

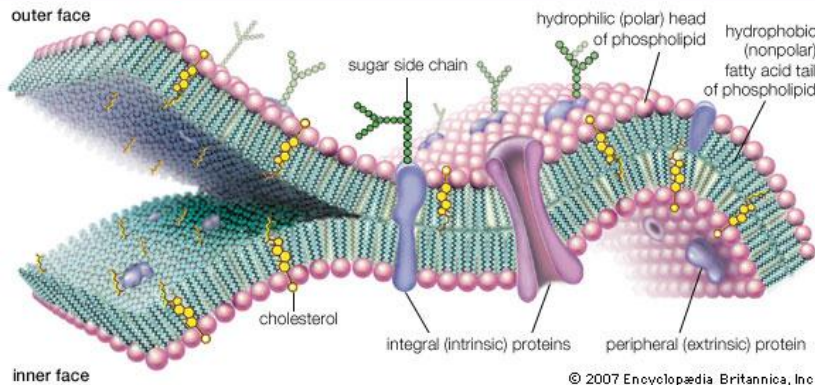
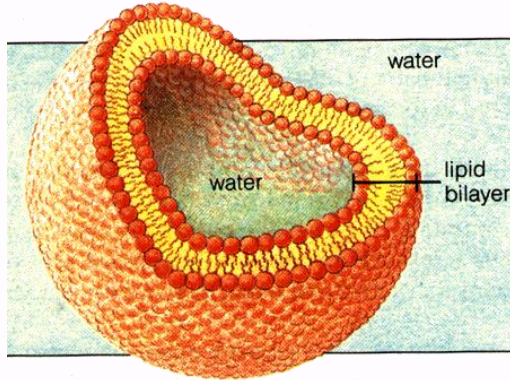
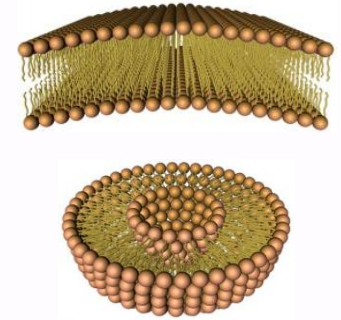
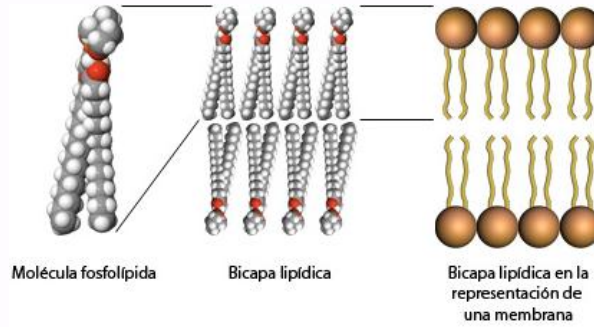
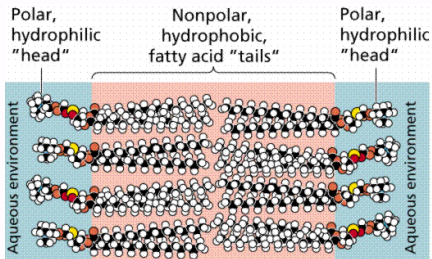
# Sólidos Moleculares



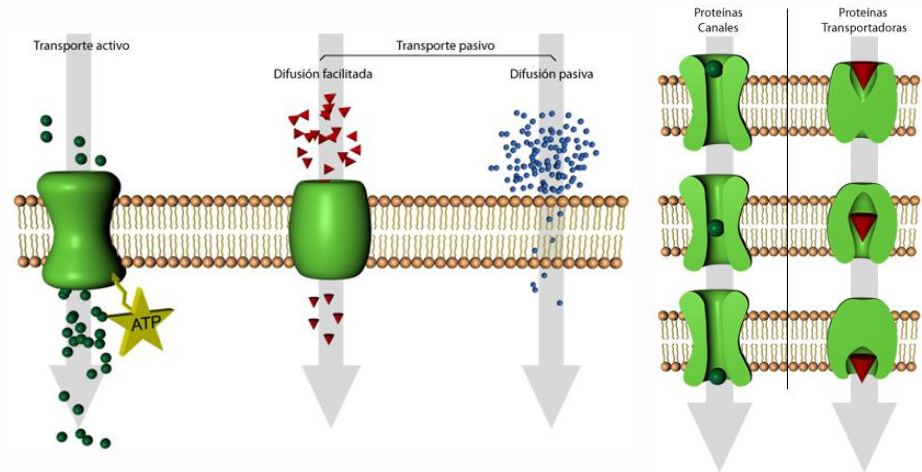
- \* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 8.**
- \* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 2.**
- \* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 2.**
- \* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999. **Capítulo 16.**

- \* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994. **Capítulo 5.**
- \* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. **Capítulo 7.** Traducción española de la 2ª Ed. “*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006. **Capítulo 6.**

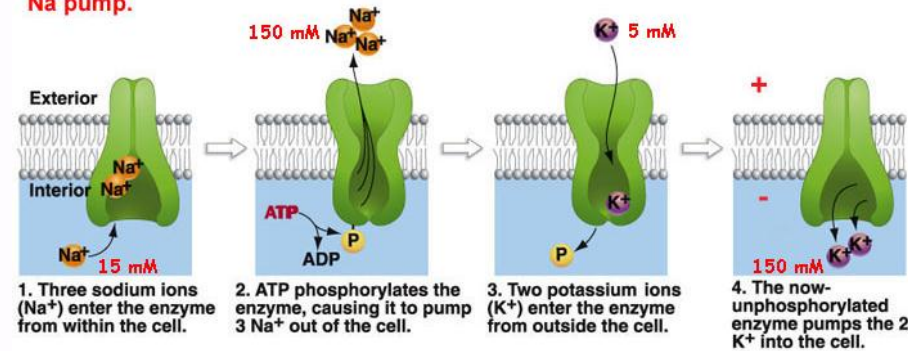




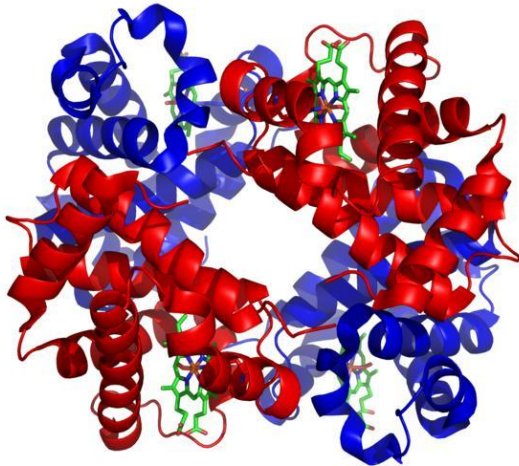
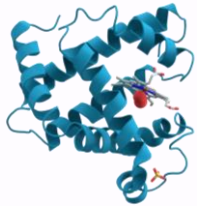
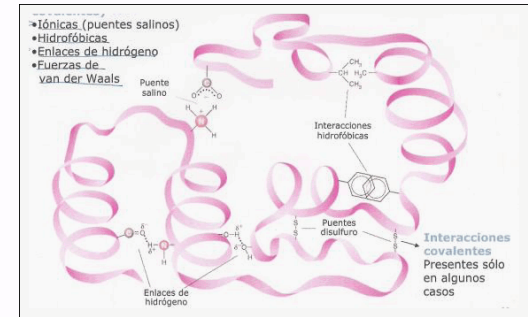
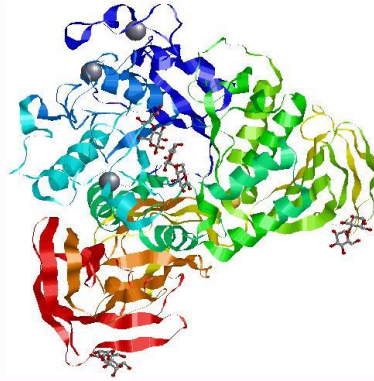
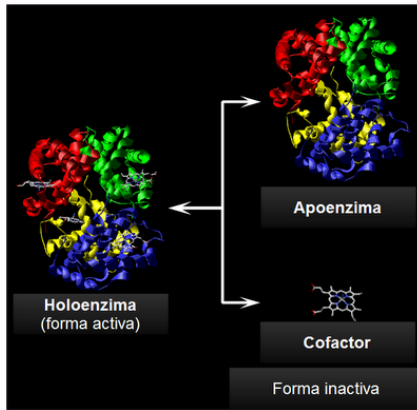
© 2007 Encyclopædia Britannica, Inc.



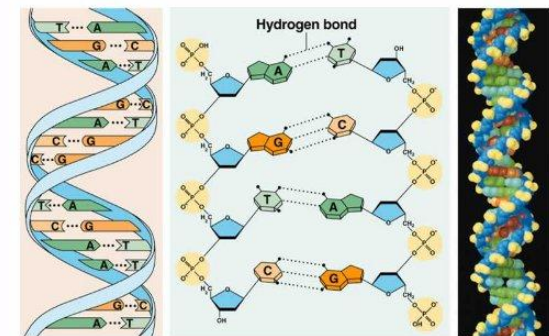
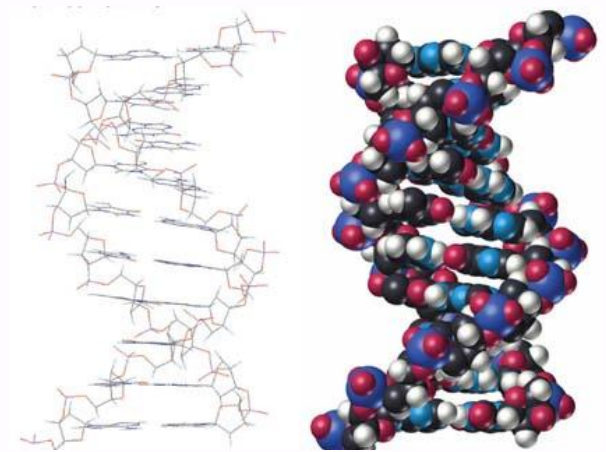
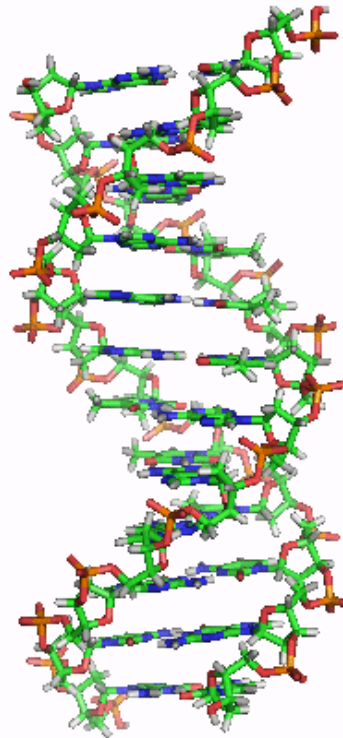
**Na pump.**



1. Three sodium ions ( $\text{Na}^+$ ) enter the enzyme from within the cell.
2. ATP phosphorylates the enzyme, causing it to pump 3  $\text{Na}^+$  out of the cell.
3. Two potassium ions ( $\text{K}^+$ ) enter the enzyme from outside the cell.
4. The now-unphosphorylated enzyme pumps the 2  $\text{K}^+$  into the cell.



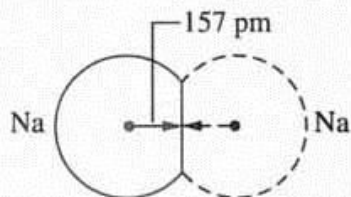
Estructura de la hemoglobina. Las subunidades proteicas se muestran en rojo y azul, y los grupos hemo, que contienen hierro, en verde. Fuente: Protein Data Base 1GZX.



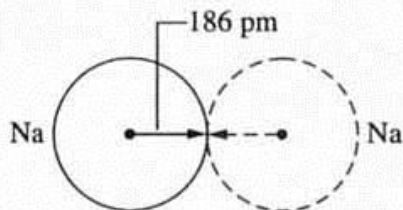
Sólidos moleculares - Conglomerado de moléculas independientes unidas por diversas fuerzas.  
Propiedades de los sólidos son las propiedades de sus moléculas.

La existencia de líquidos y sólidos implica la existencia de fuerzas de cohesión intermoleculares.

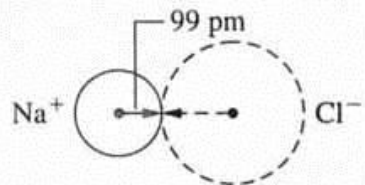
Radio covalente:



Radio metálico:



Radio iónico:



Intensidad relativa / decrecimiento con la *distancia* / direccionalidad

**Radios** atómicos, iónicos, covalentes, metálicos,  
Enlazados y no enlazados, *Van der Waals*

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 290.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Radio de Van der Waals



Gas Noble - Fuerzas de London, las más débiles de todas, disminuyen rápidamente con la distancia.

Equilibrio con las fuerzas de repulsión de Pauli,  
Radio de Van der Waals.

Ne (sólido)  $r_{\text{vdw}} = 160 \text{ pm}$

Xe (sólido)  $r_{\text{vdw}} = 190 \text{ pm}$

El Radio de Van der Waals de un átomo puede ser variable, y depende de varios factores:

\* Lo comprimido que se encuentre:  $r(\text{sólido}) < r(\text{líquido}) < r(\text{gas})$

\* Efecto de los sustituyentes: Xe Sólido  $r_{\text{vdw}} = 220 \text{ pm}$

XeF<sub>4</sub>  $r_{\text{vdw}}(\text{Xe}) = 170 \text{ pm}$

F muy electronegativo, le hace “*aparentemente*” más pequeño

Se toma como radio de Van der Waals la *distancia de no enlace*

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 290.

\* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 348.

## Radios Iónicos

Enlace iónico estudiado en el *Tema 4.4*

Radio Iónico - Atracciones y repulsiones - Interacciones electrostáticas (fuertes).

Radio V.d.W. - Únicamente atracciones - Interacciones débiles

Li<sup>+</sup>/He (1s<sup>2</sup>) isoelectrónicos

F<sup>-</sup>/Ne (1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup>) isoelectrónicos

Energía Interacción LiF = 400 kJ/mol

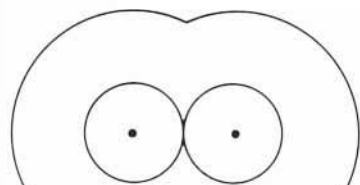
Distancia interiónica 210 pm

Energía Interacción He-Ne = 4 kJ/mol

Suma radios V.d.W. 340 pm

## Radios Covalentes

$$2 \cdot r_{\text{cov}} = 2 \cdot 71 = 142 \text{ pm}$$

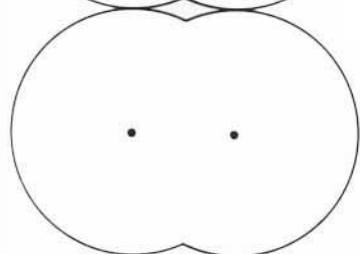


Distancia de enlace en la molécula F<sub>2</sub> = 142 pm  
Solapamiento parcial de las densidades electrónicas.

Suma de los radios V.d.W. = 156 pm

Dos veces el radio iónico del F<sup>-</sup> = 2 · 119 = 238 pm

$$2 \cdot r_{\text{vdw}} = 2 \cdot 78 = 156 \text{ pm}$$



Molécula F<sub>2</sub>

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 293.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 290.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Fuerzas Intermoleculares

### Enlace Covalente

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

- \* Fuertemente direccional, como consecuencia del concepto de solapamiento.
- \* Enlaces muy energéticos (fuertes):

P–P 200 kJul/mol		Covalente puro
C–C 346 kJul/mol		250–400 kJul/mol
H–H 432 kJul/mol		Promedio
- \* Los átomos más pequeños dan mayor solapamiento, enlaces más fuertes.
- \* Enlace más fuerte que cualquier otro tipo de interacción química, salvo enlace iónico.
- \* A medida que se separan los átomos, disminuye el solapamiento, la fortaleza del enlace.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.



## Fuerzas Intermoleculares

### Enlace Iónico

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

- \* Energía calculada con buena aproximación con la Ecuación de Born-Landé (*Tema 3.4*)

Se consideran únicamente interacciones de tipo electrostático, sin tomar en consideración Van der Waals u otras interacciones menores.

$$U_r = \frac{Z^+ \cdot Z^-}{r^+ + r^-} = \frac{Z^+ Z^-}{r_o} \quad \begin{array}{l} \text{Ligeras discrepancias entre} \\ \text{U teórico y U experimental} \end{array}$$

- \* Energía del mismo orden de magnitud que el enlace covalente. Puntualmente puede haber compuestos iónicos con mayor o con menor energía que los covalentes.
- \* En enlace iónico carece de direccionalidad, **NO direccional**, como corresponde a una interacción de tipo electrostático. No depende de la dirección, sólo de la distancia, tamaño y carga de los iones, N° de coordinación.
- \* Las interacciones son atractivas / repulsivas, ambas muy fuertes.
- \* Relativamente poco sensible a la distancia, sólo disminuye a razón de **1/r**

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Fuerzas Intermoleculares

### Interacción Ión-Dipolo

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 297.

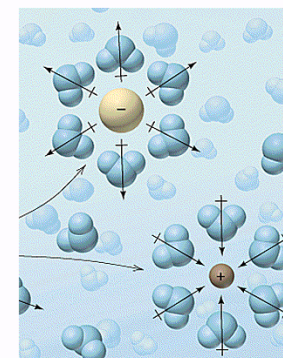
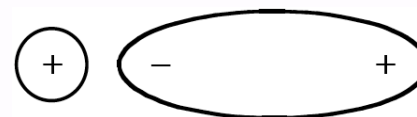
Dipolo Molecular – Dos cargas iguales y opuestas ( $\pm q$ ), separadas a una distancia ( $d$ )

$$\mu = q \cdot d$$

Los dipolos se orientan alrededor de los iones presentes

Orientación "preferente" de las moléculas

**NO direccionales**



Similares a las interacciones Ión-Ión, pero tienden a ser más débiles al tener una separación de cargas menor que una carga iónica, siendo además más sensibles a la distancia  $1/r^2$

Importantes en la solubilidad de compuestos iónicos en disolventes polares dando aniones solvatados

NaF en agua  $\Rightarrow$   $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n^+$  y  $\text{F}(\text{H}_2\text{O})_m^-$  similares a los complejos  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 100.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

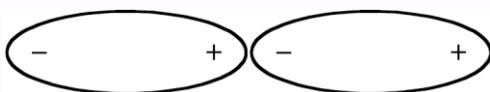
## Fuerzas Intermoleculares

### Interacción Dipolo-Dipolo

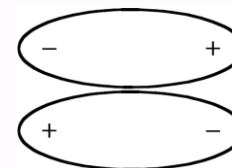
Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 298.

Dos dipolos interactuando entre sí pueden adoptar dos posibles disposiciones:

Configuración cabeza-cola  
Moléculas grandes

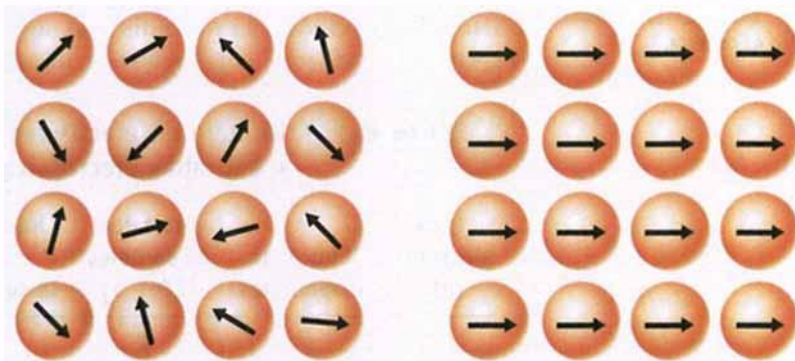


Configuración antiparalela  
Moléculas pequeñas



Similares a las interacciones Ión-Dipolo, pero tienden a ser aún más débiles, siendo aún más sensibles a la distancia, orientación *preferente*, **NO direccional**

$1/r^3$



Al aumentar la temperatura, aumenta la agitación térmica y el desorden, se pierde orientación, disminuyen las interacciones y disminuye la cohesión.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 100.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Fuerzas Intermoleculares

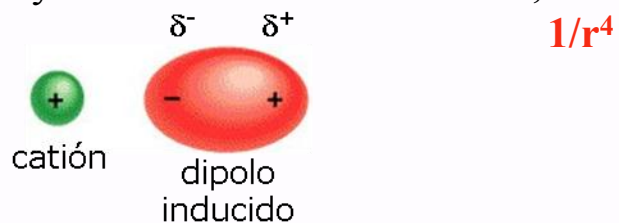
### Interacción Dipolo inducido

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4<sup>a</sup> Ed., Harper Collins, 1993, pp 298.

#### Ión-Dipolo Inducido NaF - CCl<sub>4</sub>

Una partícula cargada (ión) próxima a una molécula no polar, deforma la nube electrónica induciendo la aparición de un dipolo Inducido.

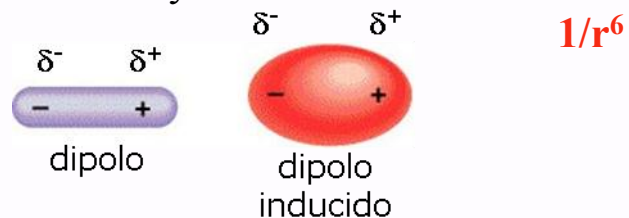
Similares a las interacciones anteriores, pero más débiles y más sensibles a la distancia, orientación *preferente*, **NO direccional**



#### Dipolo-Dipolo Inducido H<sub>2</sub>O - CCl<sub>4</sub>

Un dipolo permanente próximo a una molécula no polar, deforma la nube electrónica induciendo la aparición de un dipolo Inducido.

Similares a las interacciones anteriores, pero mucho más débiles y mucho más sensibles a la distancia, orientación *preferente*, **NO direccional**



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4<sup>a</sup> Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 100.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Fuerzas Intermoleculares

### Dipolo inducido - Dipolo inducido Fuerzas de Dispersión de London Fuerzas de Van der Waals

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 299.

Moléculas Apolares, sin momento dipolar permanente.

Un dipolo instantáneo induce la formación de un dipolo inducido en la molécula vecina.

Son las interacciones más débiles de todas, y se manifiestan únicamente a distancias extremadamente cortas, **NO direccional**

$$1/r^6$$

Dependen de lo "deformable" que sea la nube electrónica, por lo que aumenta su importancia en moléculas grandes y pesadas. Aumenta rápidamente con el volumen molecular y el peso molecular, y son las responsables de muchas propiedades conocidas.

	T <sub>eb</sub> <sup>a</sup> (K)
H <sub>2</sub>	2
D <sub>2</sub>	23
T <sub>2</sub>	25

	T <sub>eb</sub> <sup>a</sup> (°C)	T <sub>f</sub> <sup>a</sup> (°C)
He	-269	-270
Ne	-246	-249
Ar	-185	-189
Kr	-152	-169
Xe	-108	-140
Rn	-65	-71

	T <sub>eb</sub> <sup>a</sup> (°C)	T <sub>f</sub> <sup>a</sup> (°C)
F <sub>2</sub>	-188	-220
Cl <sub>2</sub>	-34	-101
Br <sub>2</sub>	+59	-7
I <sub>2</sub>	+184	+114

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 100.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Fuerzas Intermoleculares

### Fuerzas de Repulsión

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 299.

Además de estas fuerzas atractivas existen otras fuerza repulsivas derivadas de las repulsiones interelectrónicas e internucleares.

A distancias extremadamente cortas la superposición de las nubes electrónicas y la proximidad de los núcleos hace que estas fuerzas aumenten extraordinariamente de magnitud  $1/r^n$   
(n = 5–12)

**Fig - 113** Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 100.

**Fig - 114** Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

Tipo de Fuerzas	Intensidad	Dependencia de r
Enlace covalente	Muy fuerte	Compleja, de largo alcance
Enlace iónico	Muy fuerte	1/r largo alcance
Ión-dipolo	Fuerte	1/r <sup>2</sup> corto alcance
Dipolo-Dipolo	Moderadamente fuerte	1/r <sup>3</sup> corto alcance
Ión-Dipolo Inducido	Débil	1/r <sup>4</sup> muy corto alcance
Dipolo-Dipolo Inducido	Muy débil	1/r <sup>6</sup> extremadamente corto alcance
Dispersión de London	Muy débil	1/r <sup>6</sup> extremadamente corto alcance

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 296.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 100.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 348.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

“*caso límite*” de interacción dipolo-dipolo – Identidad propia, estudio por separado.

Latimer y Rodebush – (1920) – Justificar la asociación el agua y el HF líquido, la gran  $\epsilon$  dieléctrica del agua, la existencia de moléculas diméricas de ácido acético, la alta movilidad del  $H_2$  en agua, la debilidad del  $NH_4OH$  como base, ...

Originalmente, interacción ión-dipolo o dipolo-dipolo ( $H^{\delta+}$ ), pero la energía de interacción en moléculas con grupos  $-FH$ ,  $-OH$  y  $-NH$  resulta demasiado elevada.

Por otro lado, no puede ser un simple enlace covalente, dado que el H sólo tiene un orbital (1s) con tan poca energía que es difícil que participe en más de un enlace.

Energía  $F-H-F^-$  ( $HF_2^-$ ) es  $\approx 30$  kCal/mol, intermedio entre un enlace covalente y una interacción intermolecular.

En enlace de hidrógeno es el más común y fuerte de las interacciones intermoleculares, salvo las interacciones iónica y covalente – el principio estructural más sencillo e importante en Química, Biología, Cristalografía, Mineralogía, Meteorología, Geología, ...

En enlace de hidrógeno se describe habitualmente en términos del isótopo ligero ( $^1H$ ), pero se presenta exactamente igual en los isótopos pesados D ( $^2H$ ) y T ( $^3H$ ).

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Algunas características del Enlace de Hidrógeno Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 269.

Los enlaces de Hidrógeno implican habitualmente átomos muy electronegativos (F, O, N, Cl), aunque se conocen casos con Carbonos cuya electronegatividad ha sido exaltada por efecto de los sustituyentes.

Los datos energéticos indican una fortaleza intermedia entre los enlaces propiamente dichos (iónico y covalente) y las interacciones intermoleculares, del orden de 3–10 kCal/mol.

**Tabla 9.4** Comparación entre las entalpías del enlace de hidrógeno con las entalpías de los correspondientes enlaces covalentes E–H (kJ mol<sup>-1</sup>)

	Enlace de hidrógeno		Enlace covalente
HS–H···SH <sub>2</sub>	7	S–H	363
H <sub>2</sub> H–H···NH <sub>3</sub>	17	N–H	386
HO–H···OH <sub>2</sub>	22	O–H	464
F–H···FH	29	F–H	465
HO–H···Cl <sup>-</sup>	55	Cl–H	428
F···H···F <sup>-</sup>	465	F–H	565

Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F.  
 Traducción española de la 4ª Ed. “*Química Inorgánica*”,  
 McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 248.

Estos enlaces se forman y rompen con gran facilidad, y tan deprisa que son de particular importancia en sistemas biológicos donde los cambios de energía son mínimos.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.



## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Algunas características del Enlace de Hidrógeno Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 269.

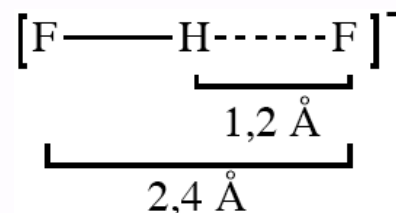
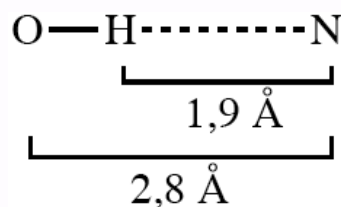
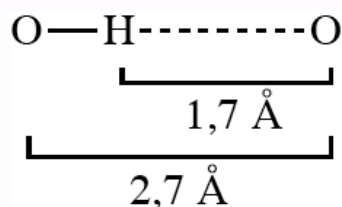
La fuerza del Enlace de Hidrógeno aumenta cuando lo hace la electronegatividad de los átomos unidos al mismo.  $\text{CH}_3\text{Cl} < \text{CH}_2\text{Cl}_2 < \text{CHCl}_3$   $\text{CH}_3\text{Cl} < \text{CH}_3\text{F}$

El tamaño del átomo implicado también es importante – N (pequeño) da puentes de hidrógeno más fuertes que el Cl (grande), pese a tener similar electronegatividad.

Longitud del Enlace de Hidrógeno, se da como distancia entre los dos átomos pesados. Más recientemente se utilizan las tres distancias y el ángulo implicados.

Criterios – Distancia inferior a la suma de los radios de Van der Waals.

En general, no siempre, los Enlace por Puente de Hidrógeno *no suelen ser simétricos* (como se suponía originalmente) sino *asimétricos*.



\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

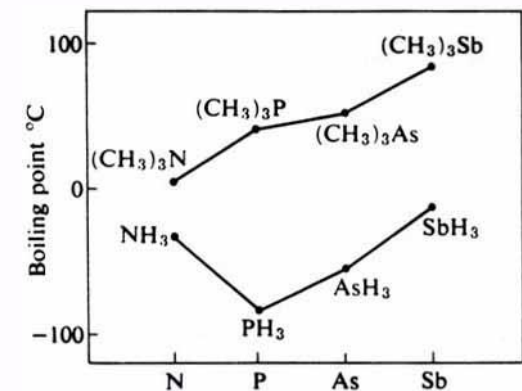
## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Evidencias

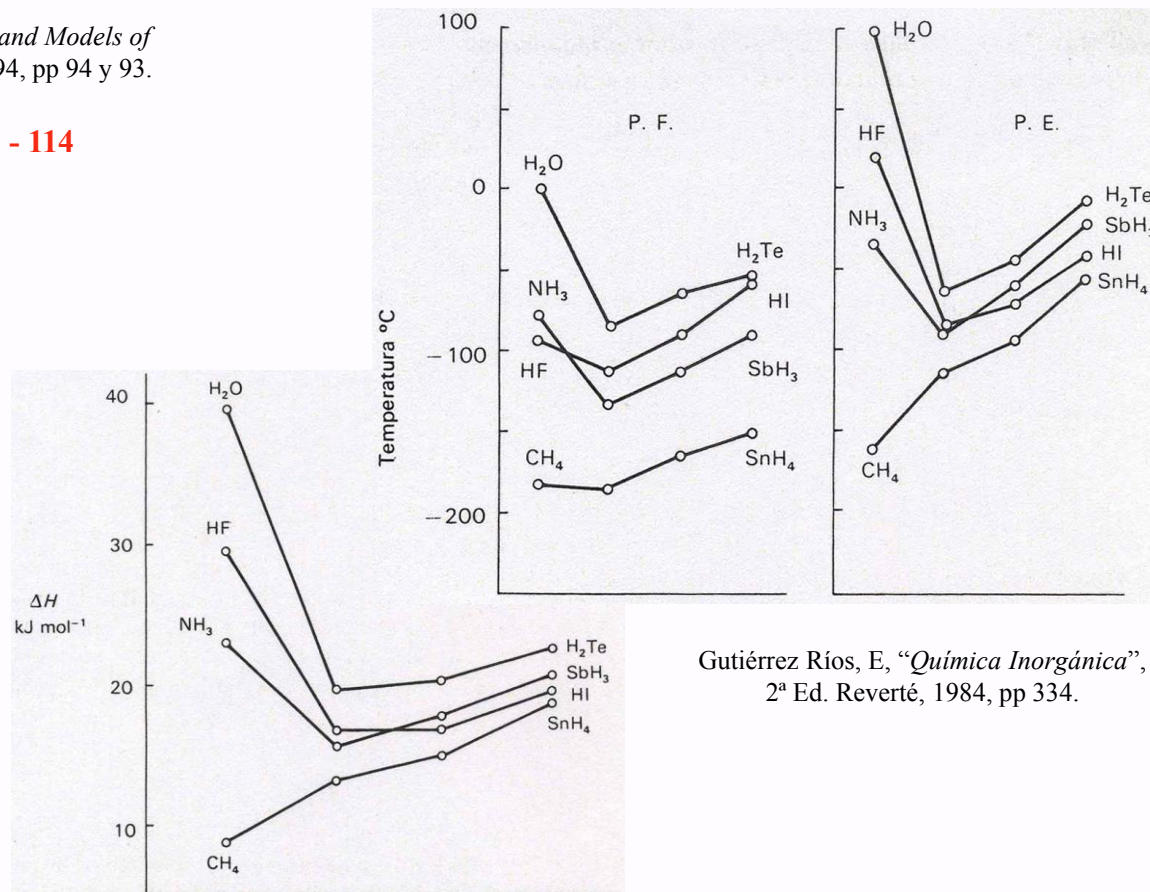
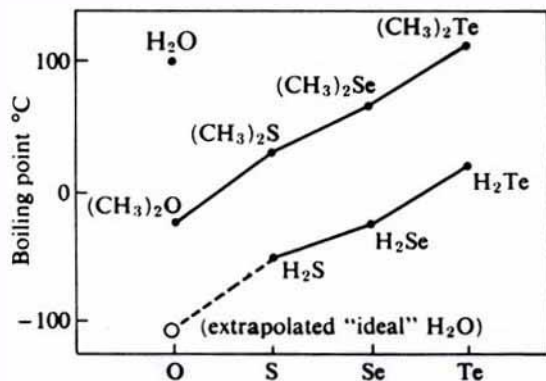
Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 275**.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92**.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 94 y 93.



**Fig - 114**



Gutiérrez Ríos, E, “*Química Inorgánica*”, 2ª Ed. Reverté, 1984, pp 334.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92**.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268**.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 300**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 181**.

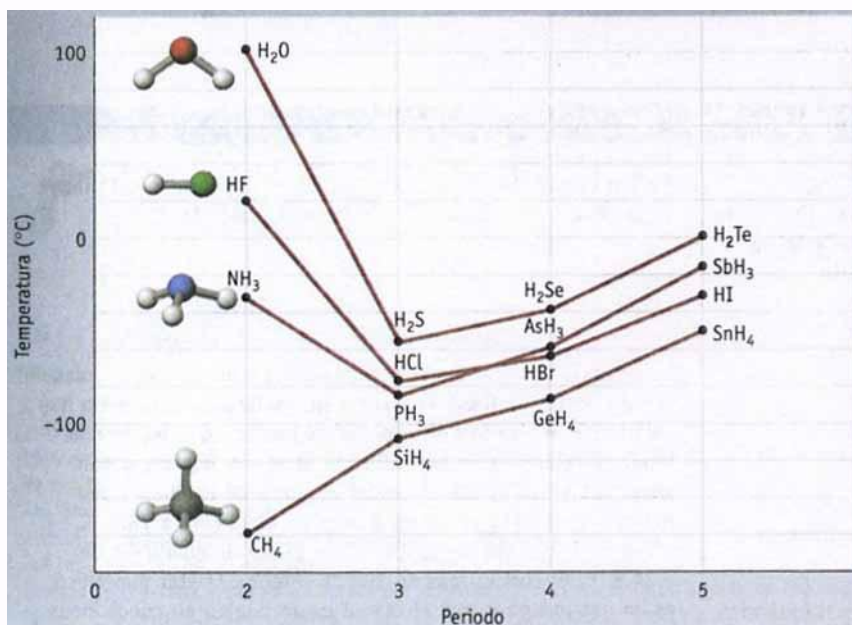
\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351**.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

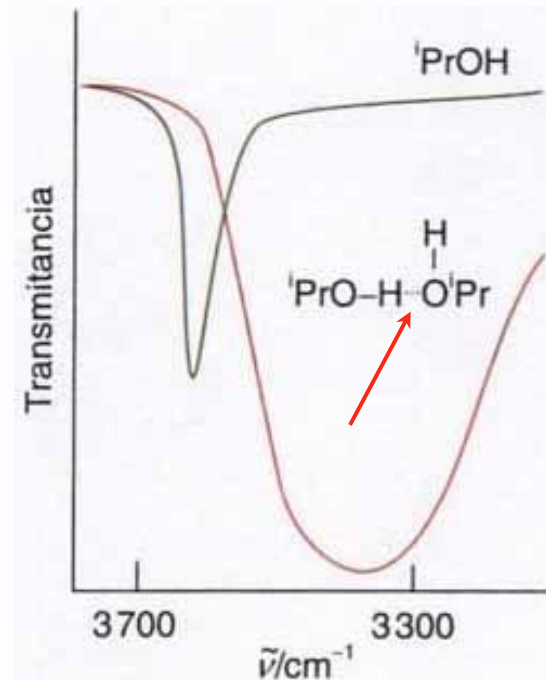
### Evidencias

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 275.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.



Kotz, J. C.; Treichel, P. M., “*Química y Reactividad Química*”, 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 517.



Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. “*Química Inorgánica*”, McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 248.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

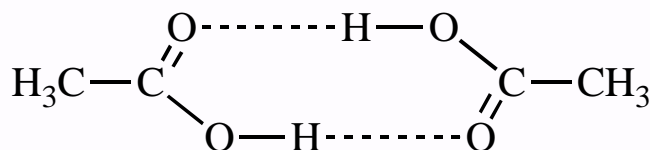
## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Evidencias

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 275.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

- \* Determinación estructural de compuestos cristalinos mediante difracción de neutrones.
- \* Determinación Peso molecular del AcH en benceno, se obtiene 120 g/mol en lugar de 60 g/mol.



Calor de disociación del  
dímero 13,8 kCal/mol

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

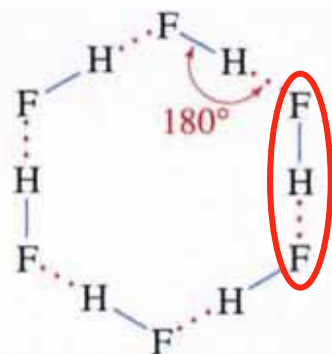
\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

**Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno**

**Tipos de Enlace**

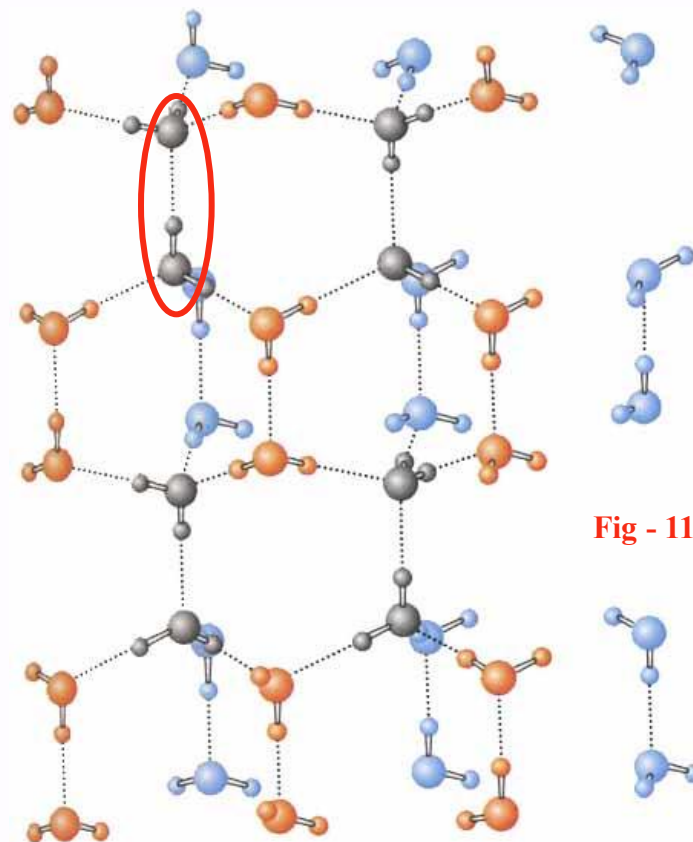
Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 272.**

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 95.**



**▲ FIGURA 13.28**  
**Enlace de hidrógeno en el**  
**fluoruro de hidrógeno gaseoso**

Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., “*Química general*”, 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 501.



**Fig - 116**

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G. Traducción española de la 2ª Ed. “*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006, pp 163.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92.**

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268.**

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 300.**

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 181.**

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351.**

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

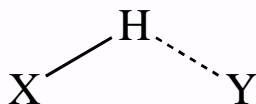
### Tipos de Enlace

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 272**.

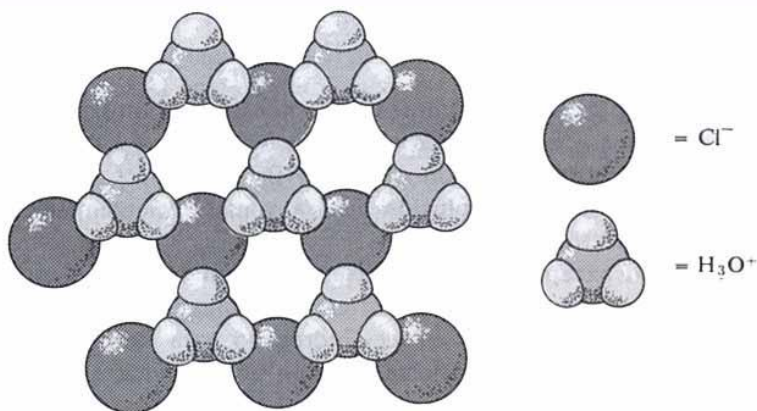
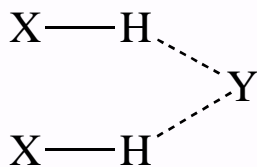
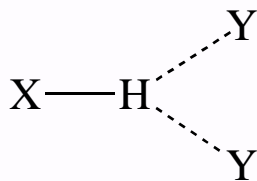
Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 95**.



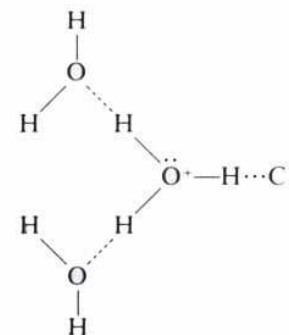
Curvo o angular



Bifurcado



Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., Traducción española de la 1ª Ed. “*Conceptos y Modelos en Química Inorgánica*”, Reverté, 1977, pp 236.



**Fig - 118**

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92**.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268**.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 300**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 181**.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351**.

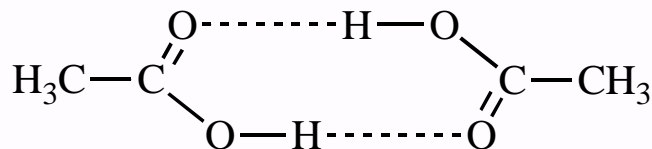
## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Tipos de Enlace

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

Intermoleculares: entre distintas moléculas  
Nº limitado o ilimitado



Intramoleculares: entre fragmentos de una misma molécula

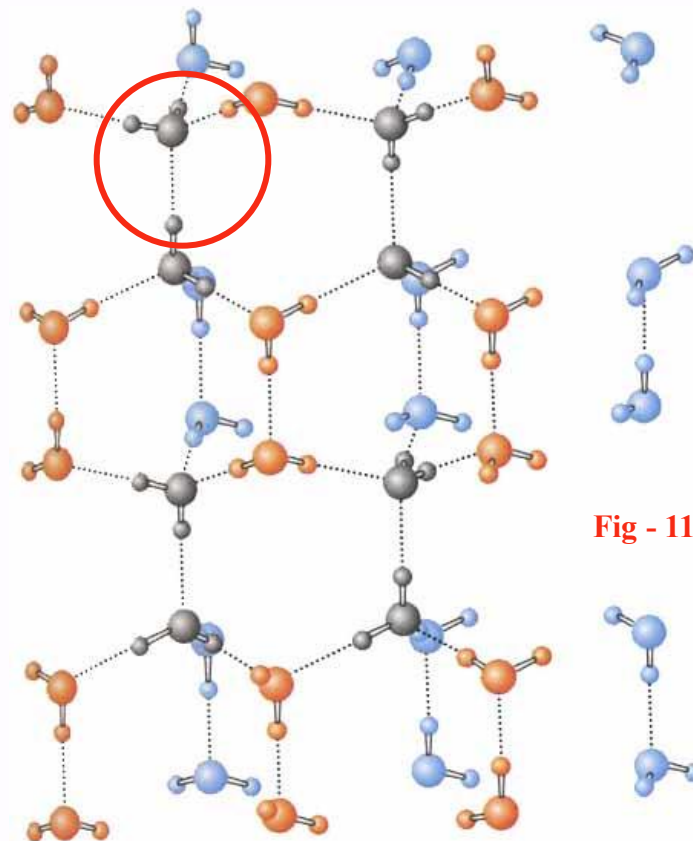
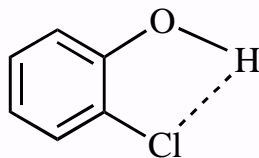


Fig - 116

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G. Traducción española de la 2ª Ed.  
“*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006, pp 163.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Tipos de Enlace

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

Un caso especial es el  $\text{FHF}^-$ , en forma lineal, mientras que el  $\text{FH}$  sólido da lugar a cadenas en zig-zag con ángulos de  $120^\circ$ .



Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1988, pp 273.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 96.

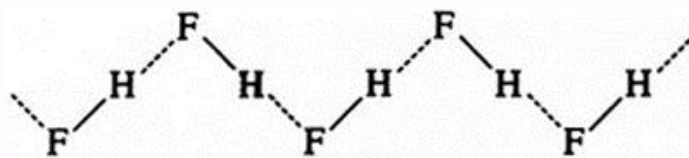
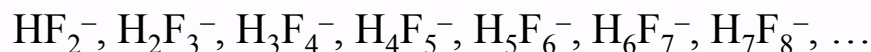
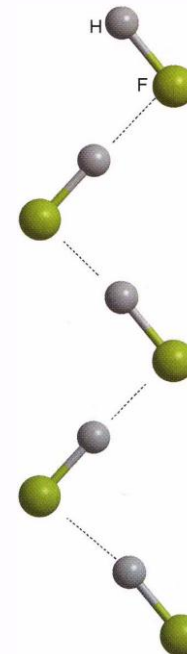


Fig - 115

Solid HF



Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F.  
 Traducción española de la 4ª Ed. “*Química Inorgánica*”,  
 McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 248.



\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.



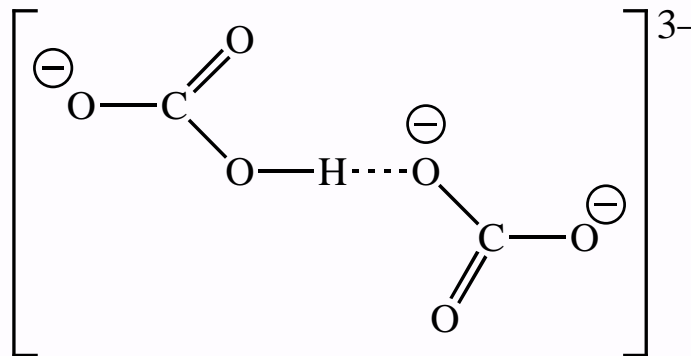
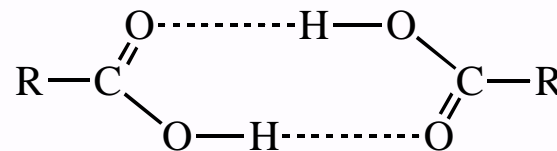
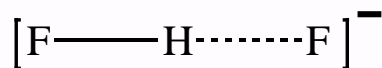
## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Estructuras

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

### Grupos Finitos



\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Estructuras

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

### Grupos Finitos

### Cadenas Infinitas

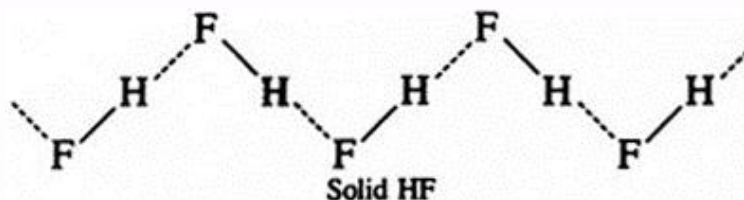
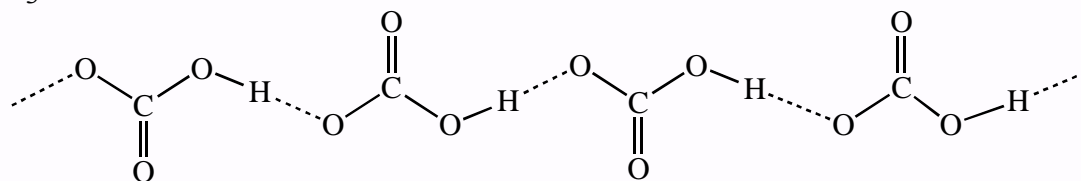


Fig - 115



\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Estructuras

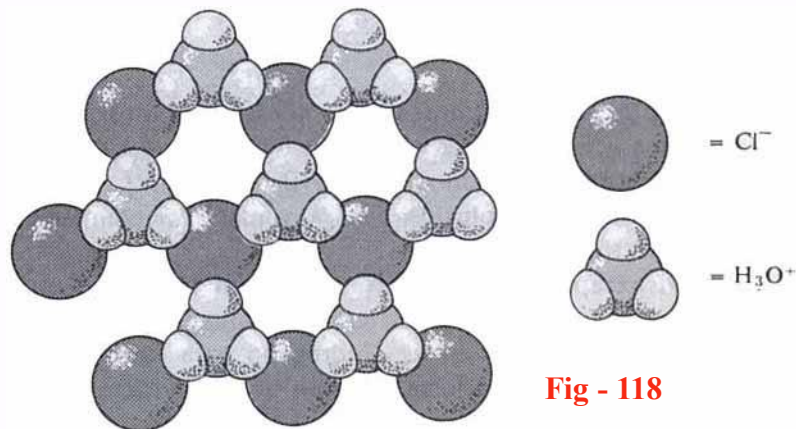
Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

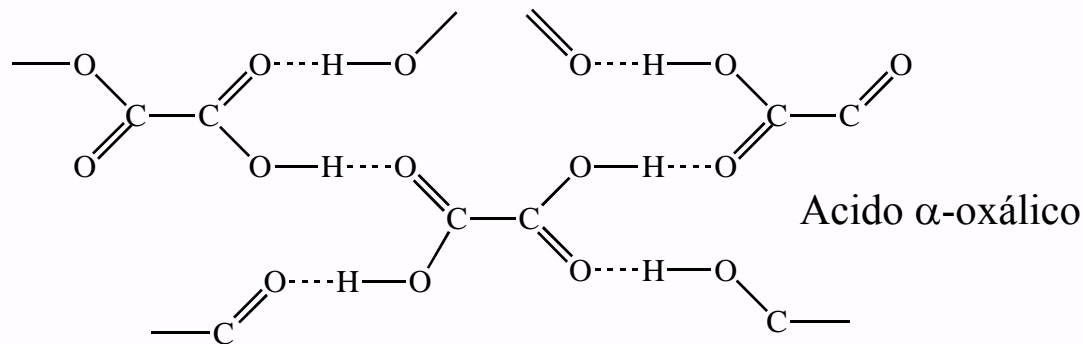
Grupos Finitos

Cadenas Infinitas

Capas bidimensionales infinitas



Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., Traducción española de la 1ª Ed.  
“*Conceptos y Modelos en Química Inorgánica*”, Reverté, 1977, pp 236.



\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Estructuras

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

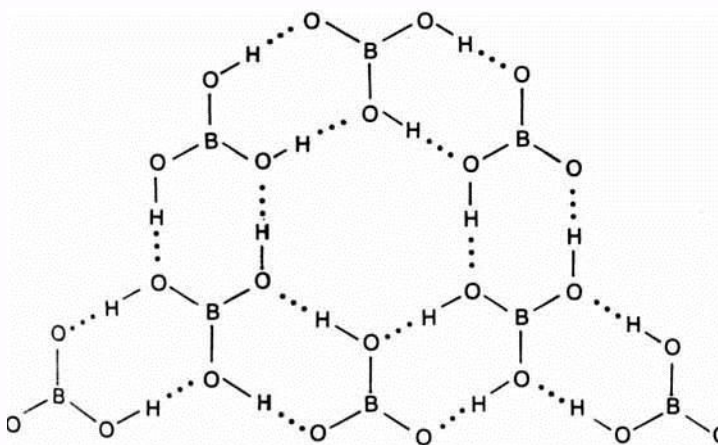
Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

Grupos Finitos

Cadenas Infinitas

Capas bidimensionales  
infinitas

Fig - 117



Lee, J. D., “*Concise Inorganic Chemistry*”, 5ª Ed.,  
Chapman & Hall, Londres, 1998, pp 259.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Estructuras

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 272.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 95.

Grupos Finitos

Cadenas Infinitas

Capas bidimensionales  
infinitas

Estructuras tridimensionales

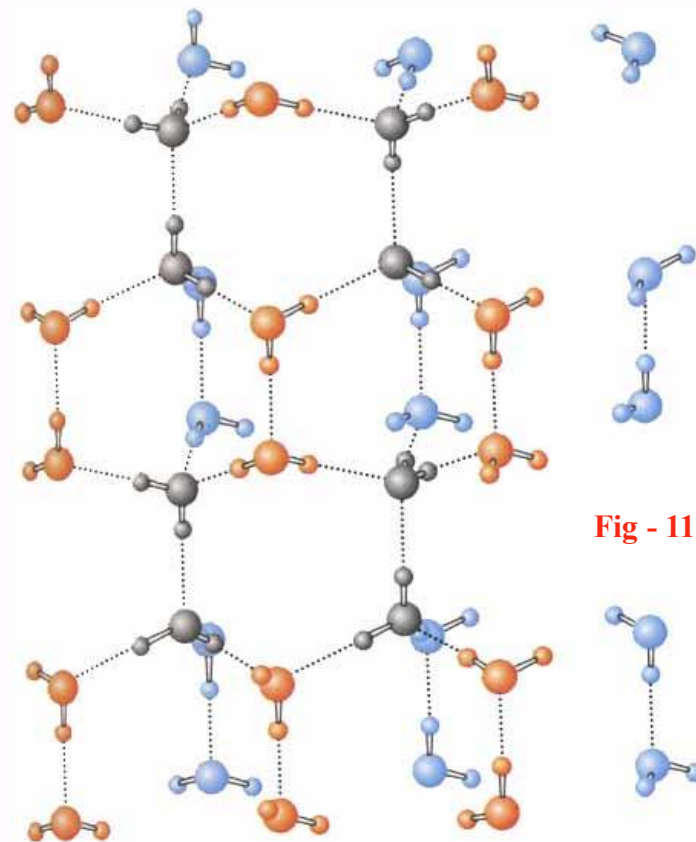


Fig - 116

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G. Traducción española de la 2ª Ed.  
“*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006, pp 163.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 300.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 181.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## **Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno**

### **Consideraciones Teóricas**

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 274.**

Modelo plenamente satisfactorio:

- \* Permite calcular energías de enlace del orden de magnitud correcto.
- \* Debe ser consistente con las propiedades direccionales observadas.
- \* Debe interpretar correctamente el resto de propiedades del sistema.

Tres modelos propuestos:

- \* Electrostático
- \* Enlace de Valencia
- \* Orbitales Moleculares

Ninguno de ellos resulta plenamente satisfactorio.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268.**

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92.**

\* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351.**

## **Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno**

### **Consideraciones Teóricas**

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 274.**

**Modelo Electrostático:** Basado en interacciones ión-dipolo o dipolo-dipolo.

A favor:

- \* El Enlace por Puente de Hidrógeno sólo se presenta en sistemas implicando átomos muy electronegativos.
- \* Elude el problema de una covalencia 2 para el hidrógeno.
- \* Buena concordancia con los valores de energía y las geometrías observadas.

Pegas:

- \* La cortitud de algunas interacciones sugiere un cierto solapamiento.
- \* No justifica la existencia de enlaces de hidrógeno simétricos ( $\text{HF}_2^-$ ).

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268.**

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92.**

\* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351.**

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Consideraciones Teóricas

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 274.

**Modelo de Enlace de Valencia:** Basado en considerar que en la molécula  $A-H \cdots B$ , un par electrónico de B está dirigido hacia el átomo H. Resonancia.



A favor:

- \* Puede explicar la existencia de enlaces de hidrógeno simétricos.
- \* Requiere delocalización del enlace covalente a ambos lados del hidrógeno, y la contribución de formas iónicas.

Pegas:

- \* Impone una covalencia 2 para el hidrógeno.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

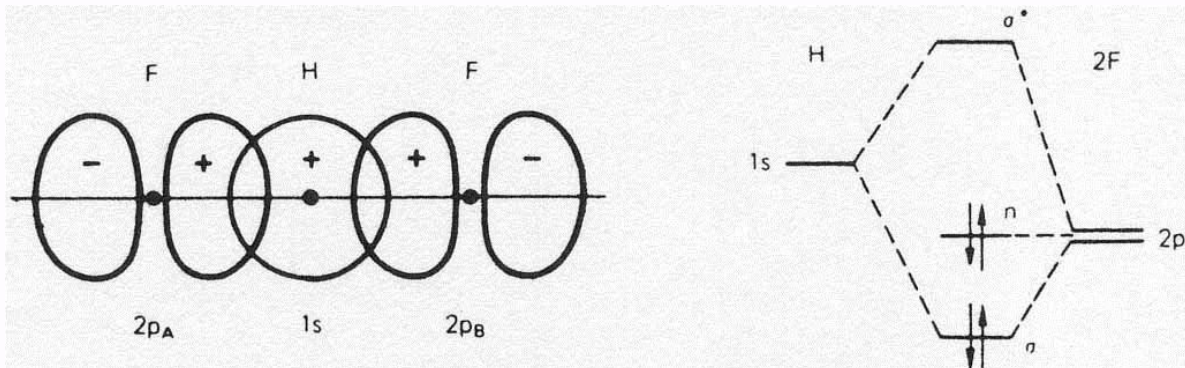


## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Consideraciones Teóricas

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 274.

**Modelo de Orbitales Moleculares:** Implicando un enlace de 3 centros y 4 electrones.



A favor:

- \* Dificulta la interacción covalente sobre los tres átomos implicados,
- \* Puede explicar la existencia de enlaces de hidrógeno simétricos.

Pegas:

- \* Impone una covalencia 2 para el hidrógeno.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## **Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno**

### **Consideraciones Teóricas**

Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 274.**

Ninguno de los tres modelos propuestos resulta plenamente satisfactorio:

- \* Electrostático
- \* Enlace de Valencia
- \* Orbitales Moleculares

El modelo que se utiliza habitualmente es el Electrostático, dado que es el más sencillo, permite un cálculo bastante aproximado de las energías implicadas, y resulta relativamente sencillo dotarle de una cierta direccionalidad propia del Enlace por Puente de Hidrógeno, conduciendo a resultados satisfactorios.

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268.**

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92.**

\* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351.**

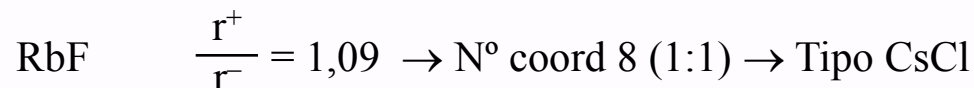
## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Sistemas Inorgánicos

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”,  
3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 97.

- \* Hidruros covalentes simples: HF, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, ...      T<sub>f</sub><sup>a</sup> habitualmente alta
  - \* Interacción electrostática
  - \* Polarización
  - \* Fuerzas atractivas de V.d.W.
  - \* Fuerzas repulsivas (electrones corticales)

- \* Carácter direccional, que influye decisivamente en las estructuras cristalinas.



\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

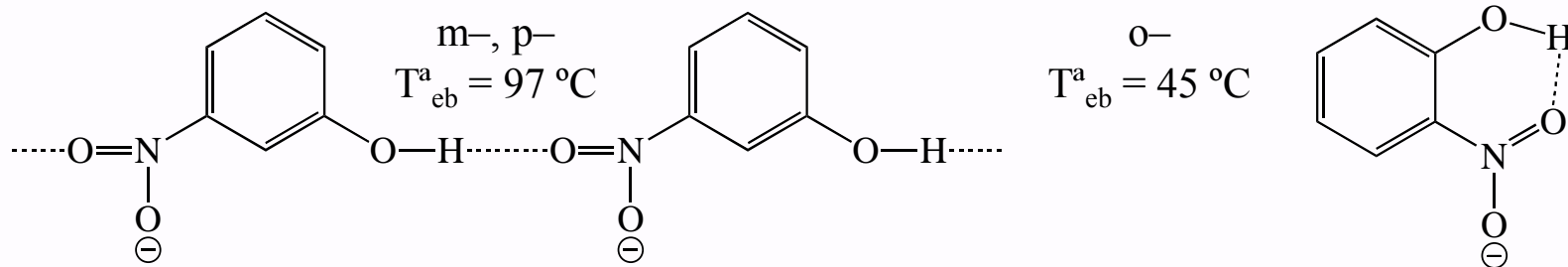
\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

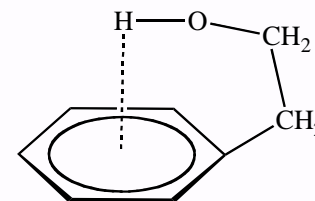
## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno Sistemas Inorgánicos

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry",  
3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 97.

\* Inter- Intra- molecular: Nitrofenol



–O–H puede dar interacciones de puente de hidrógeno con centros de elevada densidad electrónica: C=C, C≡C, Ph, ...



\* Moeller, T. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 268.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

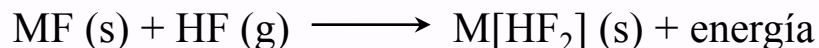
\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Sistemas Inorgánicos

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 97**.

### Interacciones Anión–Molécula



$r^+ \uparrow$ , energía  $\uparrow$

Se expande la red del MF para dar cabida al HF  $\Rightarrow$  Desprende energía

$\text{Li}^+ = 43 \text{ kJ/mol}$

$\text{K}^+ = 88 \text{ kJ/mol}$

$\text{Rb}^+ = 93 \text{ kJ/mol}$

$\text{Cs}^+ = 98 \text{ kJ/mol}$

$\text{Me}_4\text{N}^+ = 155 \text{ kJ/mol}$

$$U_r = \frac{Z^+ \cdot Z^-}{r^+ + r^-} \quad r^+ \uparrow, U_r \downarrow, T_f^a \downarrow$$

$\text{KF} \quad T_f^a = 846 \text{ }^\circ\text{C}$

$\text{KHF}_2 \quad T_f^a = 239 \text{ }^\circ\text{C}$

Haluros más pesados no dan estas especies

Sólo  $\text{CsHCl}_2$  a baja temperatura

Cationes mayores lo estabilizan,  $\text{R}_4\text{N}^+$

$\text{H}_3\text{Cl}_4^-$ ,  $\text{H}_2\text{Br}_3^-$ ,  $\text{H}_2\text{I}_3^-$

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268**.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92**.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351**.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Sistemas Inorgánicos

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 97.

### Interacciones Anión–Molécula

Solubilidad de MF en HF debida a la formación de puentes de hidrógeno  $F(HF)_n^-$

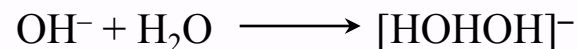
Situación totalmente análoga a la formación de  $H(H_2O)_n^+$  (n = 1, 2, 3, 4)

Del mismo modo  $OH^- + H_2O \longrightarrow OH(H_2O)_n^-$

KOH / NaOH utilizados como desecantes



$r^+ \uparrow$ , energía $\uparrow$	LiOH·H <sub>2</sub> O	14,3 kCal/mol
	KOH·H <sub>2</sub> O	20,1 kCal/mol
	NaOH·H <sub>2</sub> O	22,7 kCal/mol



Se conocen KOH·H<sub>2</sub>O      KOH·2H<sub>2</sub>O      KOH·4H<sub>2</sub>O

Interacciones Anión–Molécula similares se presentan para diversos oxoácidos

RbNO <sub>3</sub> ·HNO <sub>3</sub>	KHCOO·HCOOH	
RbNO <sub>3</sub> ·2HNO <sub>3</sub>	KHCOO·2HCOOH	NaCH <sub>3</sub> COO·CH <sub>3</sub> COOH
	KHCOO·3HCOOH	

\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

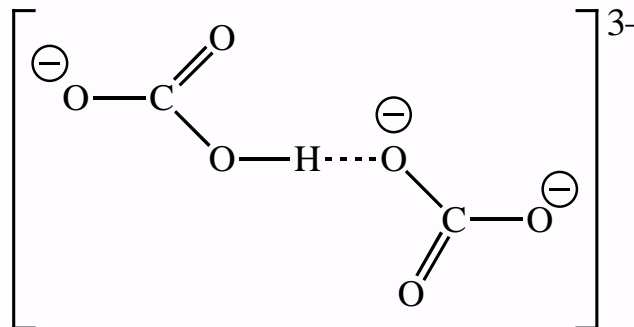
\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

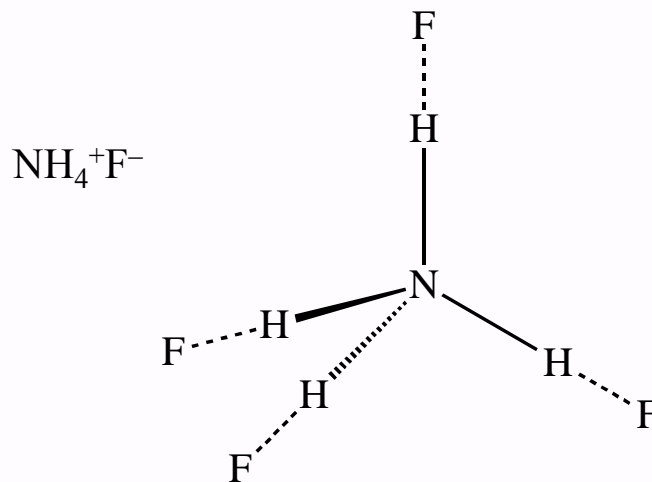
### Sistemas Inorgánicos

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 97.

### Interacciones Anión–Anión



### Interacciones Anión–Cation



\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 268.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 92.

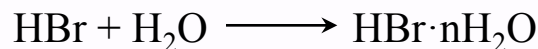
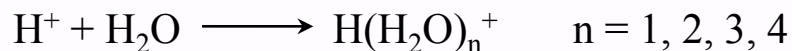
\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 351.

## Enlace de Hidrógeno – Puente de Hidrógeno – Interacción por puente de Hidrógeno

### Sistemas Inorgánicos

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 97**.

### Interacciones Cation–Molécula



Especie	T <sub>f</sub> <sup>a</sup> (°C)
HBr	
HBr·H <sub>2</sub> O	
HBr·2H <sub>2</sub> O	
HBr·3H <sub>2</sub> O	
HBr·4H <sub>2</sub> O	

Covalente, interacción débil, T<sub>f</sub><sup>a</sup> ↓

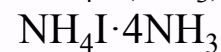
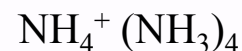
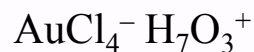
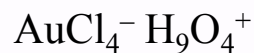
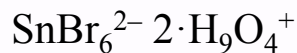
Iónicos, interacción fuerte, T<sub>f</sub><sup>a</sup> ↑



r<sup>+</sup> ↑, U<sub>r</sub> ↓, T<sub>f</sub><sup>a</sup> ↓

**Para casa**

**Pensadlo y explicadlo con todo detalle por escrito**



\* Moeller, T. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 268**.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, **pp 92**.

\* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 351**.



## Estructura de Sólidos Moleculares

### Sin Interacción de Enlace de Hidrógeno intermolecular

Principio de máxima compacidad, casi siempre compacta, construida con la máxima utilización y economía del espacio disponible.

Modelo de empaquetamiento de moléculas de Kitaigorodskii (1955): “*huecos*” y “*protuberancias*”

Gases Nobles (Ne, Ar, Kr): Estructura Cúbica Compacta, similar a los metales  
He, Hexagonal compacta a altas presiones.

Moléculas diatómicas:

$T^a \approx T^a$  fusión, agitación térmica elevada, libre rotación,  
empaquetamiento de “pseudo-esferas”.

$H_2$ ,  $\beta-N_2$ , CO      Hexagonal compacto

$\gamma-O_2$ ,  $\beta-F_2$       Cúbico compacto

$T^a \ll T^a$  fusión, poca agitación, rotación congelada, orientación preferencial  
estructuras menos simétricas, deformadas

$Cl_2$ ,  $Br_2$ ,  $I_2$       Ortorrómbicos

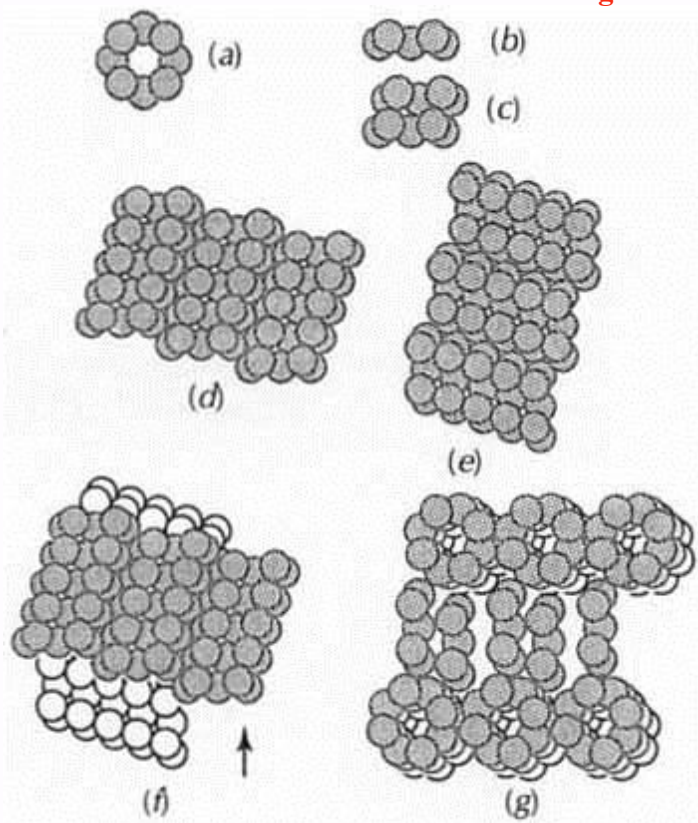
## Estructura de Sólidos Moleculares

### Sin Interacción de Enlace de Hidrógeno intermolecular

#### Empaquetamiento de moléculas cíclicas $S_8$

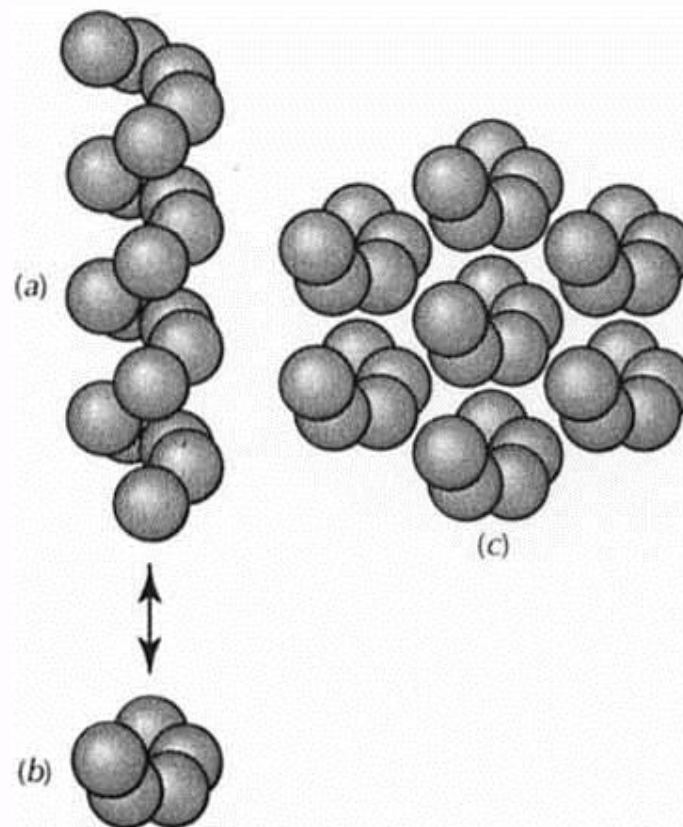
Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",  
Reverté, 1999, pp 354.

Fig - 119



#### Empaquetamiento hexagonal de cadenas helicoidales de $\alpha$ -Se

Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",  
Reverté, 1999, pp 367.



## Estructura de Sólidos Moleculares

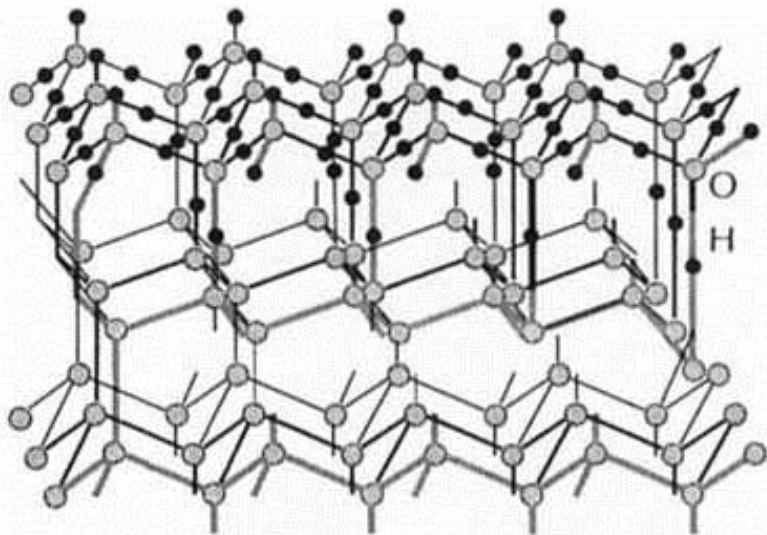
### Con Interacción de Enlace de Hidrógeno intermolecular

La direccionalidad del Puente de Hidrógeno manda, condicionada por el poliedro de coordinación. Similar al empaquetamiento en sólidos covalentes, empaquetamiento de poliedros. Estructuras menos compactas (hielo flota).

0°C, 1 atm, Hielo h ( $H_h$ ), estructura hexagonal “derivada” de la hexagonal tipo diamante, muy similar a la tridimita  $[OH_4] / [SiO_4]$ .

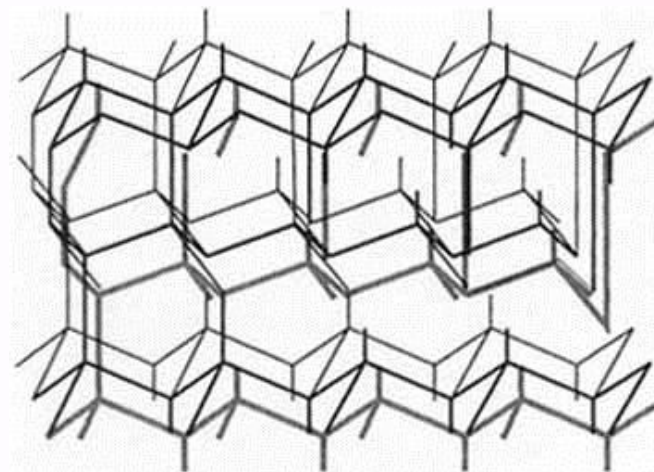
Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”,  
Reverté, 1999, pp 355.

**Fig - 120**



Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”,  
Reverté, 1999, pp 340.

**Fig - 64**



## Estructura de Sólidos Moleculares

### Con Interacción de Enlace de Hidrógeno intermolecular

Al igual que C, SiO<sub>2</sub>, el hielo presenta varias formas polimórficas dependiendo de la forma en que se empaqueten los poliedros:

H<sub>h</sub> Hexagonal tipo diamante (tridimita)

H<sub>c</sub> Cúbica tipo diamante (cristobalita)

Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 356.

**Fig - 121**

Relaciones estructurales				
Tipo de red	Elementos	Compuestos tipo XY	Compuestos tipo XY <sub>2</sub>	
Red cúbica tipo diamante	C (diamante), Si, Ge, Sn (gris)	SiC (carborundo) ZnS (blenda de cinc o esfalerita)	SiO <sub>2</sub> (cristobalita)	H <sub>2</sub> O (H <sub>c</sub> ) (estable sólo a bajas temperaturas)
Red hexagonal tipo diamante	Diamante hexagonal (estable sólo a altas presiones)	ZnS (wurtzita)	SiO <sub>2</sub> (tridimita)	H <sub>2</sub> O (H <sub>h</sub> ) (estable en condiciones normales)