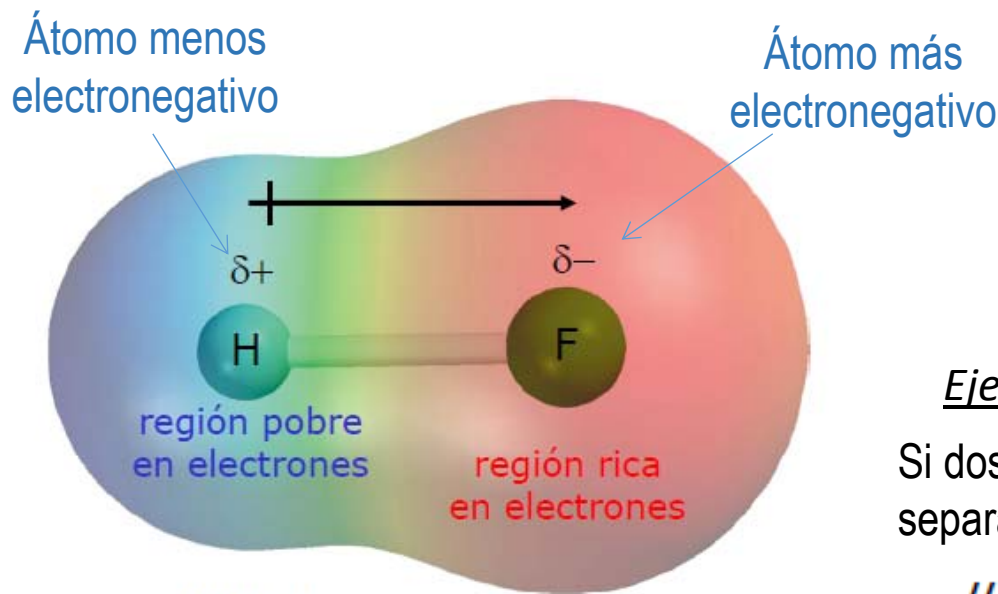


ENLACE QUIMICO

- Polaridad de enlace
- Polaridad molecular

Momento dipolar y moléculas polares:

La polaridad de una molécula puede cuantificarse por el valor del dipolo. La medida cualitativa de la magnitud de un dipolo se conoce como momento dipolar μ .



$\mu = Q \times r$
 Q es la carga
 r es la distancia entre las cargas

Los momentos dipolares se reportan de debyes (D).
 $1D = 3.36 \times 10^{-30} \text{ C m}$

Para moléculas medimos Q en unidades de carga electrónica e ,
 $1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$,
 y la distancia en angstroms (\AA)
 $1\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$

Ejemplo:

Si dos cargas, $1+$ y $1-$ (en unidades de e) están separadas por 1.00\AA , el momento dipolar producido es:

$$\begin{aligned} \mu &= Qr \\ &= (1.60 \times 10^{-19} \text{ C}) \left(1.00 \overset{\circ}{\text{\AA}} \right) \left(\frac{10^{-10} \text{ m}}{1 \overset{\circ}{\text{\AA}}} \right) \left(\frac{1D}{3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}} \right) \\ &= 4.79D \end{aligned}$$

Momento dipolar y moléculas polares:

Ejemplos:

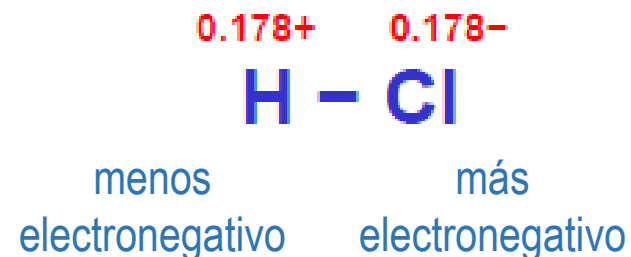
1.-La longitud de enlace de la molécula HCl es 1.27Å. Calcula el momento dipolar resultante si las cargas de los átomos fuesen +1 y -1.

$$\mu = Qr = (1.60 \times 10^{-19} \text{ C}) \left(1.27 \overset{\circ}{\text{Å}} \right) \left(\frac{10^{-10} \text{ m}}{1 \overset{\circ}{\text{Å}}} \right) \left(\frac{1 \text{ D}}{3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}} \right) = 6.08 \text{ D}$$

2.-El momento dipolar del HCl(g) experimental es de 1.08D. ¿qué carga tienen los átomos?

$$Q = \frac{\mu}{r} = \frac{(1.08 \text{ D}) \left(\frac{3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}}{1 \text{ D}} \right)}{\left(1.27 \overset{\circ}{\text{Å}} \right) \left(\frac{10^{-10} \text{ m}}{1 \overset{\circ}{\text{Å}}} \right)} = 2.84 \times 10^{-20} \text{ C}$$

$$\text{carga en } e = \left(2.84 \times 10^{-20} \text{ C} \right) \left(\frac{1e}{1.60 \times 10^{-19} \text{ C}} \right) = 0.178e$$



Polaridad de enlace y polaridad molecular:

Es una medida de cuan equitativamente se comparten los electrones del enlace entre los átomos que lo forman.

En la medida en que aumenta la diferencia de electronegatividad entre los átomos también aumenta la polaridad del enlace.

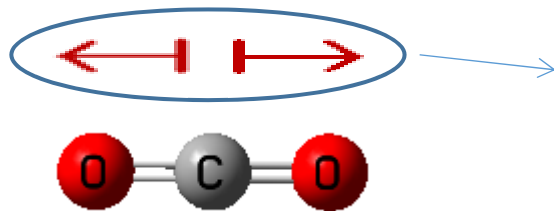
Para cada enlace polar el momento dipolar es un vector que apunta hacia el átomo más electronegativo.

Mientras más polar sea el enlace mayor será el momento dipolar asociado al enlace (mayor la magnitud del vector μ)

El momento dipolar de las moléculas depende de la polaridad de todos sus enlaces individuales y de la geometría de la molécula.

Ejemplo:

CO₂



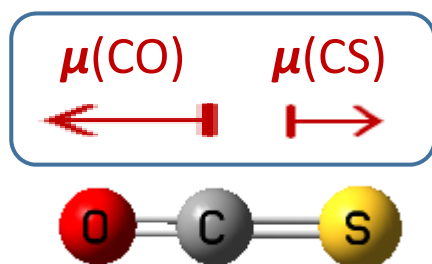
Dipolos de enlace de igual magnitud y dirección opuesta (se cancelan entre sí)

Momento dipolar de la molécula = 0

Molécula no polar

Polaridad de enlace y polaridad molecular:

La molécula O=C=S, tiene una estructura de Lewis análoga a al del CO₂ y es una molécula lineal. ¿Tendrá un momento dipolar igual a cero como el CO₂?



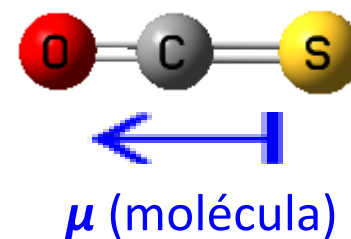
Dirección opuesta pero dipolos de enlace de diferente magnitud (NO se cancelan entre sí)

Mayor diferencia de electronegatividad entre C y O
Dipolo de mayor magnitud

Menor diferencia de electronegatividad entre C y S
Dipolo de menor magnitud

Momento dipolar de la molécula $\neq 0$

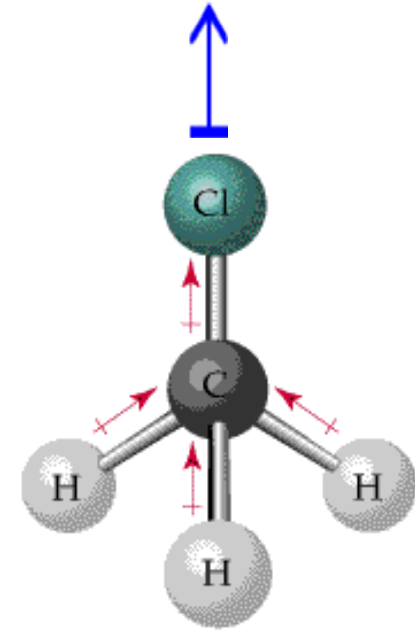
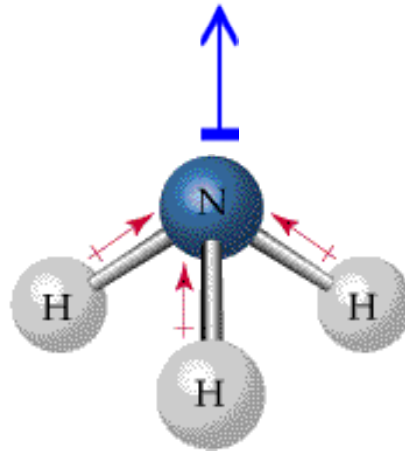
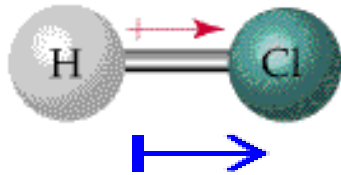
Molécula polar



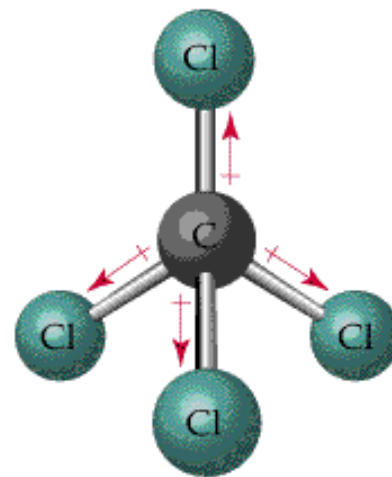
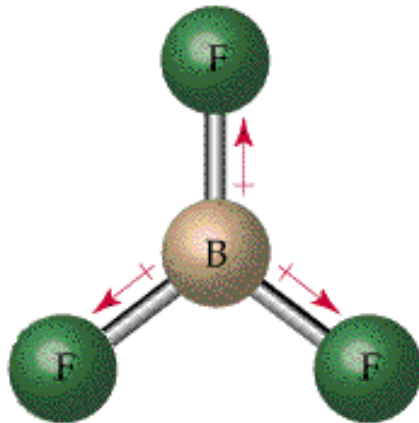
Resultado de la suma de los vectores μ de todos los dipolos de enlace

Polaridad de enlace y polaridad molecular:

Moléculas polares:

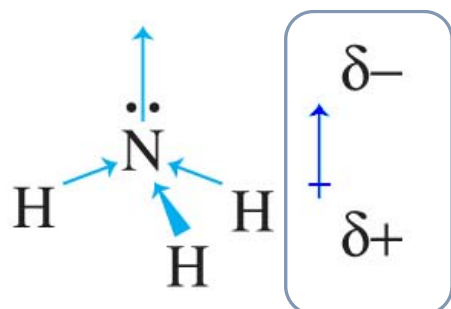


Moléculas no polares:

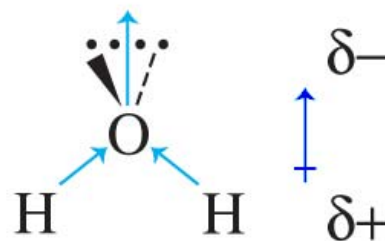


Polaridad de enlace y polaridad molecular:

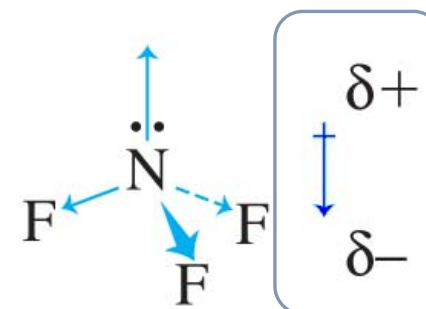
Moléculas polares:



Net dipole, 1.47 D



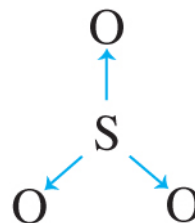
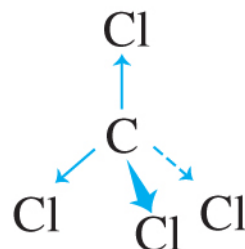
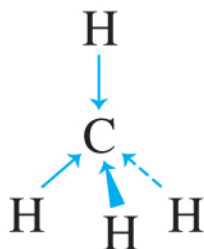
Net dipole, 1.85 D



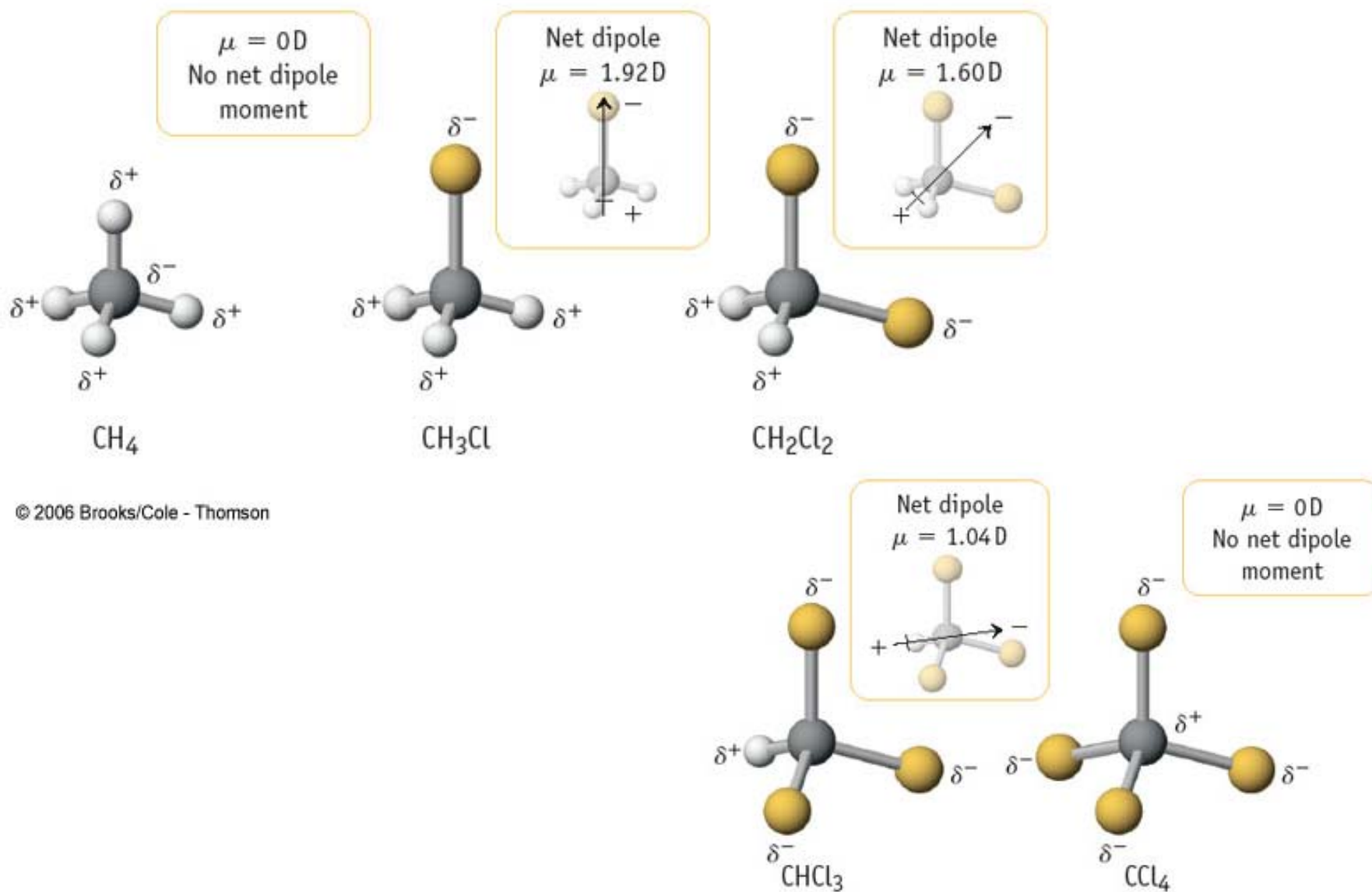
Net dipole, 0.23 D

© 2011 Pearson Education, Inc.

Moléculas no polares:

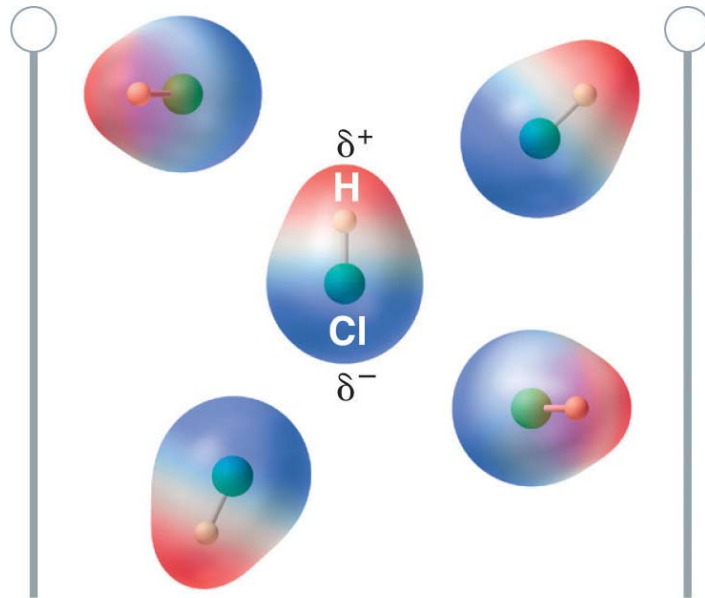


Polaridad de enlace y polaridad molecular:

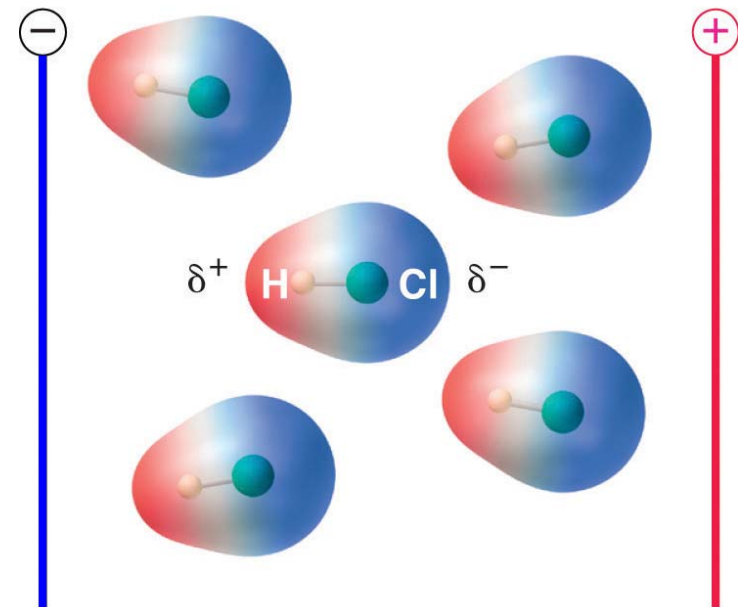


Moléculas Polares:

Ausencia de campo eléctrico externo

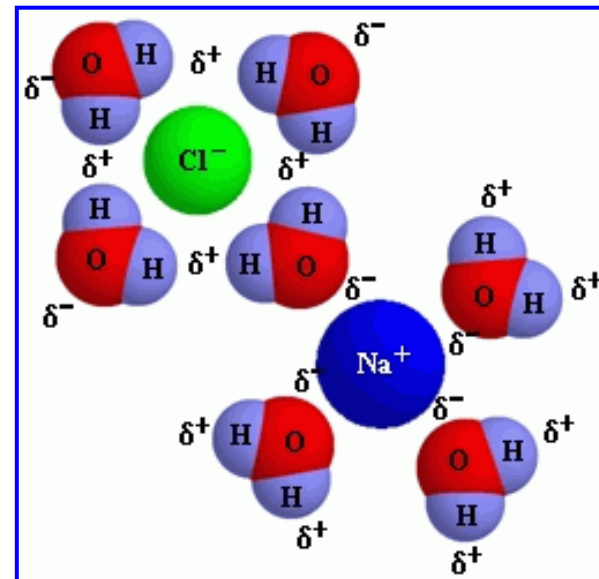
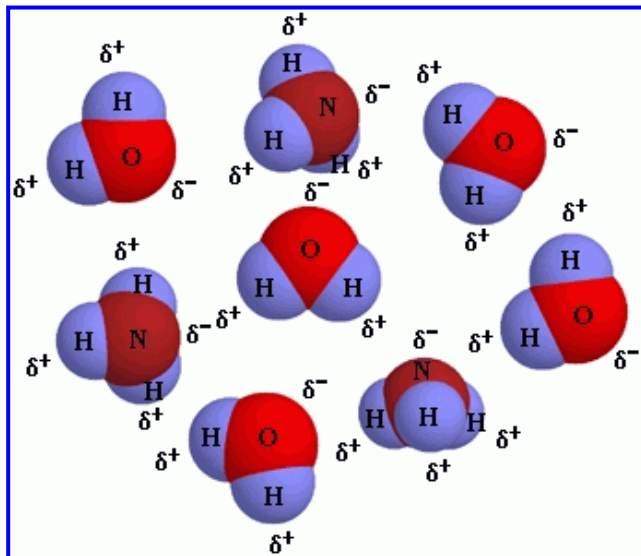
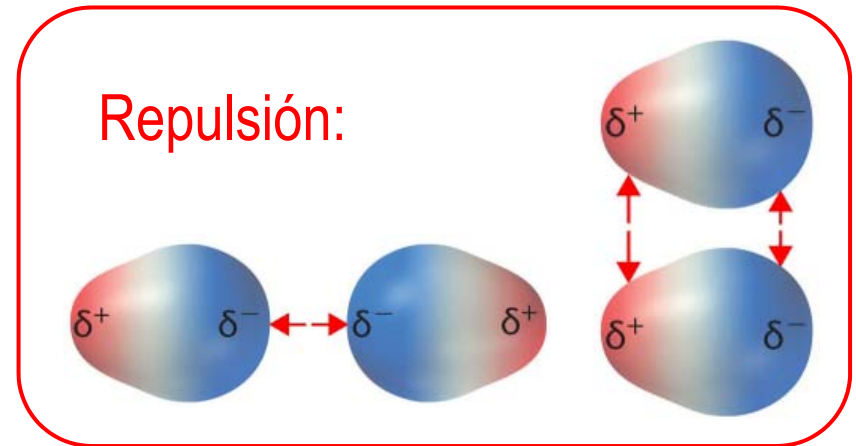
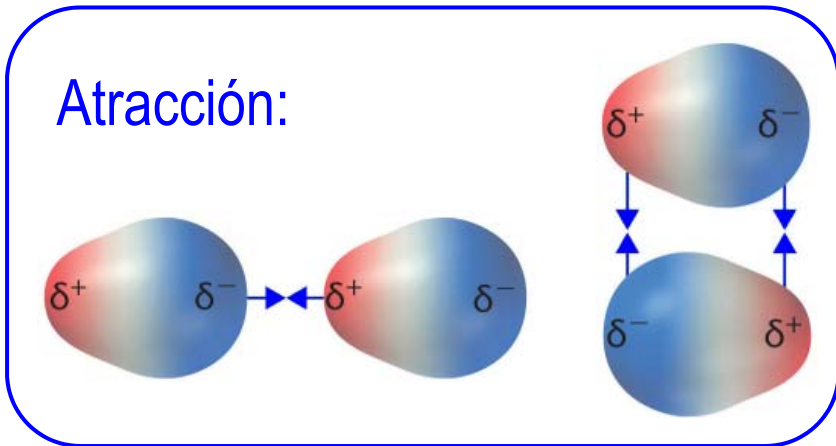


Presencia de campo eléctrico externo

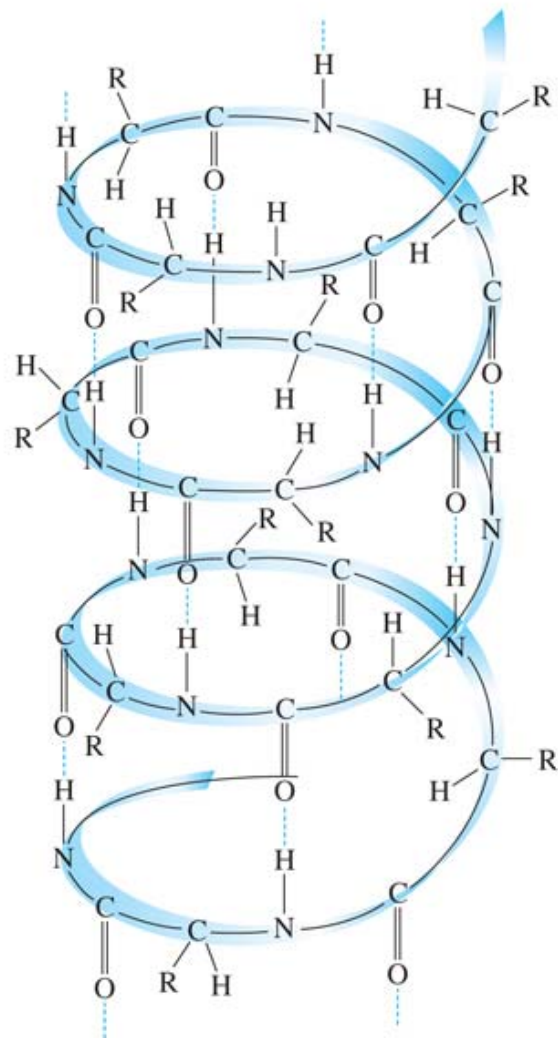


Orientación

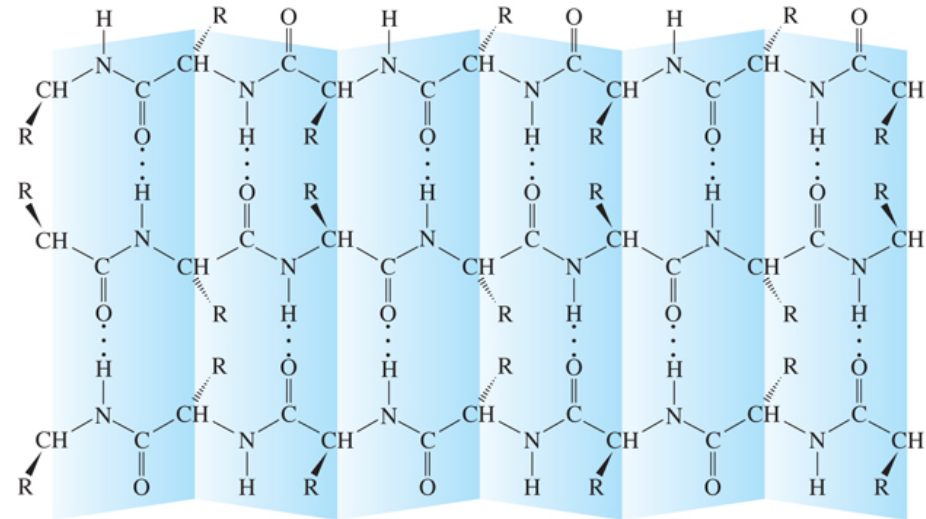
Moléculas Polares:



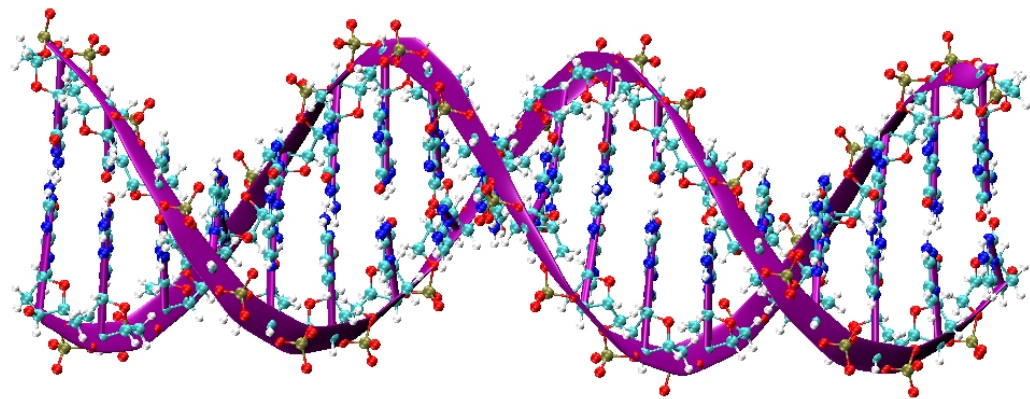
Sitios Polares:



Proteína α -hélice



Proteína β -lámina

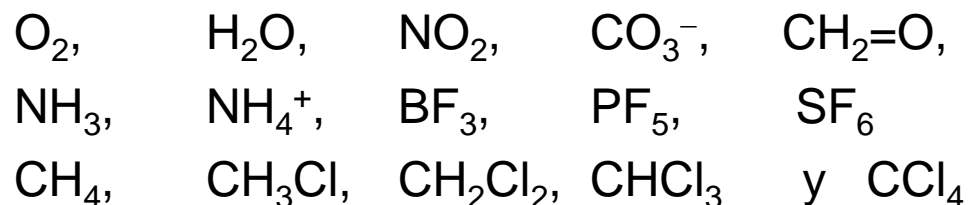


ADN doble hélice



Ejercicios

1. Utilizando las cargas sobre los átomos (obtenidas en clases anteriores) para las especies:



- Prediga polaridades de enlace y moleculares.
- Compare con los momentos dipolo obtenidos con g09, y estos últimos con los valores experimentales (cuando sea posible).

2. Utilizando las cargas sobre los átomos (obtenidas en clases anteriores) para su molécula de trabajo:

- Prediga polaridades de enlace y moleculares.
- Compare con los momentos dipolo obtenidos con g09.
- Haga una investigación en la literatura sobre dificultades (y errores) de usar cálculos teóricos para obtener momentos dipolares.