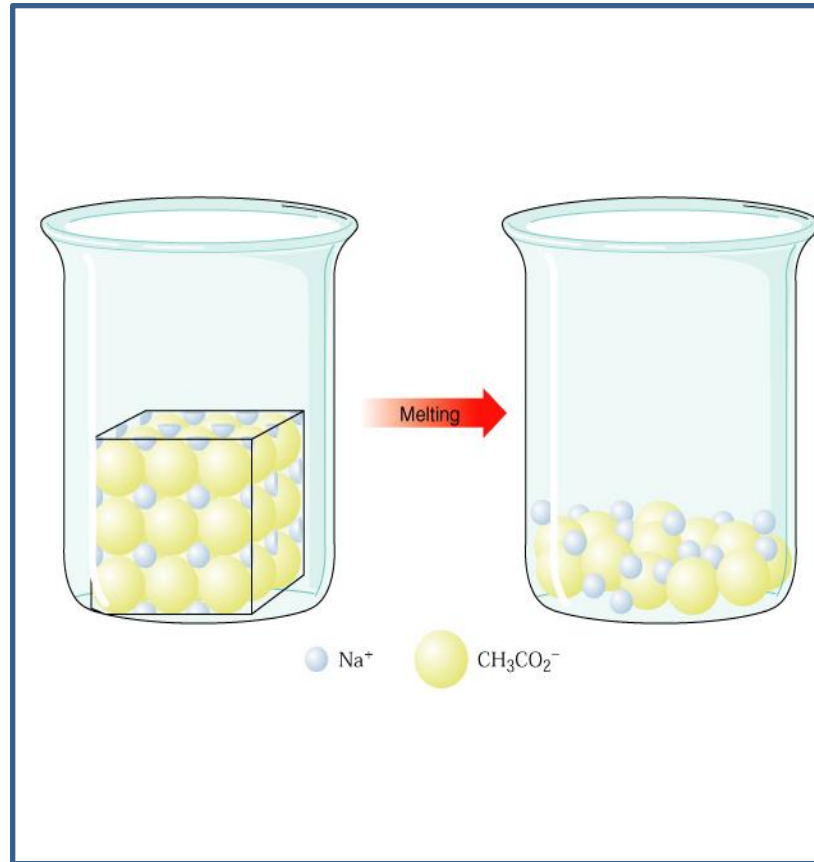


# Punto de Fusión



# Fuerzas Intermoleculares de atracción

## Fuerzas electrostaticas. Ion-ion

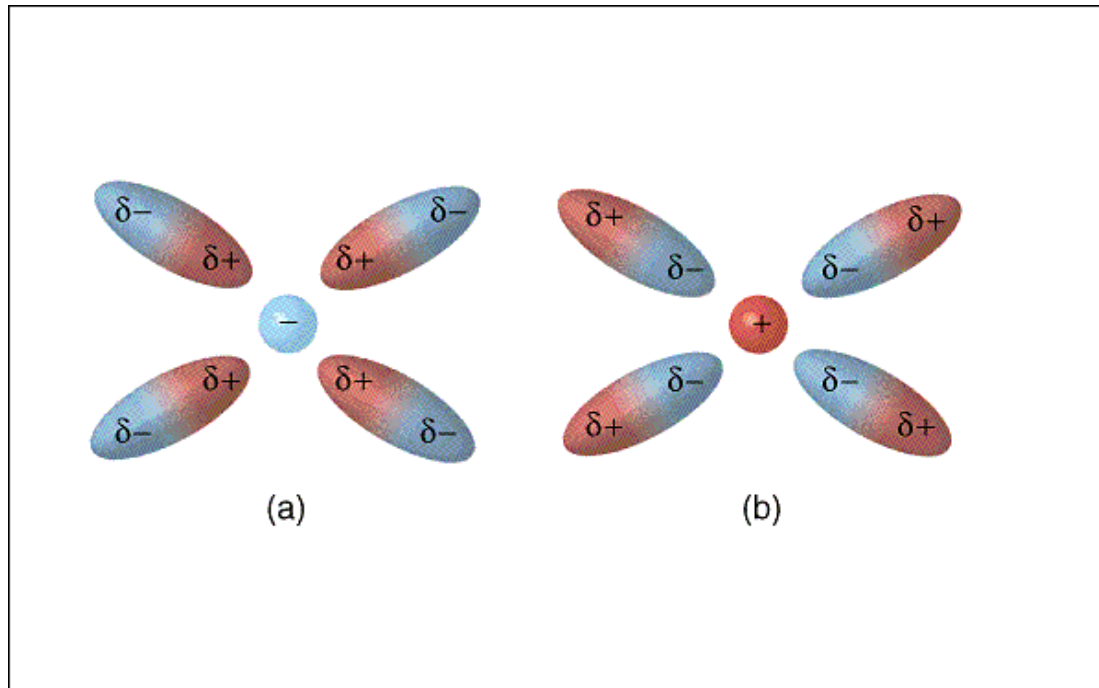


Pf > 350 °C

**ion-ion**, Se explican por interacciones electrostáticas positivas y negativas de los iones.  
Es el enlaces intermoleculares más fuertes

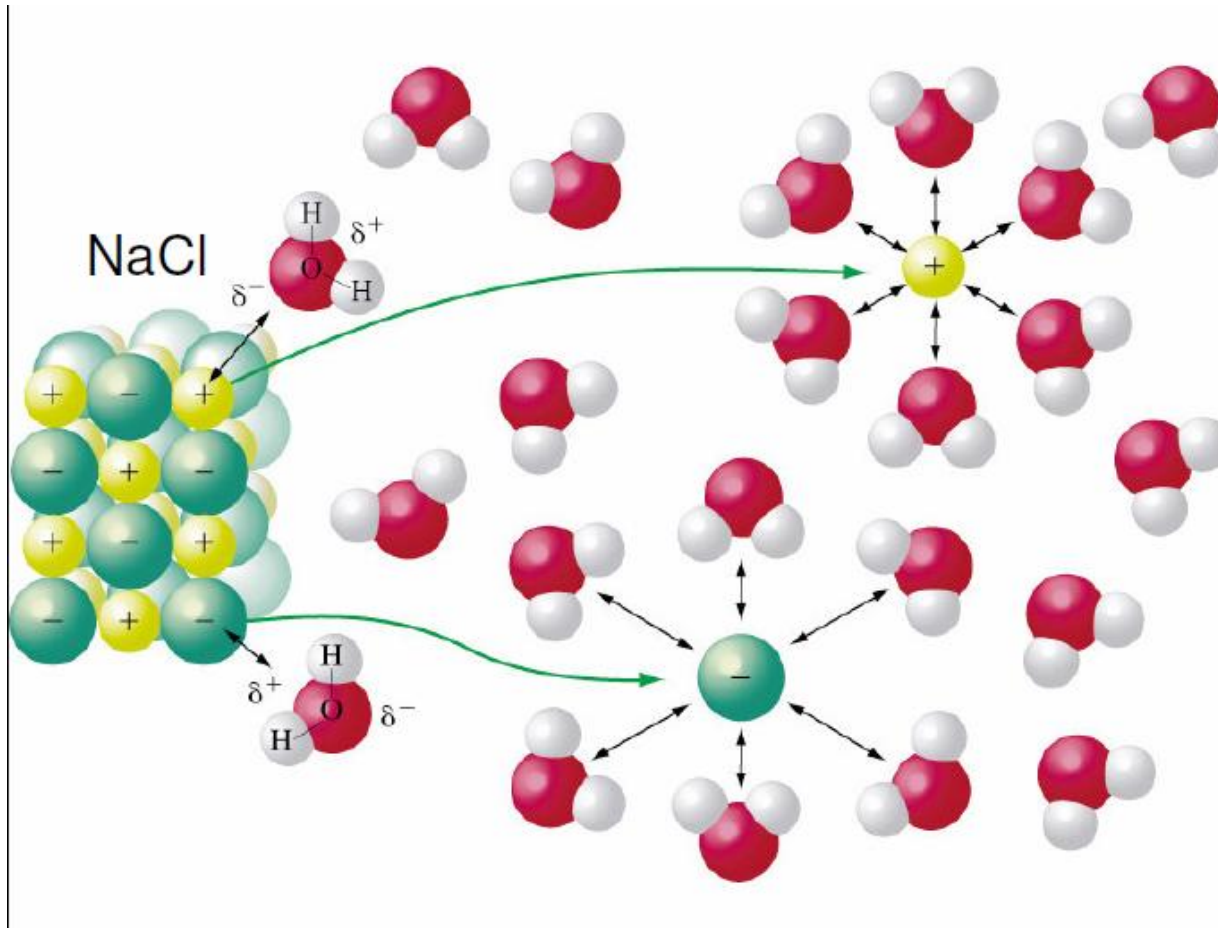
# Fuerzas Intermoleculares de atracción

## Fuerzas Ión - Dipolo



**ion-dipolo**, Se explican por interacciones electrostáticas.  
Están entre los enlaces intermoleculares más fuertes

# Fuerzas Ión - Dipolo

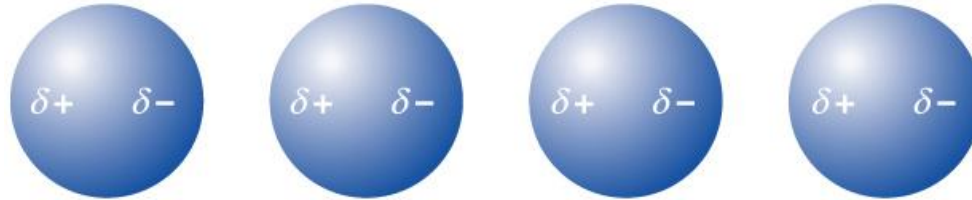


Esta fuerza parece cuando por ejemplo, se disuelven compuestos iónicos (NaCl) en H<sub>2</sub>O. Cuando se disuelve el NaCl en H<sub>2</sub>O, esta actúa manteniendo los iones separados.

Por el contrario el CCl<sub>4</sub>, no polar, no participa en interacciones ion-dipolo.

# Fuerzas Intermoleculares de atracción

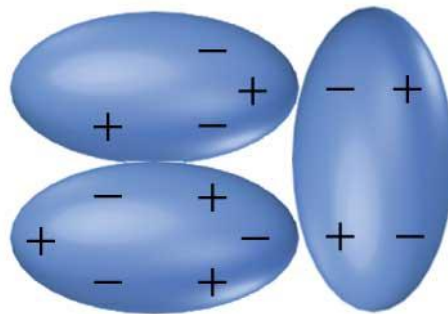
## Moléculas No Polares Fuerzas de Van Der Waals



Un momento dipolar temporal en una molécula puede inducir a un momento dipolar temporal en una molécula vecina. Una interacción atractiva dipolo-dipolo puede durar sólo una fracción de segundo.



distribución al azar de los dipolos temporales cuando las moléculas están separadas



dipolos temporales complementarios cuando las moléculas están en contacto

# Propiedades Físicas Estructuras Moleculares

## Moléculas No Polares Fuerzas de Van Der Waals, Polarizabilidad

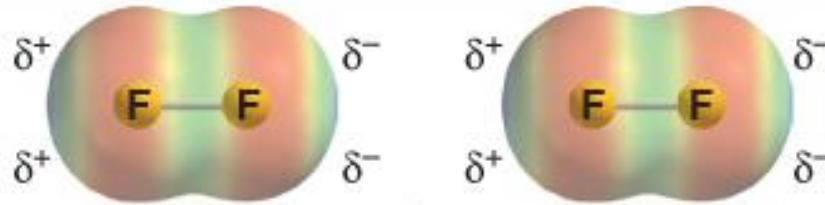
- 1) La *capacidad de los electrones a responder a un campo magnético cambiante*. Es decir, es la facilidad con la que una fuerza externa distorsiona la distribución de cargas en una molécula
- 2) A mayor polarizabilidad mayor es la fuerza de London.
- 3) La polarizabilidad relativa depende de que tan fuerte o sueltos estén los electrones unidos a los átomos
- 4) La polarizabilidad incrementa con el orden  $F < Cl < Br < I$ .
- 5) Los átomos con e- desapareados son mucho mas polarizables que aquellos con pares enlazantes.



# Propiedades Físicas Estructuras Moleculares

## Moléculas Polares Fuerzas de Van Der Waals, Polarizabilidad

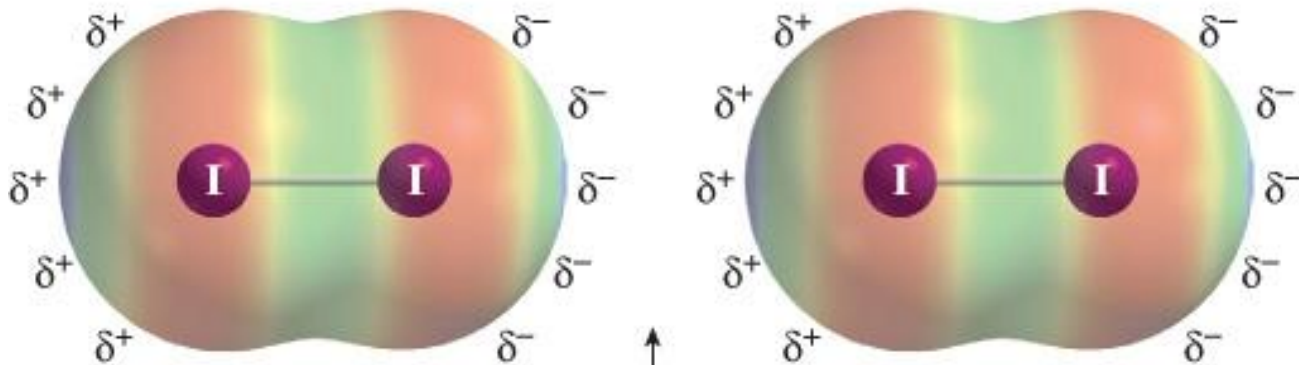
Efecto de la polizabilidad sobre las Interacciones Intermoleculares



Atomos pequeño menos polarizable



Ferza de atraccion DEBIL

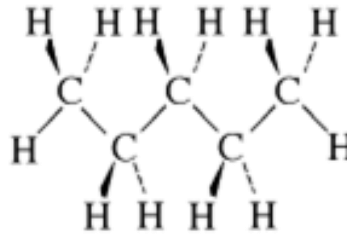
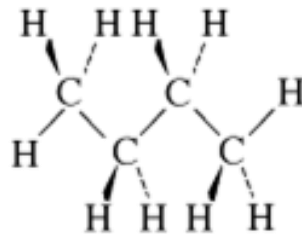
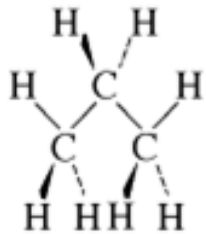
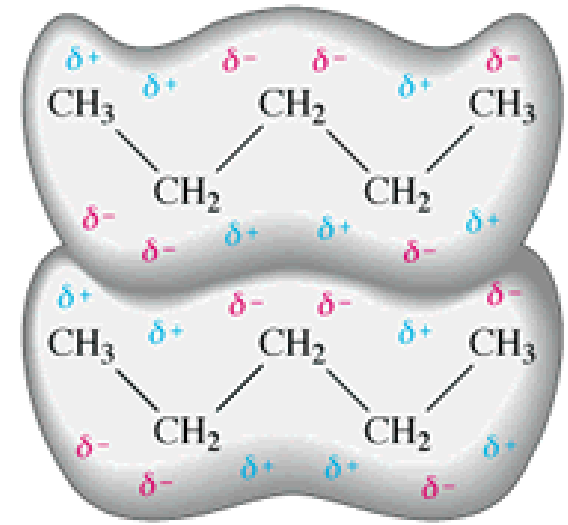
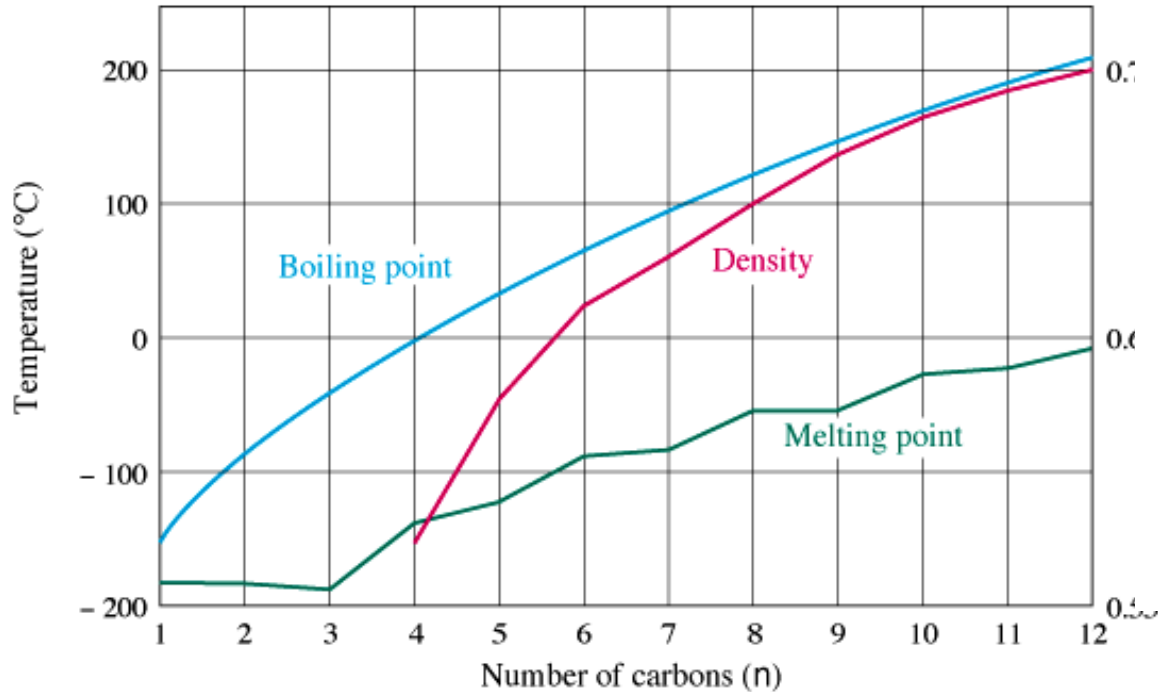


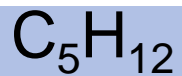
Atomos grandes son muy polarizables

Fuerza de atraccion FUERTE

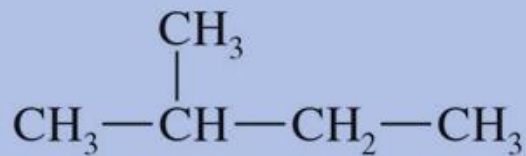
# Propiedades Físicas Estructuras Moleculares

## Moléculas No Polares Alcanos

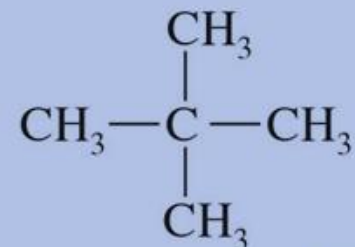




*n*-pentano,  $p_e = 36^\circ\text{C}$



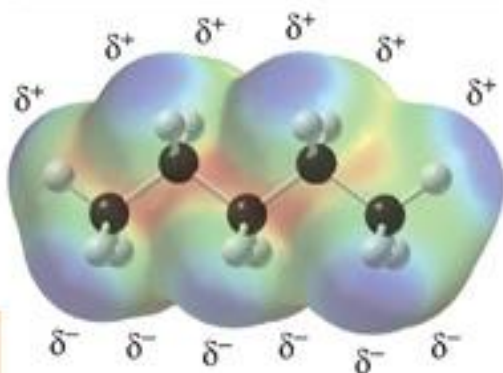
isopentano,  $p_e = 28^\circ\text{C}$



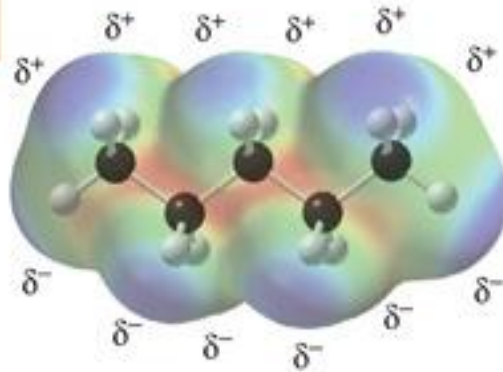
neopentano,  $p_e = 10^\circ\text{C}$

long, cylindrical molecule

Example:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$   
pentane

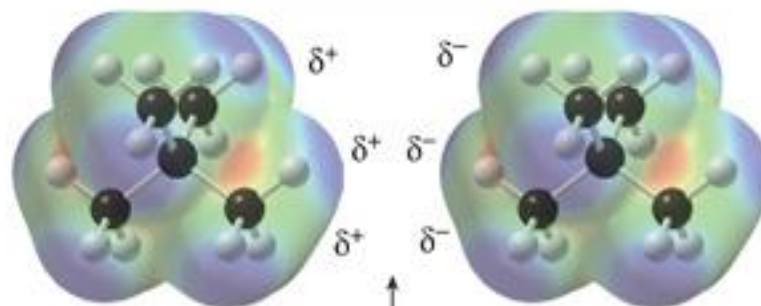
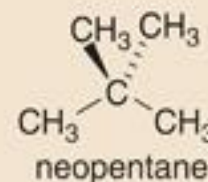


larger surface area  
stronger van der Waals  
interactions



compact, spherical molecule

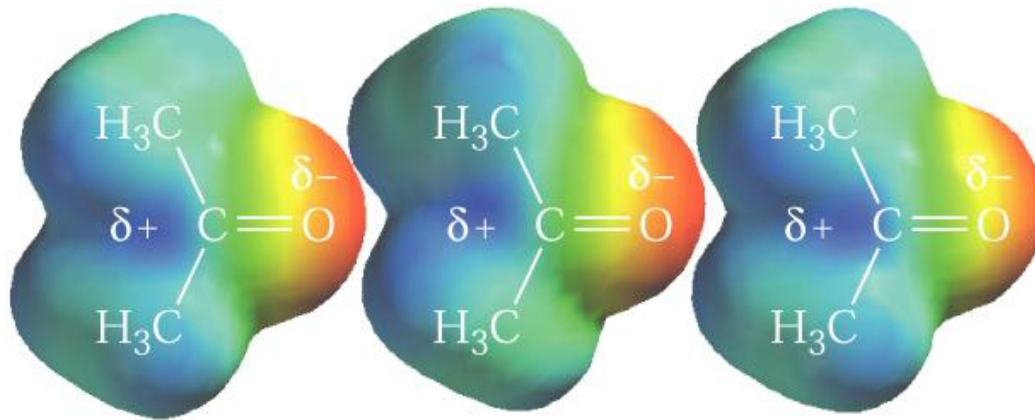
Example:



smaller surface area  
weaker van der Waals  
interactions

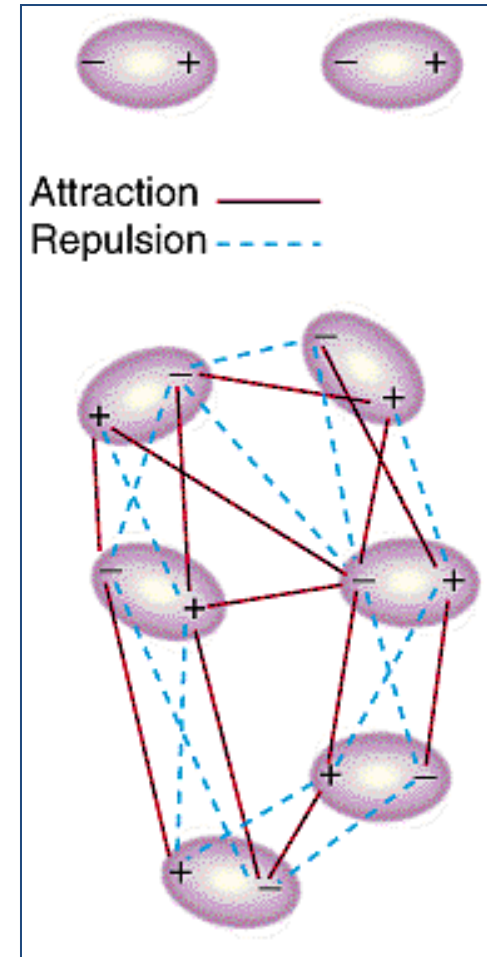
# Fuerzas Intermoleculares de atracción

## Moléculas Polares Dipolo Dipolo



**dipolo-dipolo: son las fuerzas de atracción entre moléculas polares.**

Las interacciones dipolo-dipolo son el resultado de la aproximación de dos moléculas polares. Si sus extremos positivo y negativo se acercan, la interacción es atractiva. Si se acercan dos extremos negativos o dos extremos positivos, la interacción es repulsiva.

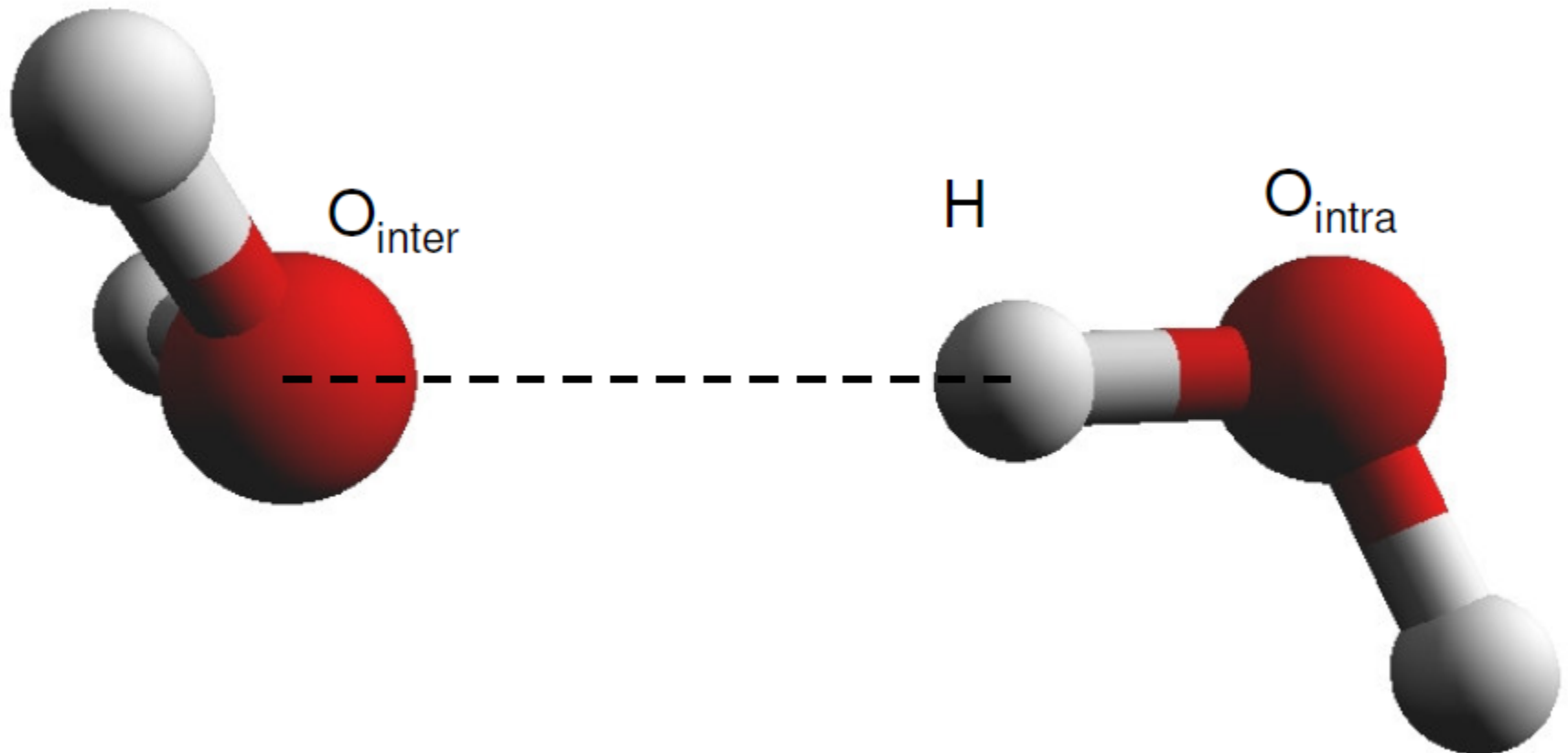
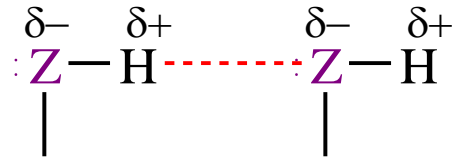


# Fuerzas Intermoleculares de atracción

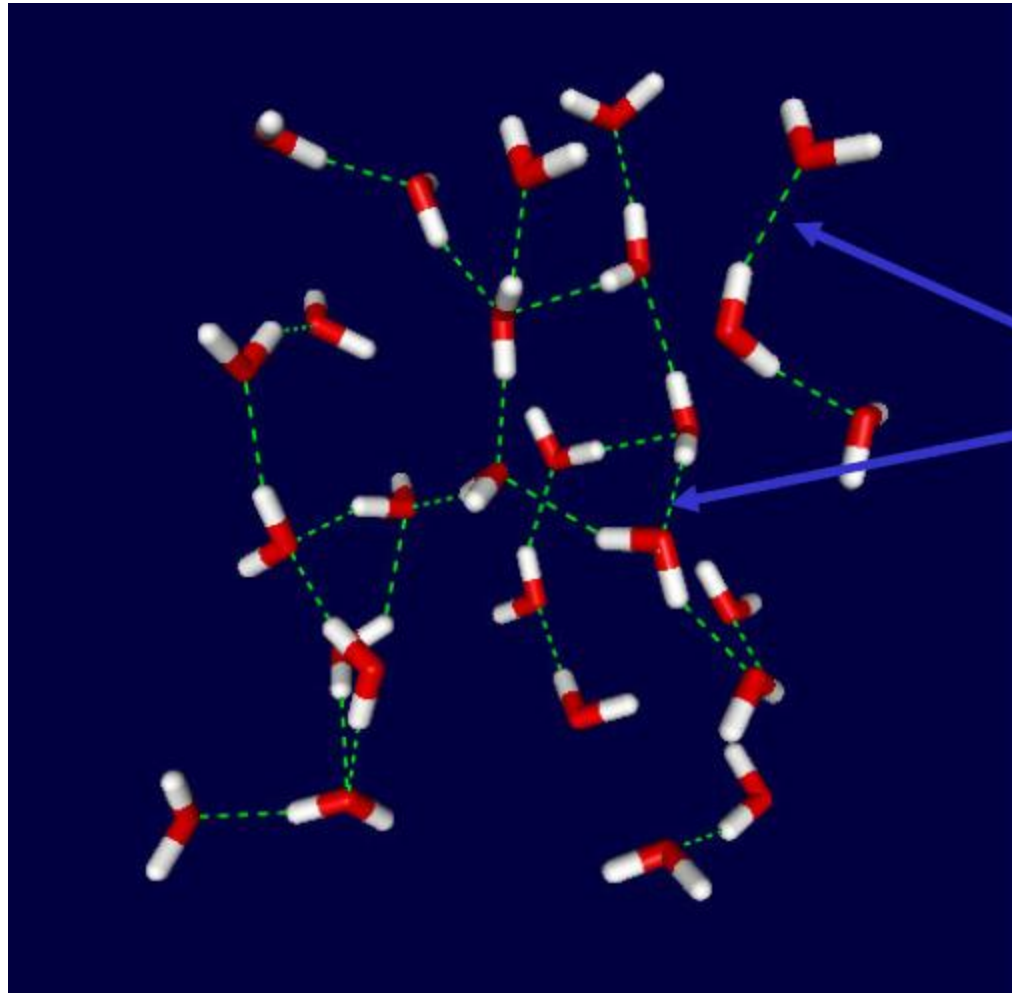
## Puente de Hidrógeno

Se forma entre un enlace polar, como N-H, O-H o F-H y un átomo electronegativo, O, N o F.

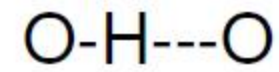
El puente de hidrógeno esta señalado por los puntos rojos



# Fuerzas Intermoleculares de atracción



Enlaces de  
hidrógeno

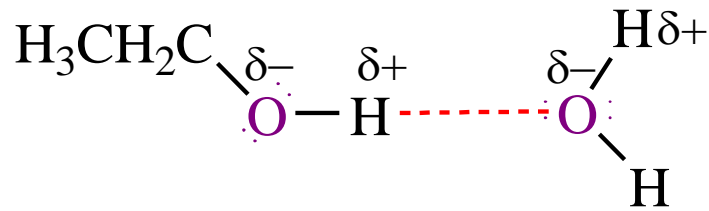


El Puente de Hidrógeno es responsable del elevado punto de ebullición del agua

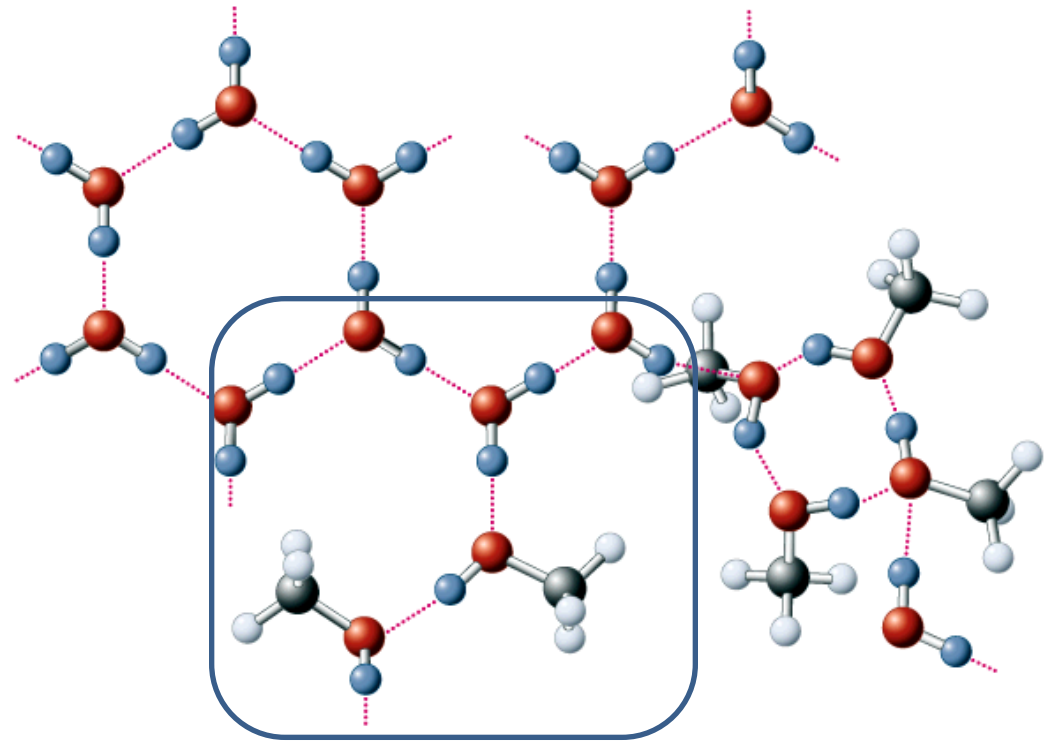


# Fuerzas Intermoleculares de atracción

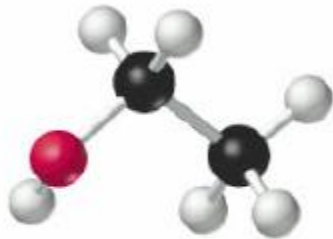
## Puente de Hidrógeno



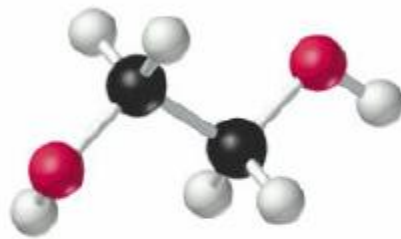
Solubilidad del Metanol en agua



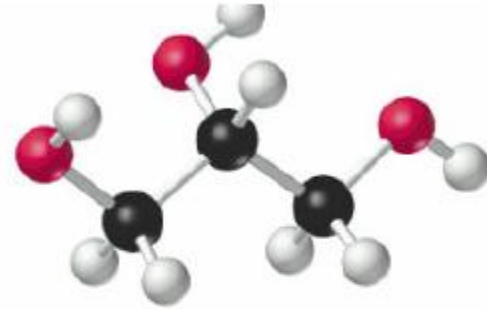
## Aumento de viscosidad



Ethyl alcohol  
(ethanol)  
at 20 °C: 1.20 cP



Ethylene glycol  
(1,2-ethanediol)  
at 20 °C: 19.9 cP



Glycerol  
(1,2,3-propanetriol)  
at 20 °C: 1490 cP



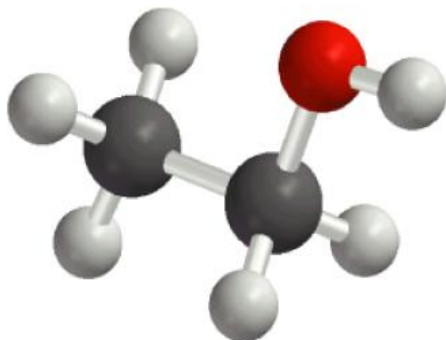
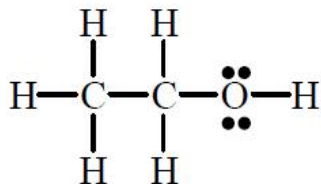
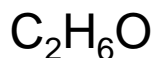
Centipoise,  $1\text{N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2} = 10\text{P}$



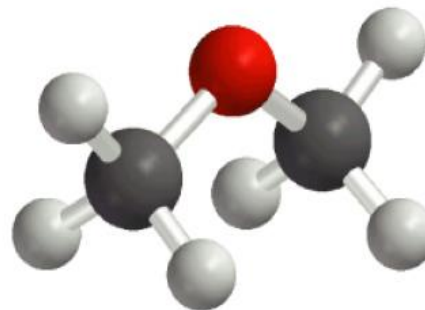
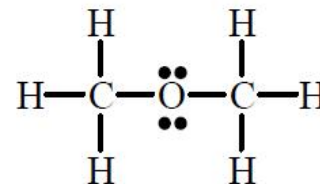
# Fuerzas Intermoleculares de atracción

## Puente de Hidrógeno

Ethyl alcohol



Dimethyl ether



Boiling point, °C<sup>a</sup>

78.5

-24.9

Melting point, °C

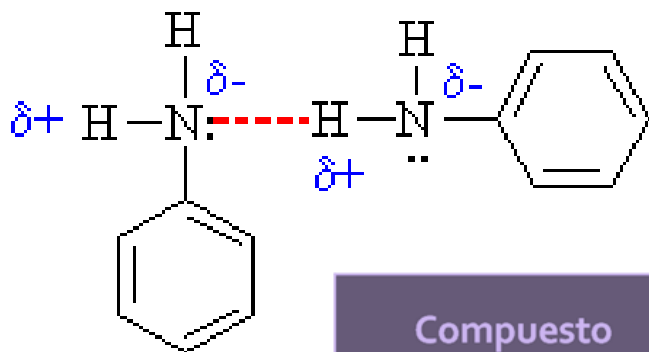
-117.3

-138

La presencia de enlace de hidrógeno aumentará el punto de ebullición del compuesto porque se necesitará más energía para romper esta interacción y evaporar el compuesto.

# Fuerzas Intermoleculares de atracción

## Puente de Hidrógeno en aminas

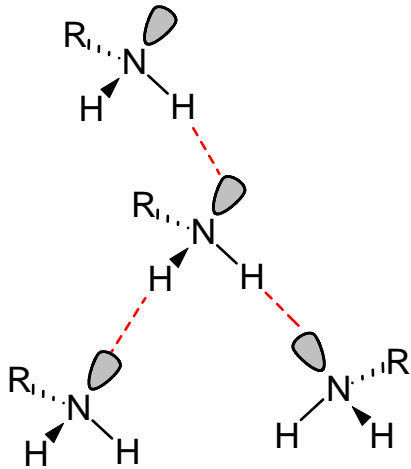


La naturaleza polar del enlace N-H provoca la formación de puentes de hidrógeno entre las moléculas de las aminas.  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$   $\text{Peb. } -42^\circ$

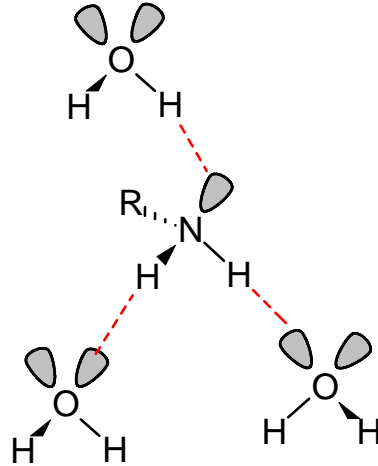
Compuesto	Tipo	Peso molecular	Punto de ebullición (°C)
$(\text{CH}_3)_3\text{N}$	Amina terciaria	59	3
$\text{CH}_3\text{-NH-CH}_2\text{-CH}_3$	Amina secundaria	59	37
$\text{CH}_3\text{-O-CH}_2\text{-CH}_3$	Éter	60	8
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-NH}_2$	Amina primaria	59	48
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-OH}$	Alcohol	60	97

# Fuerzas Intermoleculares de atracción

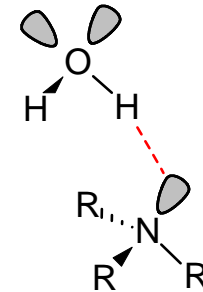
## Puente de Hidrógeno en aminas



Asociación por puente de hidrógeno de aminas 1rias



Puente de hidrógeno intramolecular entre una amina 1ria y el agua

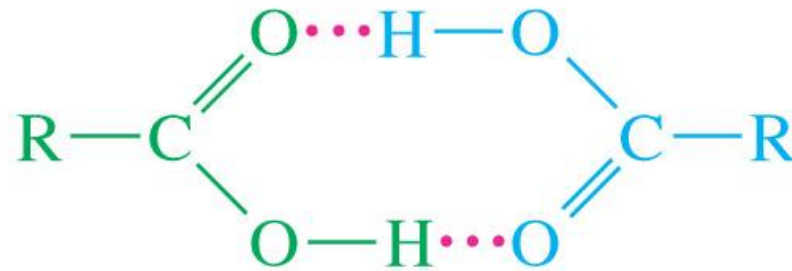


Acepción de un protón mediante un enlace de hidrógeno entre el agua y una amina 3ria.

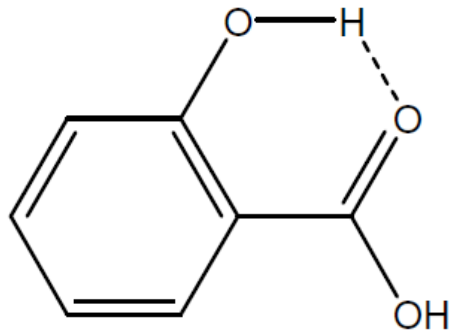
El enlace de hidrógeno O-H es más fuerte que el enlace de hidrógeno N-H.

# Fuerzas Intermoleculares de atracción

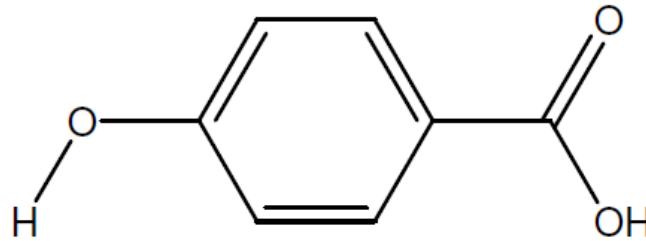
## Puente de Hidrógeno en ácidos carboxílicos



Puentes de hidrógeno intra- e intermoleculares



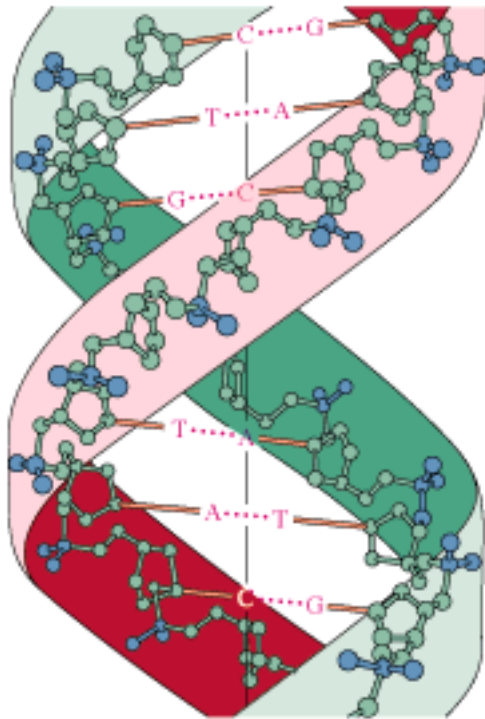
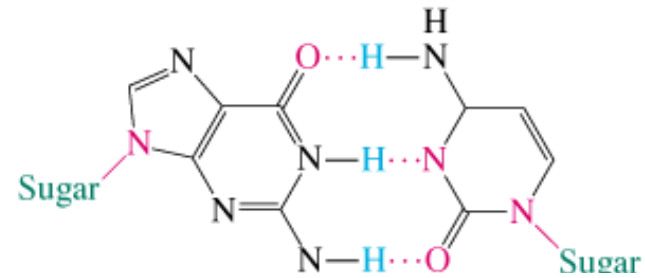
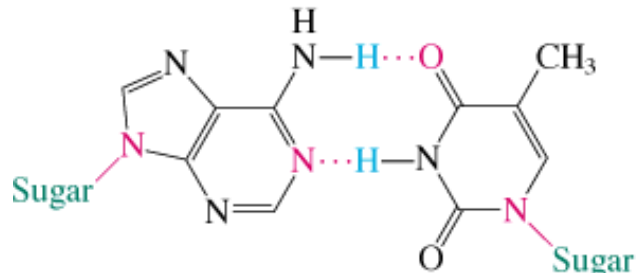
Ácido o-hidroxi benzoico  
(ácido salicílico)  
 $P_f=158^\circ\text{C}$



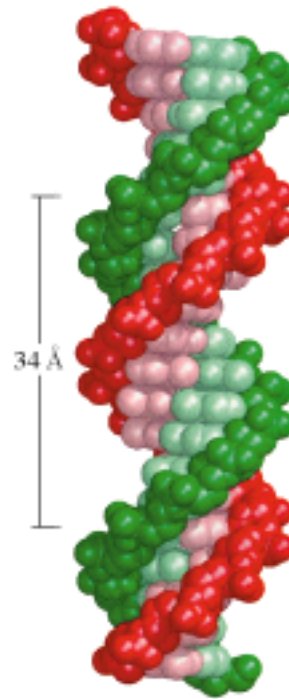
Ácido p-hidroxi benzoico  
 $P_f=215^\circ\text{C}$

# Fuerzas Intermoleculares en Bioquímica

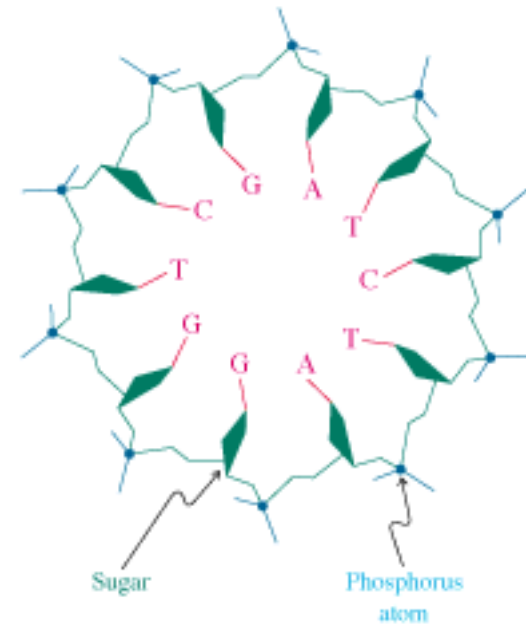
## Puente de Hidrógeno en bases nitrogenadas



A



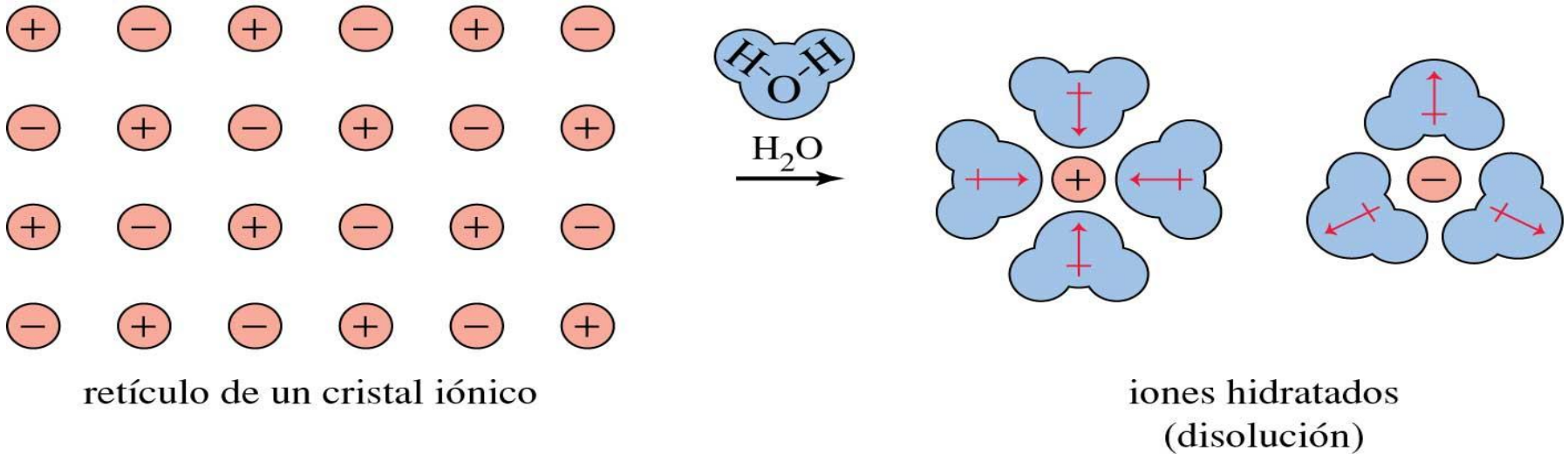
B



C

# Solubilidad. Soluto polar en disolvente polar (se disuelve).

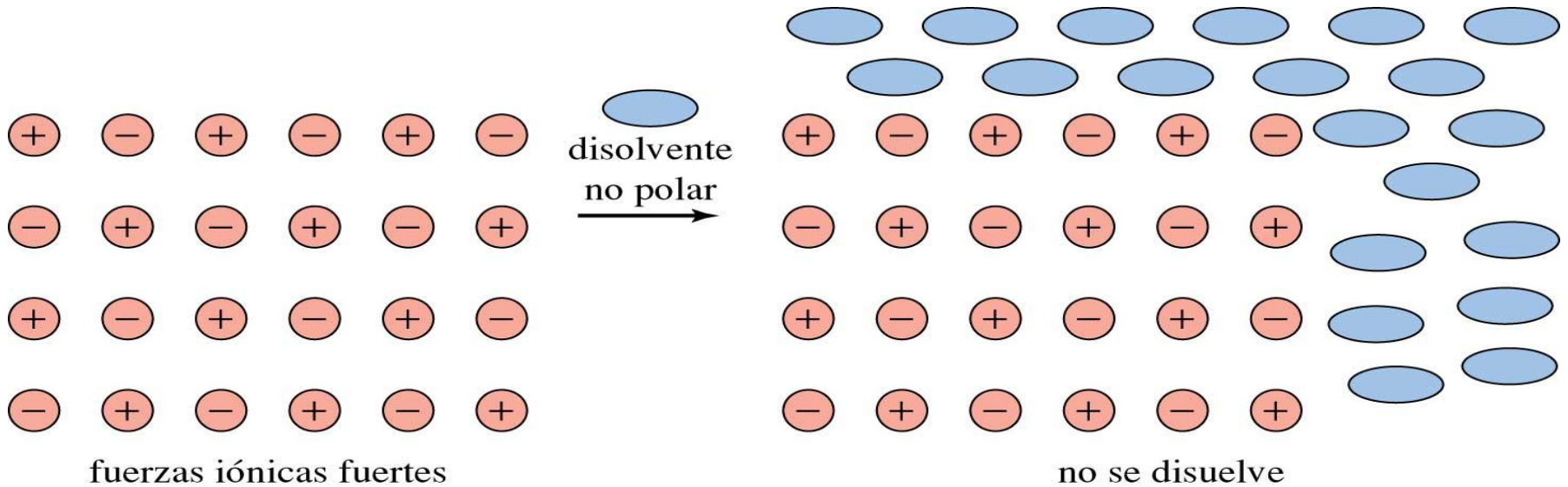
La hidratación de los iones sodio y cloruro por moléculas de agua vence la energía reticular del cloruro de sodio. La sal se disuelve.



Las moléculas de agua rodearán a los iones de sodio y cloruro disolviéndolos de forma efectiva.

# Solubilidad. Sólido polar en disolvente No polar (No se disuelve).

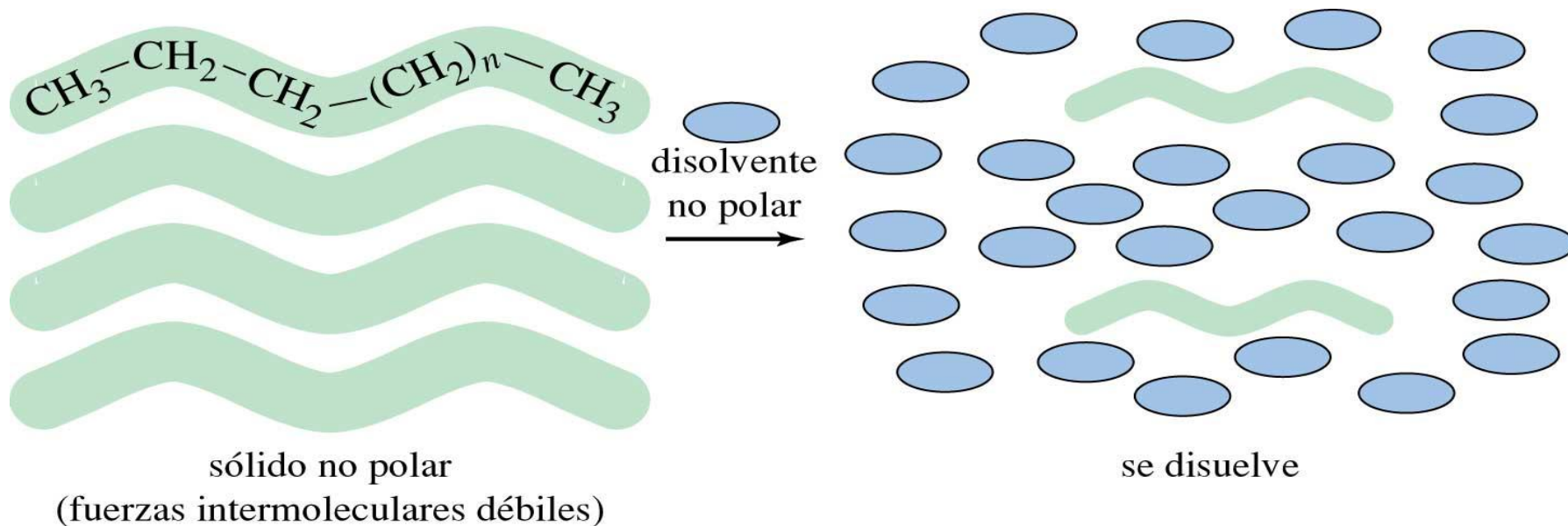
Las atracciones "intermoleculares" de las sustancias polares son más fuertes que las atracciones ejercidas por moléculas de disolventes no polares. Es decir, una sustancia polar no se disuelve en un disolvente no polar.



El disolvente no puede interrumpir la interacción intermolecular del soluto, por lo que el sólido no se disolverá en el disolvente.

# Solubilidad. Sólido No polar en disolvente No polar (se disuelve).

Las atracciones intermoleculares débiles de una sustancia no polar son vencidas por las atracciones débiles ejercidas por un disolvente no polar. La sustancia no polar se disuelve.

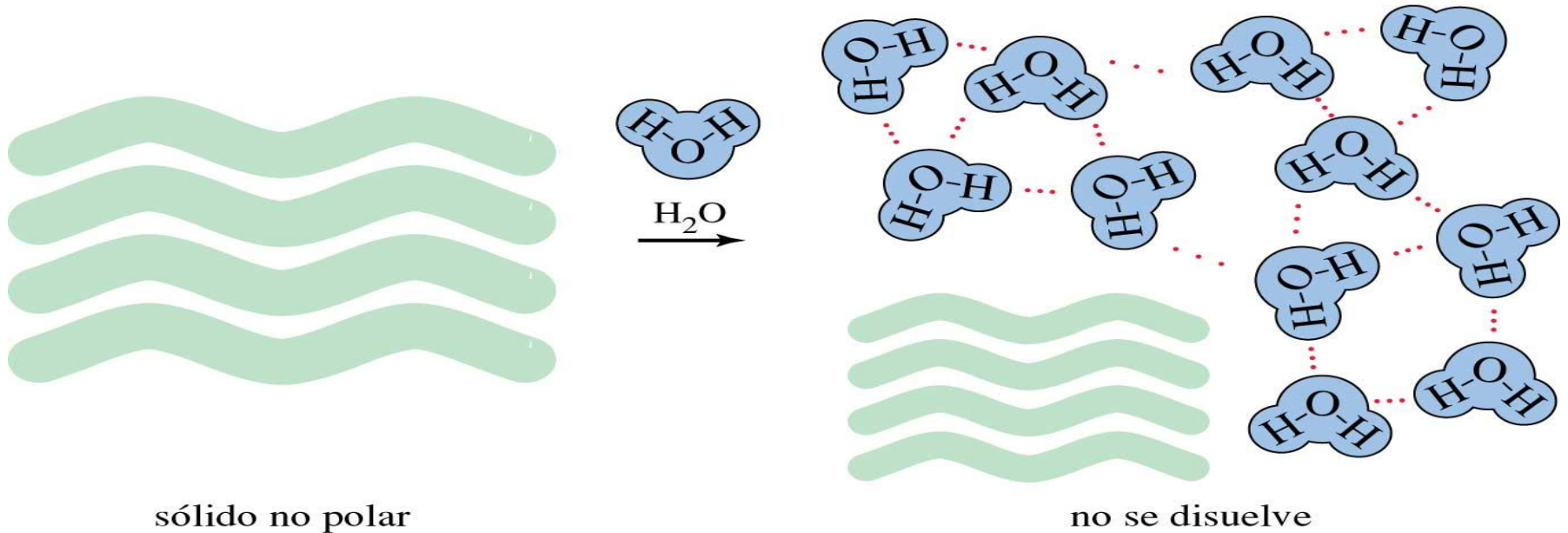


El disolvente puede interactuar con las moléculas del soluto, separándolas y rodeándolas. Esto hace que el soluto se disuelva en el solvente



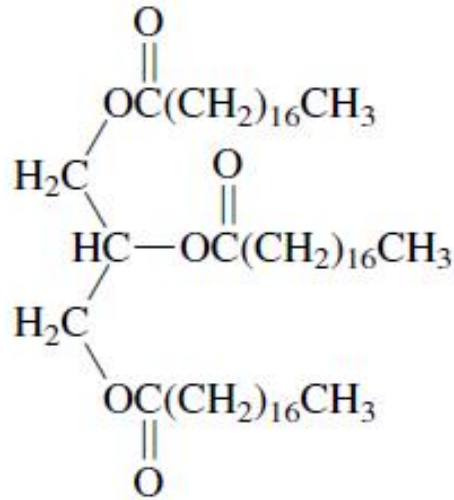
# Solubilidad. Sólido No polar en disolvente polar (No se disuelve).

Para que una molécula no polar se disolviera en agua debería romper los enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua, por lo tanto, las sustancias no polares no se disuelven en agua.



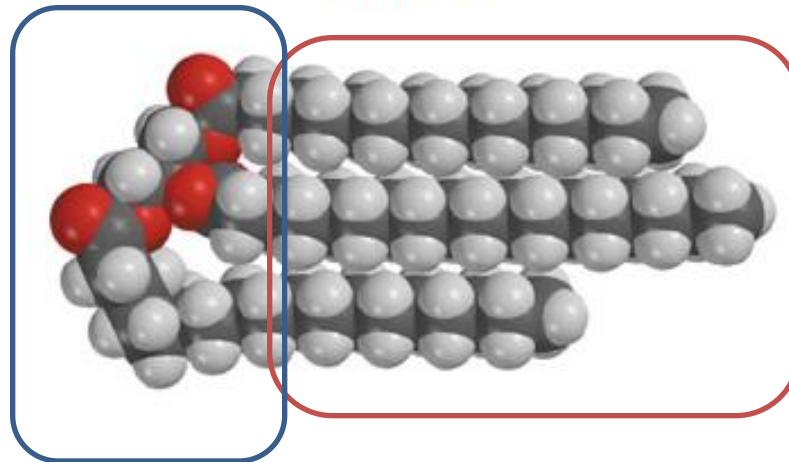
El enlace de hidrógeno es una interacción mucho más fuerte que la interacción entre un soluto no polar y el agua, por lo que es difícil que el soluto destruya las moléculas de agua. Por tanto, un soluto no polar no se disolverá en agua.

# Solubilidad. Solutos No polares en Membranas Celulares (se disuelve).



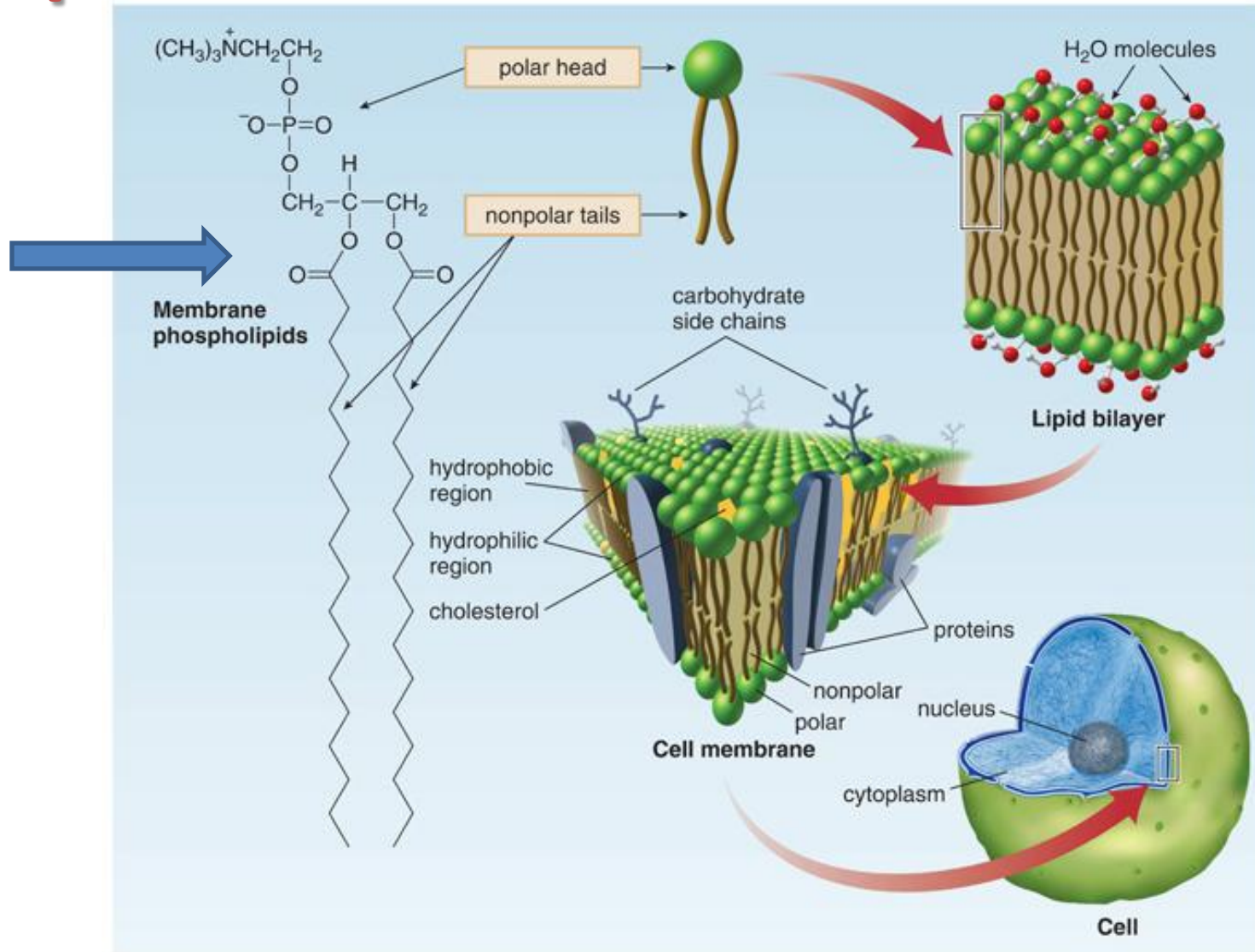
Tristearin (mp 72°C)

Porción Hidrofilica



Porción Hidrofobica

# Grupo Carboxilo Esteres en Naturaleza

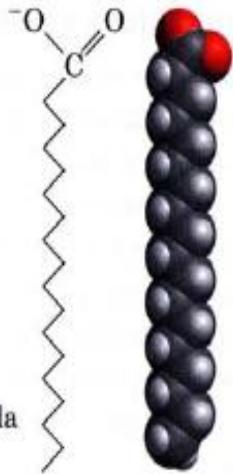


Phospholipids contain an ionic or polar head, and two long nonpolar hydrocarbon tails. In an aqueous environment, phospholipids form a lipid bilayer, with the polar heads oriented toward the aqueous exterior and the nonpolar tails forming a hydrophobic interior. Cell membranes are composed largely of this lipid bilayer.

# Ácidos Grasos

## Jabones

Grupo carboxilo



Cadena hidrocarbonada

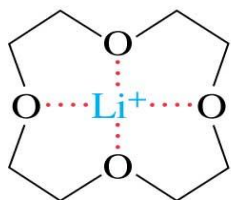


When soap is dissolved in  $\text{H}_2\text{O}$ , the molecules form micelles with the nonpolar tails in the interior and the polar heads on the surface. The polar heads are solvated by ion-dipole interactions with  $\text{H}_2\text{O}$  molecules.

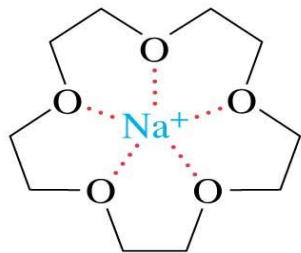
# Grupos Funcionales Éteres

Los **poliéteres cíclicos** se denominan frecuentemente éteres de corona.

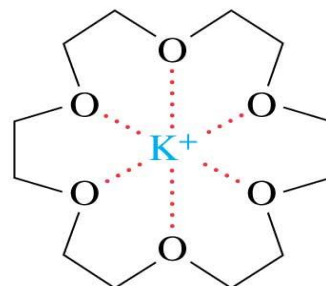
Pueden acomplejar cationes metálicos dentro del anillo; el tamaño del catión determinará el tamaño del anillo que se necesite. El complejo con éteres de corona llamado **ionóforos** con frecuencia permite que las sales inorgánicas polares se disuelvan en disolventes orgánicos no polares



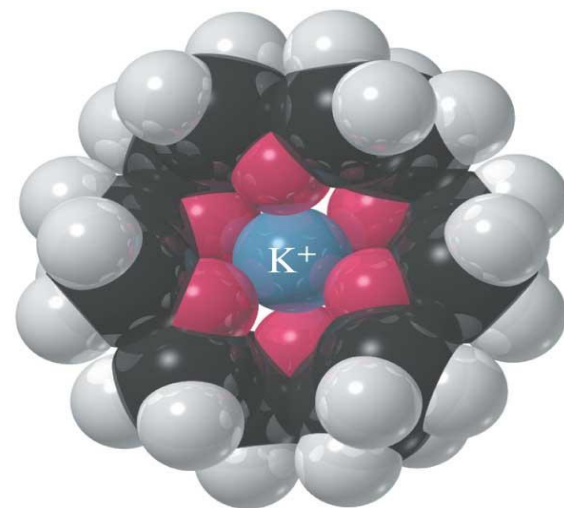
12-corona-4  
solvata al Li<sup>+</sup>



15-corona-5  
solvata al Na<sup>+</sup>



18-corona-6  
solvata al K<sup>+</sup>



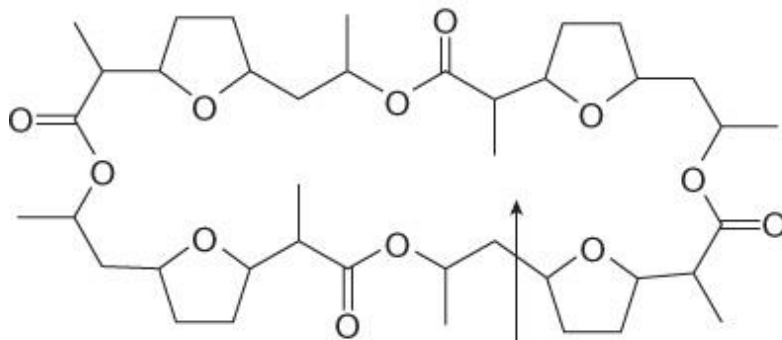
18-corona-6  
con K<sup>+</sup> solvatado



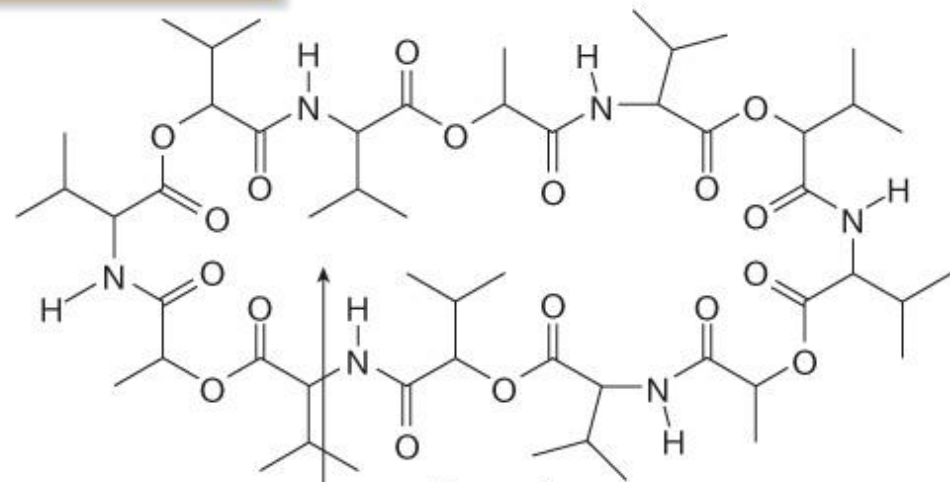
# Grupos Funcionales Éteres

**Ionóforos** pueden transportar iones a través de la membranas celulares, tienen aplicabilidad en área medicinal.

Naturally occurring antibiotic ionophores



nonactin

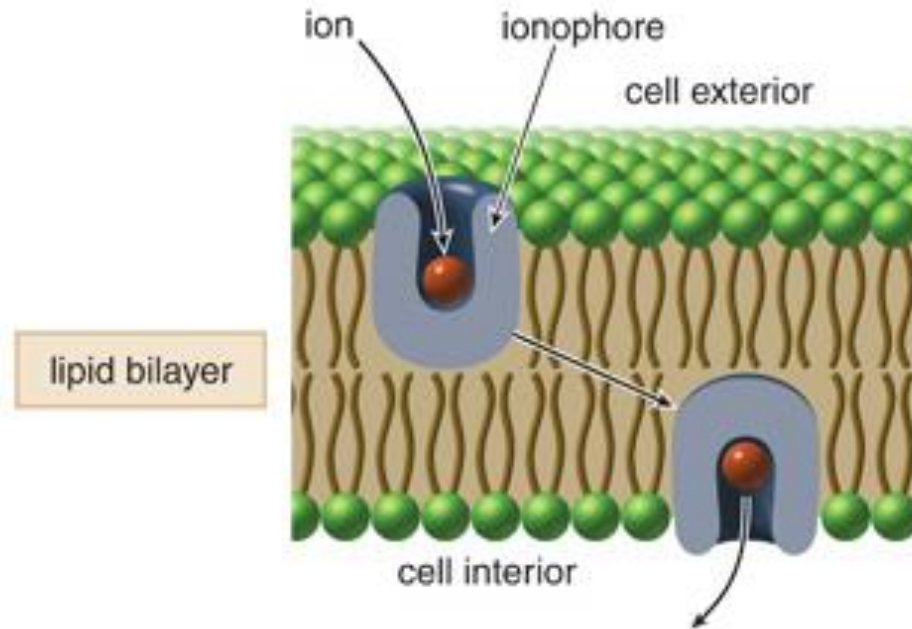


valinomycin

Each molecule contains a large central cavity to hold a cation.

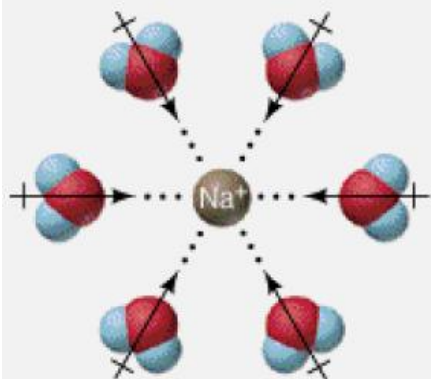
# Grupos Funcionales Éteres

## Transporte a través de la membraba



Los ionóforos transportan a los iones a través de la membrana, dado que poseen una parte exterior hidrofóbica que hace que sea soluble en el interior no polar de la membrana celular, y una cavidad central con oxígenos donde se acomplejan los iones

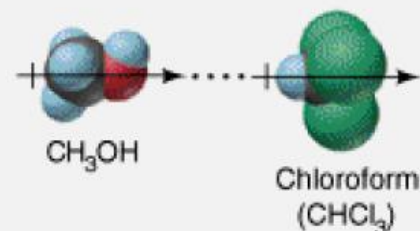
# Fuerzas Intermoleculares de atracción



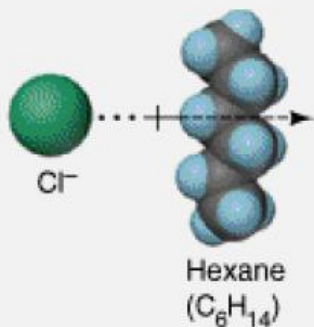
**ión - dipolo**



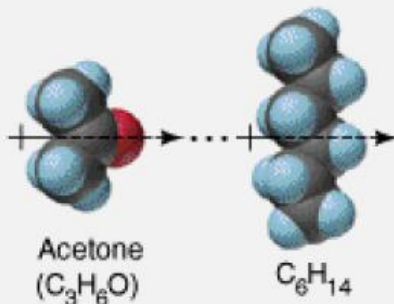
**Puente de H**



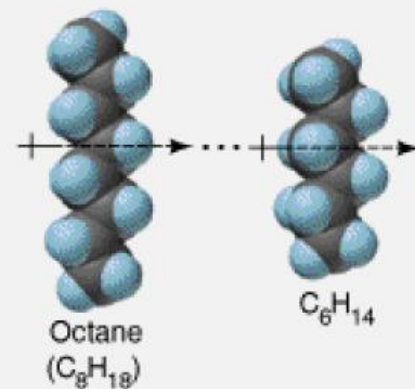
**Dipolo - dipolo**



**ión - dipolo inducido**




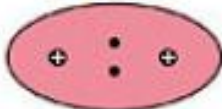
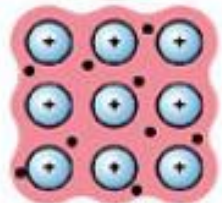





**Dipolo- dipolo inducido**



**Dispersión**



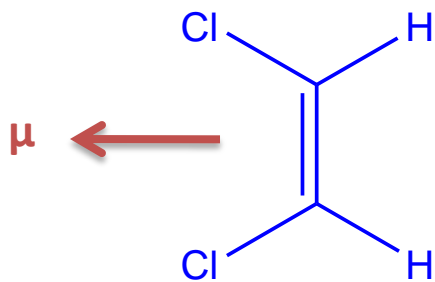
# Comparison of the Energies Associated with Bonding (Intramolecular) Forces and Intermolecular Forces

Force	Model	Basis of Attraction	Energy (kJ/mol)	Example
<b>Intramolecular</b>				
Ionic		Cation-anion	400–4000	NaCl
Covalent		Nuclei-shared e <sup>-</sup> pair	150–1100	H–H
Metallic		Cations-delocalized electrons	75–1000	Fe
<b>Intermolecular</b>				
Ion-dipole		Ion charge-dipole charge	40–600	Na <sup>+</sup> .....O $\begin{matrix} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{H} \end{matrix}$
H bond	$\delta^- \delta^+ \delta^-$ - A-H.....:B-	Polar bond to H-dipole charge (high EN of N, O, F)	10–40	$\begin{matrix} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{-H} & \text{.....} & \text{:}\ddot{\text{O}}\text{-H} \\   & &   \\ \text{H} & & \text{H} \end{matrix}$
Dipole-dipole		Dipole charges	5–25	I-Cl.....I-Cl
Ion-induced dipole		Ion charge-polarizable e <sup>-</sup> cloud	3–15	Fe <sup>2+</sup> .....O <sub>2</sub>
Dipole-induced dipole		Dipole charge-polarizable e <sup>-</sup> cloud	2–10	H-Cl.....Cl-Cl
Dispersion (London)		Polarizable e <sup>-</sup> clouds	0.05–40	F-F.....F-F

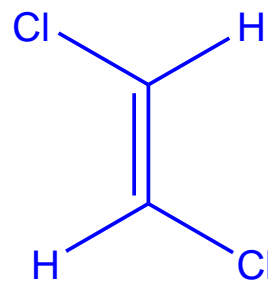
# Momentos Dipolares Estructuras Moleculares

## Moléculas Polares Alquenos

Compound	Melting Point (°C)	Boiling Point (°C)	Dipole Moment (D)
<i>Cis</i> -1,2-Dichloroethene	-80	60	1.90
<i>Trans</i> -1,2-Dichloroethene	-50	48	0
<i>Cis</i> -1,2-Dibromoethene	-53	112.5	1.35
<i>Trans</i> -1,2-Dibromoethene	-6	108	0



*Cis*-1,2-Dichloroetano



*Trans*-1,2-Dichloroetano

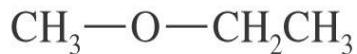
# Momentos Dipolares Estructuras Moleculares

## Moléculas Polares

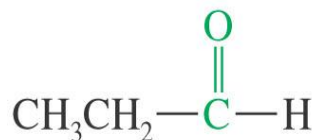
Las moléculas polares tienen mayor punto de ebullición, requiere mayor energía separar una molécula de otra



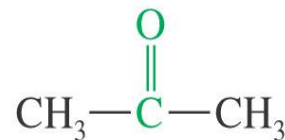
butano  
pe = 0°C



metoxietano  
pe = 8°C



propanal  
pe = 49°C



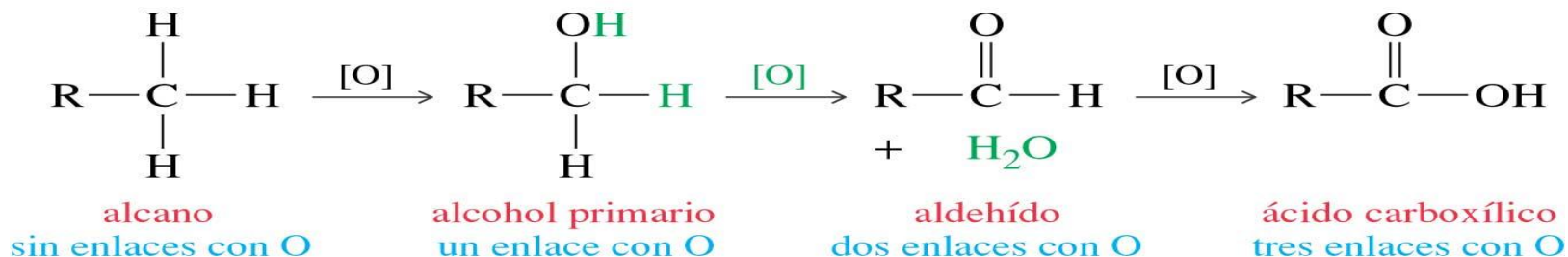
acetona  
pe = 56°C



1-propanol  
pe = 97°C

# Grupo Carboxilo Grado de Oxidación

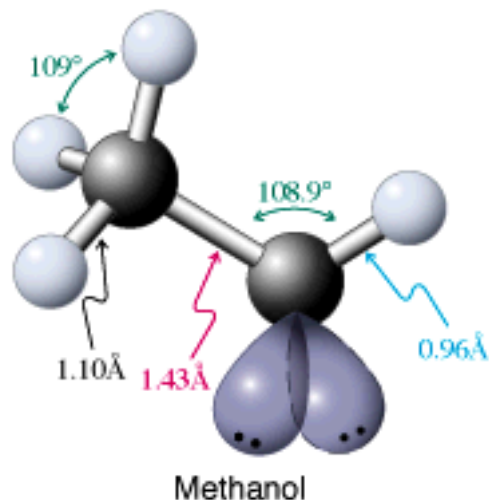
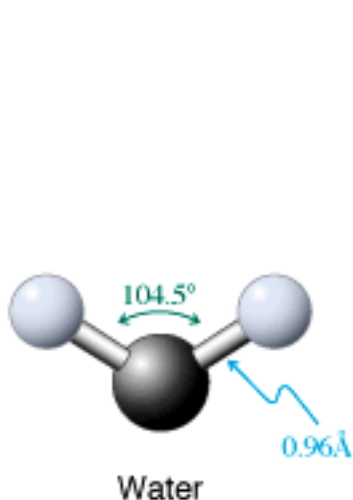
OXIDACIÓN



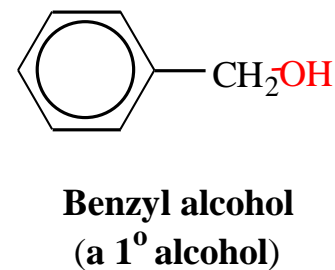
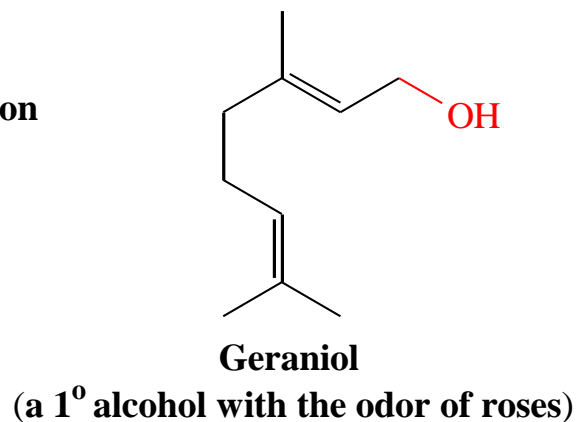
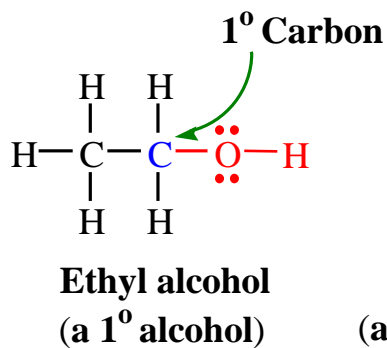
REDUCCIÓN



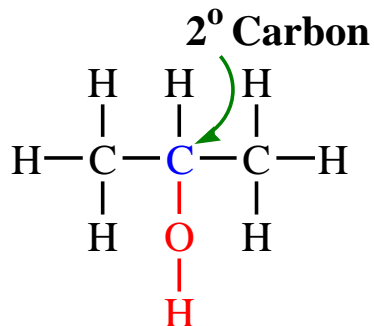
# Grupos Funcionales Alcoholes



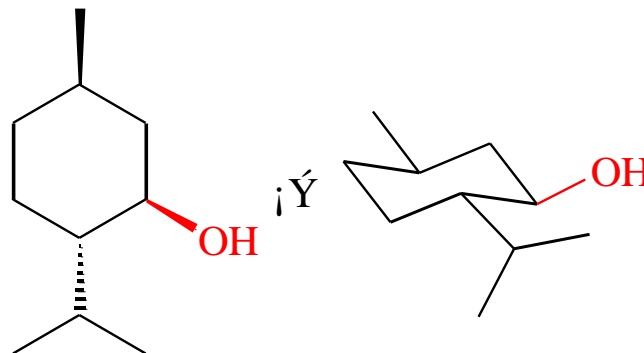
**R-OH**  
Grupo Hidróxilo



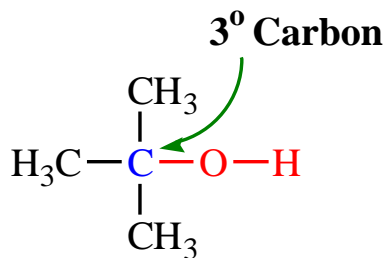
# Grupos Funcionales Alcoholes



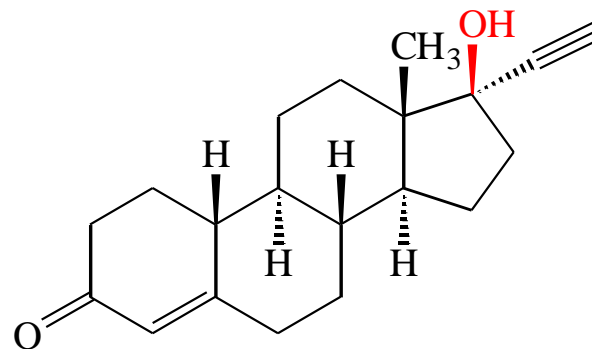
Isopropyl alcohol  
(a 2° alcohol)



Menthol  
(a 2° alcohol found in peppermint oil)

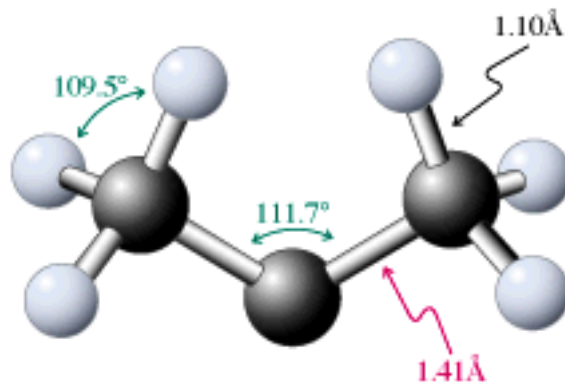


*tert*-Butyl alcohol  
(a 3° alcohol)

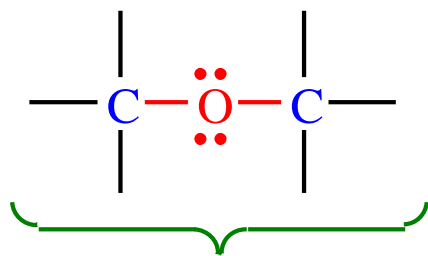


Norethindrone  
(an oral contraceptive that contains a 3° alcohol group, as well as a ketone group and carbon-carbon double and triple bonds)

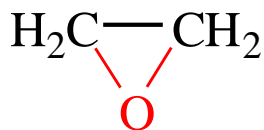
# Grupos Funcionales Éteres



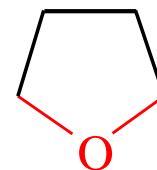
Methoxymethane



The functional of an ether



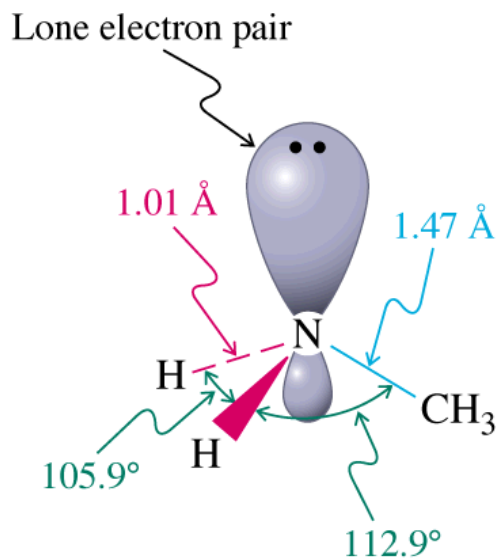
Ethylene oxide



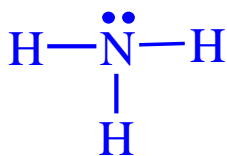
Tetrahydrofuran (THF)

Two cyclic ethers

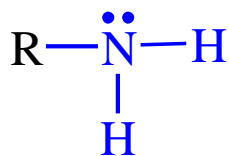
# Grupos Funcionales Aminas



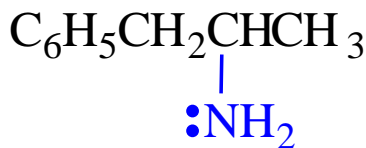
Derivados alquílicos de amonio



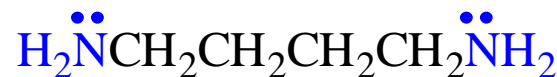
Ammonia



An amine



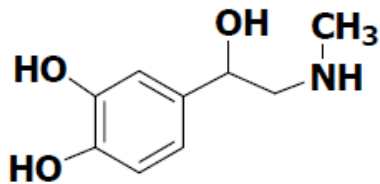
Amphetamine  
(a dangerous stimulant)



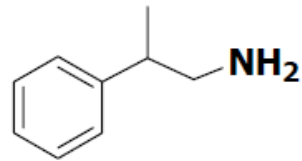
Putrescine  
(found in decaying meat)



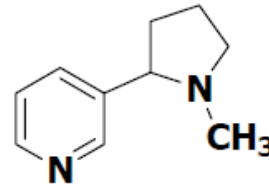
# Grupos Funcionales Aminas



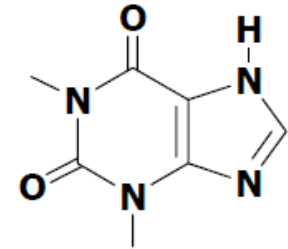
adrenalina



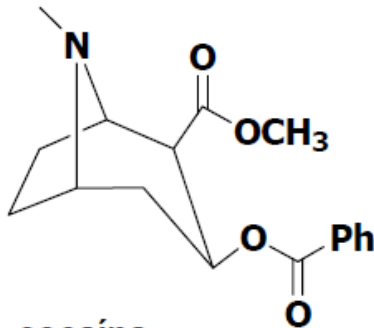
anfetamina



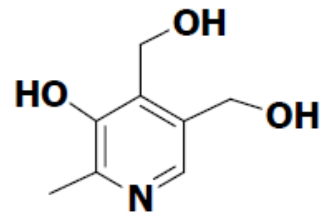
nicotina



cafeína



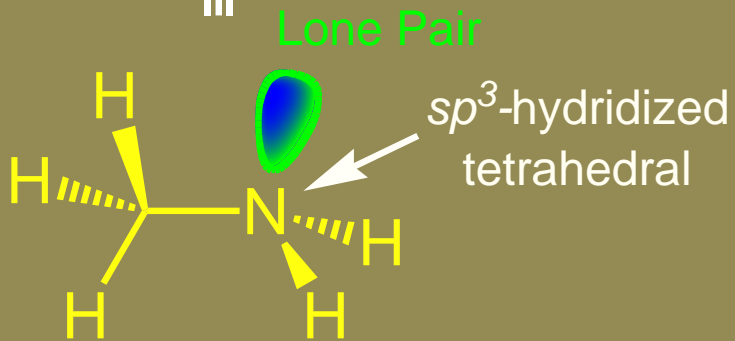
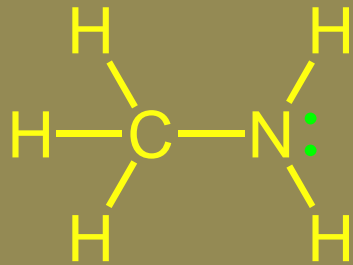
cocaína



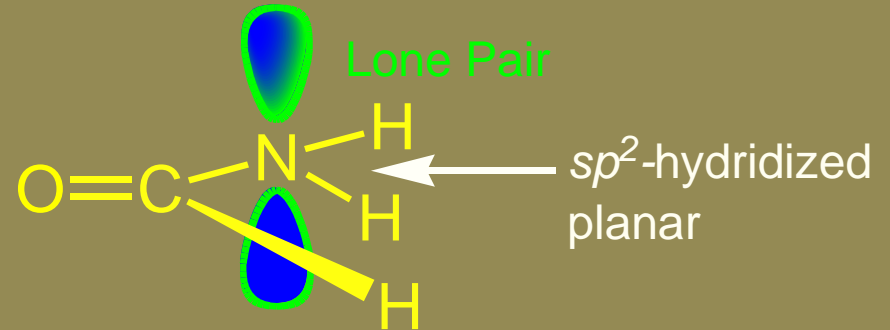
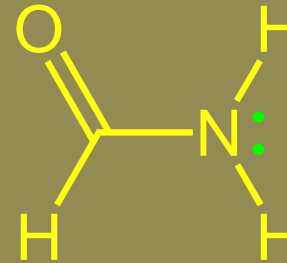
piridoxina (vitamina B6)

# Hibridación del Nitrógeno $sp^2$ y $sp^3$

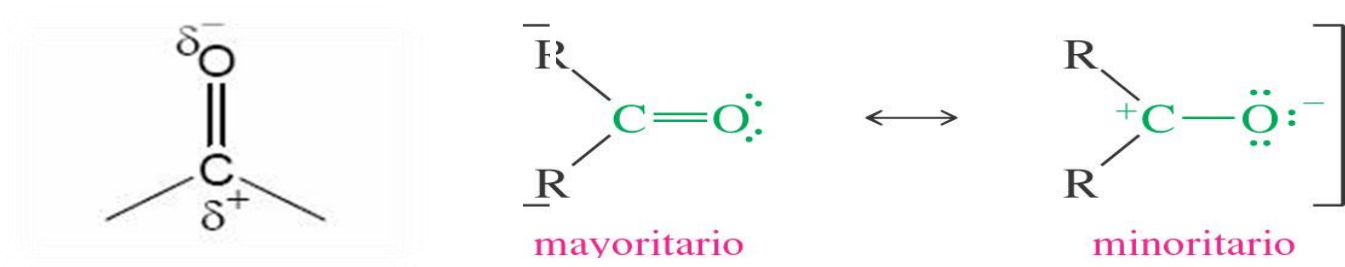
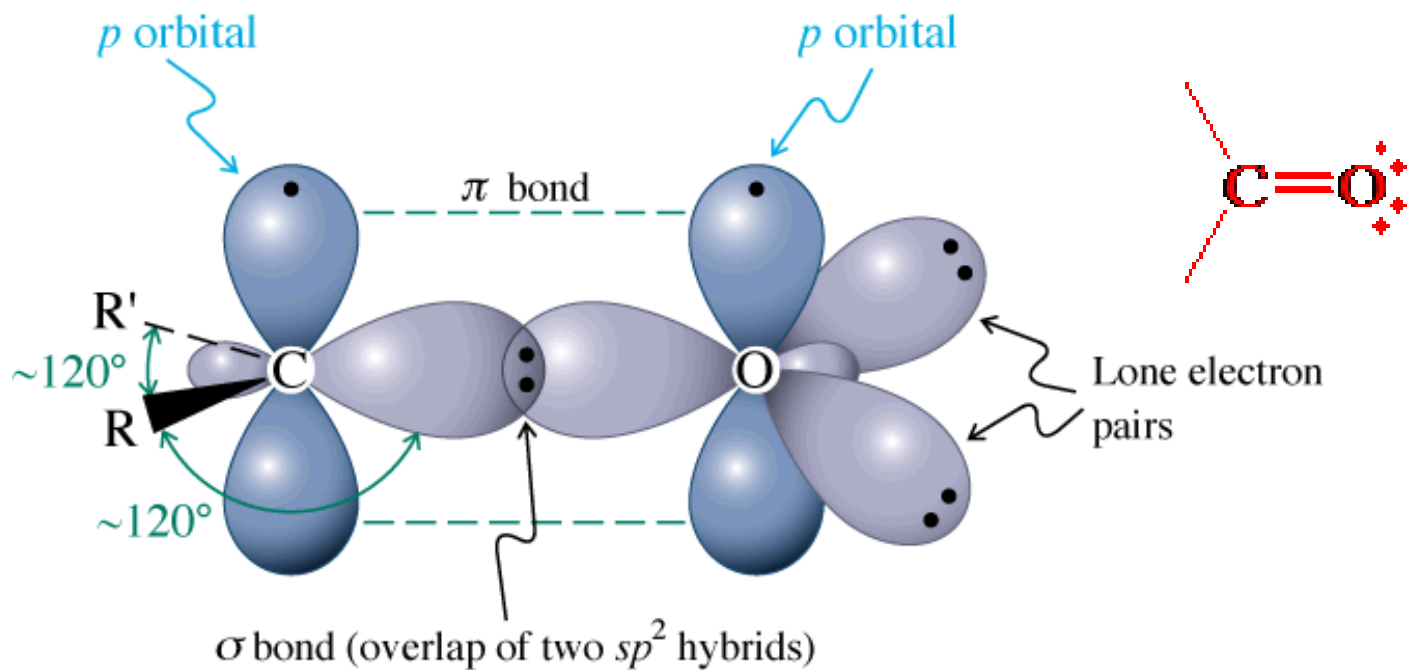
methylamine



formamide

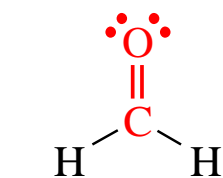


# Grupo Carbonilo Aldehídos y cetonas

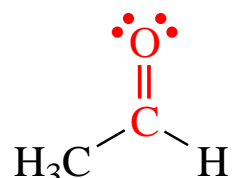


# Grupo Carbonilo Aldehídos y cetonas

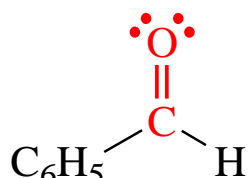
Clase	Fórmula general	Clase	Fórmula general
cetonas	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}'$	aldehídos	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$



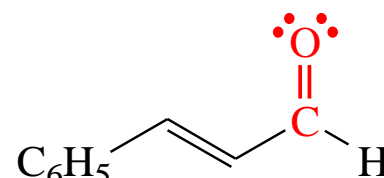
**Formaldehyde**



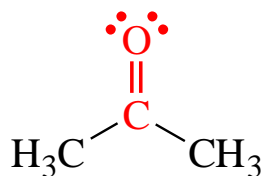
**Acetaldehyde**



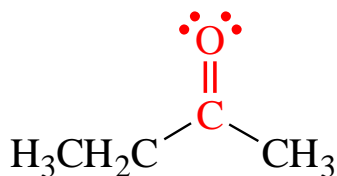
**Benzaldehyde**



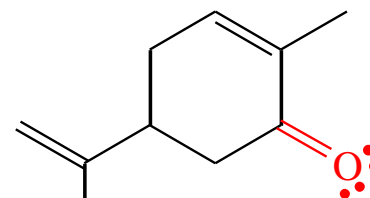
***trans*-Cinnamaldehyde  
(present in cinnamon)**



**Acetone**

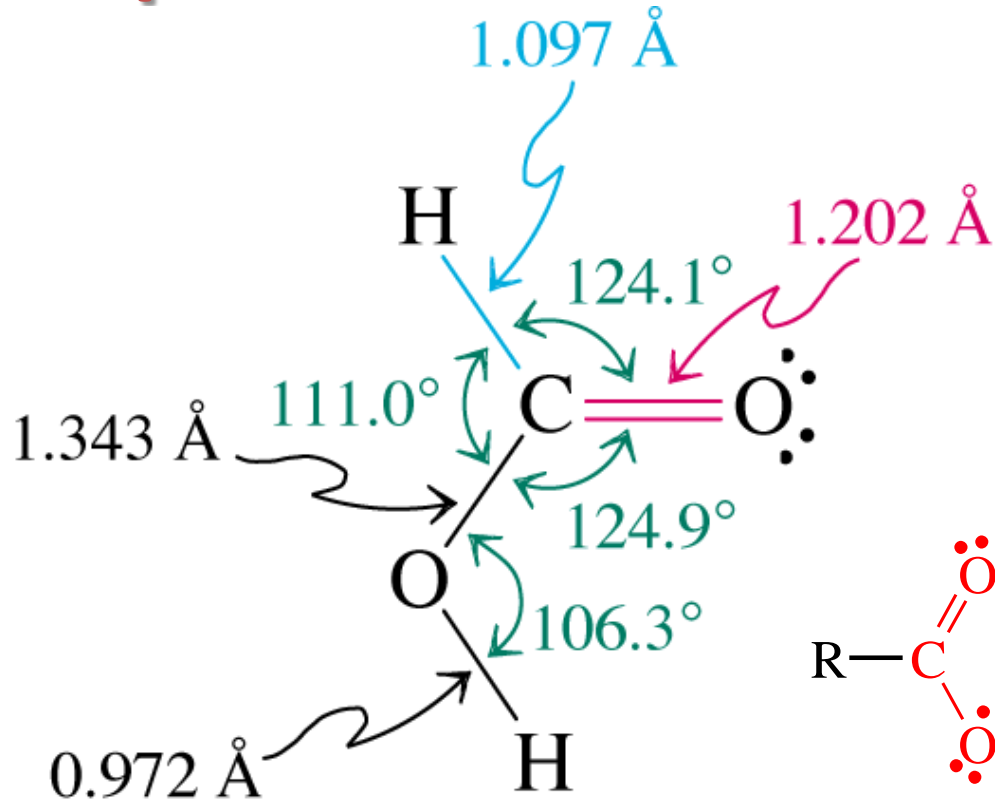


**Ethyl methyl ketone**

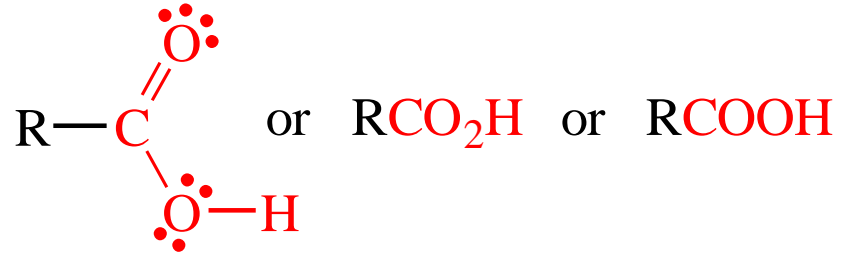


**Carvone  
(from spearmint)**

# Grupo Carboxilo Ácidos, Amidas y Esteres

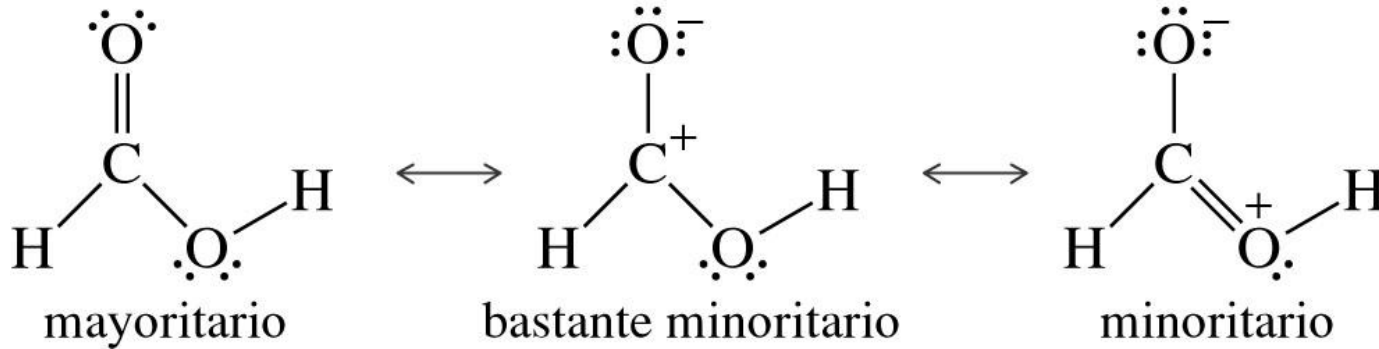


Ácido carboxílico

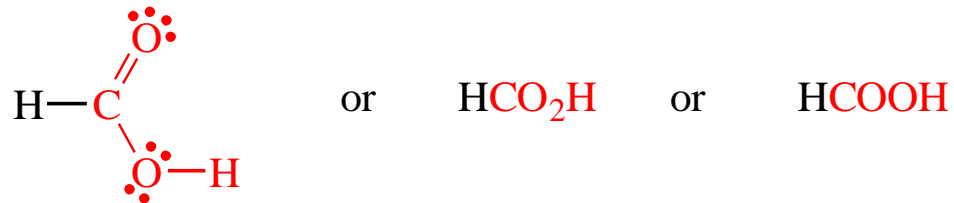


# Grupo Carboxilo Ácidos, Amidas y Esteres

## Estructuras de resonancia del grupo carboxílico



**Formic acid**



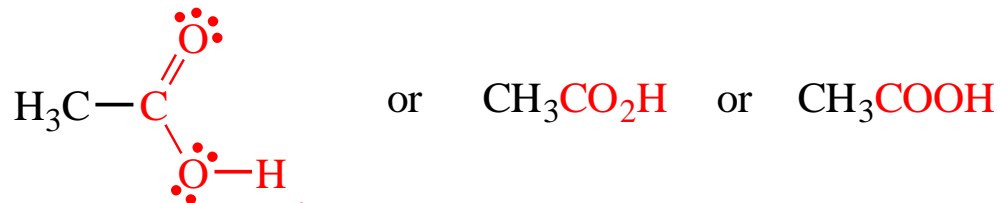
or



or



**Acetic acid**



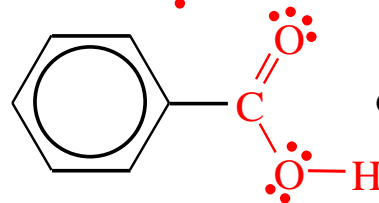
or



or



**Benzoic acid**



or

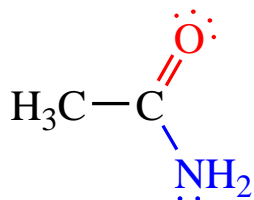


or

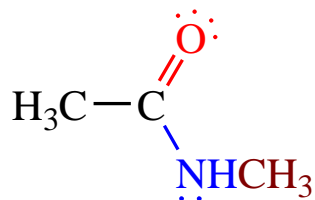


# Grupo Carboxilo Ácidos, Amidas y Esteres

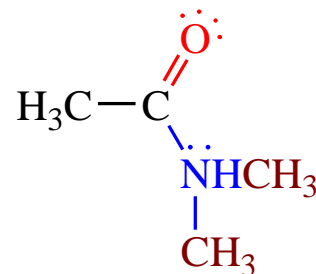
## Amidas



Acetamide

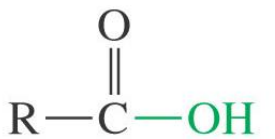


*N*-Methylacetamide



*N,N*-Dimethylacetamide

## Ésteres



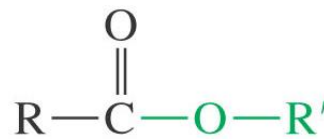
ácido carboxílico



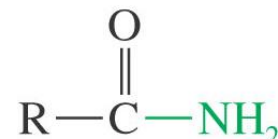
haluro de acilo



anhídrido



éster



amida