La fuerza de los enlaces químicos

¿¿Realmente dimensionas que tan fuerte es un enlace??, este artículo te lleva a comprender las magnitudes a niveles macroscópicos para que tengas referencia de comparación.

Jerry D. Christian
NASA-Amos Research Center
Moffett Field, California 94035
(Adaptado y traducido por Fernándo Amézquita López y Diana Mendoza O.)

Resumen

El romper un enlace químico, requiere de una extraordinaria magnitud de fuerza que los estudiantes no dimensionan, pues cantidades tan pequeñas de fuerza por molécula no dicen nada, pero si hacemos la masa de cada átomo tan grande como una pelota de béisbol, nos daremos cuenta que la ruptura implica aplicar fuerzas extraordinariamente grandes.

Los enlaces moleculares generalmente son considerados en la literatura en términos de la energía requerida para romperlos, y no nos asombran los valores obtenidos. Por ejemplo, para romper el enlace del Cl_2 cuya energía es de 238,488 $kJ \cdot mol^{-1}$, se necesitan solamente 39,58 X10^{-20} $kJ \cdot molécula^{-1}$, una cantidad de energía muy pequeña, en verdad e imposible de medir directamente. Sin embargo, las fuerzas involucradas para realizar la energía cuando se rompe el enlace operan sobre una distancia muy pequeña, solo 294 pm, y así,
$f_{prom} \approx D_e/(r-r_e)$.

El siguiente ejemplo es una ilustración para demostrar, dramáticamente, lo grande de las fuerzas de los enlaces químicos comparados a conceptos macroscópicos.

Considere la molécula diatómica homonuclear $^{35}Cl_2$ cuya energía de potencial puede ser representada por la función de Morse

$$V_{(r)}=238{,}488[1-e^{-2{,}037(r-198{,}8)}]^2\ kJ \cdot mol^{-1} \quad \textbf{(1)}$$

$V_{(r)}$ es la energía potencial de la molécula y r es la longitud de enlace en picómetros; la función es graficada en la Figura 1. Esta relación será considerada como comprendida y es una representación del enlace químico.

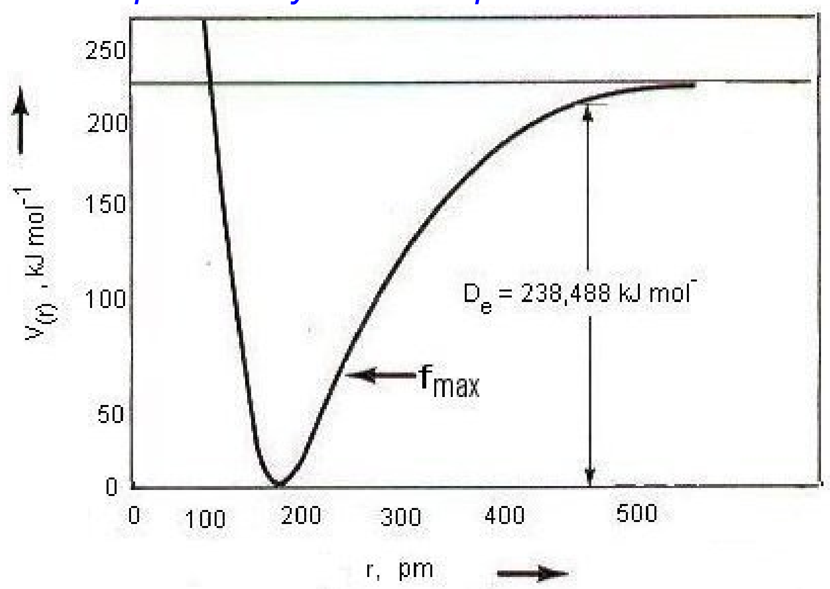

Figura 1. Gráfico de la energía potencial para la molécula de Cl_2.

Las fuerzas involucradas en la disociación de la molécula serán discutidas a continuación. Al considerar las fuerzas promedio, se asumirá arbitrariamente que la molécula será disociada cuando los átomos se separen más allá del potencial, relativo a la separación infinita de los átomos, es reducida en un 99,5% del potencial de la molécula en la longitud de enlace de equilibrio (r_e) para el Cl_2 de 198,8 pm; esto ocurre a 492,8 pm.

La fuerza del enlace está dada por

$$f(r) = \frac{dV(r)}{dr} = -971.5248\left[e^{-2.037(r-198.8)} - e^{-4.074(r-198.8}\right] \; kJ\ mol^{-1} pm^{1} \quad \textbf{(2)}$$

La fuerza externa requerida para mantener el enlace en cualquier longitud es simplemente el negativo de este valor y la fuerza promedio necesaria para alargar el enlace a una longitud determinada de la longitud de equilibrio de 198,8 pm está dada por

$$f_{prom} = \frac{\int_{198,8}^{r} - f(r)dr}{\int_{198,8}^{r} dr}$$

$$= \frac{971.524\left[-\frac{1}{2,037}e^{-2,037(r-198,8)} + \frac{1}{4,074}e^{-4,074(r-198,8)}\right] + 238,488}{(r-198,8)} kJ \cdot mol^{-1} \cdot pm^{-1}, \quad (3)$$

Cuando el enlace es alargado desde 198,8 pm, podemos observar de la ecuación (2) que la fuerza inicial requerida es cero; cuando el enlace es alargado se alcanza una fuerza máxima[1] *de 2,431 $kJ{\cdot}mol^{-1}{\cdot}pm^{-1}$ en el punto de inflexión de 232,8 pm y por encima del alargamiento, la fuerza disminuye gradualmente de nuevo y se aproxima a cero cuando la distancia aumenta. La fuerza promedio requerida para romper el enlace (alargarlo a 492,8 pm) es 0,8075 $kJ{\cdot}mol^{-1}{\cdot}pm^{-1}$. En la Figura 2 se grafica la fuerza opositora al alargamiento del enlace como una función de la distancia internuclear. A distancias menores que la longitud de enlace de equilibrio las fuerzas repulsivas en la molécula aumentan muy rápidamente.*

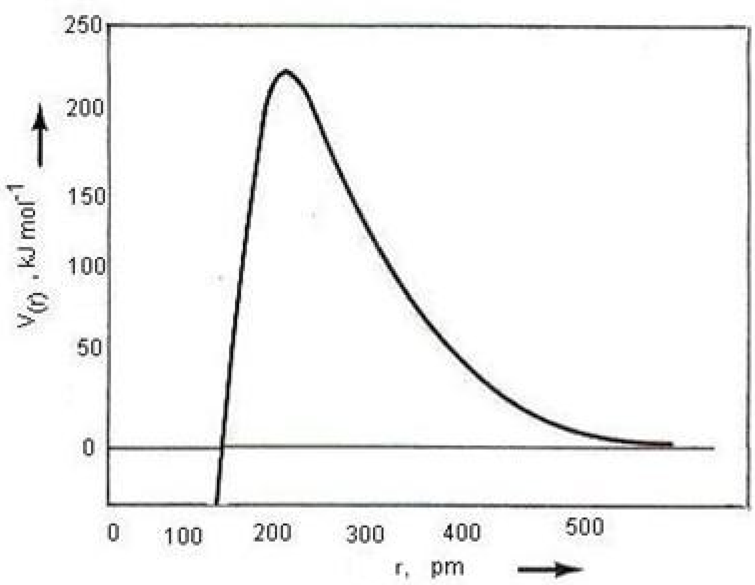

Figura 2. Fuerza $-f(r)$, requerida para alargar el enlace de la molécula de Cl_2 como una función de la distancia internuclear, r.

Aparece un resultado sorprendente cuando estas Figuras son convertidas a valores en términos de unidades de fuerza ordinaria. Usando el factor de conversión de que una kJ es igual a 10 197 147,112 $cm{\cdot}g$, la fuerza promedio requerida para romper un mol de enlaces de Cl_2 a la vez, se ha visto que es:

$$\frac{0{,}8075\ kJ\cdot mol^{-1}pm^{-1}x\,10\,197\,147{,}112\,cm\cdot g\cdot kJ^{-1}}{10^{-10}cm\cdot pm^{-1}x\,906\,184\ g\cdot ton^{-1}}=0{,}90x10^{11}tons\cdot mole^{-1}$$

Y la fuerza máxima realizada es: 2,73 x 10^{11} $tons{\cdot}mol^{-1}$*. Por molécula* f_{prom} = $1{,}136x10^{-6}$ $g{\cdot}mole^{-1}$ *y* f_{max} = *0,411 x* $10^{-6}$$g{\cdot}molecula^{-1}$*. Esto es una fuerza de 0,4* μg *para una molécula sencilla ¡¡Lo cual es macroscópicamente medible!! En términos de un número de masa requerida para ejercer la fuerza esto es equivalente a 3,5x*10^{15} *moléculas suspendidas de la punta de una molécula con la otra punta mantenida fija.*

La fuerza de enlace tan grande explica porqué las fibras metálicas son excepcionalmente fuertes para su tamaño. Haciendo una comparación convencional, la fuerza tensora del Tungsteno es de 1 726 572 500 $g{\cdot}cm^2$. Usando el radio covalente de 130 pm para el tungsteno este cálculo es de 0,022 μg por área de sección transversal atómica, dentro del orden de magnitud de la fuerza de enlace calculada para el Cl_2. La fuerza tensora de las fibras del grafito es del orden de 0,005 μg por área de sección transversal atómica.

Para obtener una sensación aún más impresionante de la magnitud de la fuerza del enlace vamos a expandir la molécula a dimensiones macroscópicas. Una molécula de 200 pm de longitud de enlace puede imaginarse como dos micropelotas de béisbol de 100 pm de radio que se mantienen unidas por un resorte de "Morse" (que presenta armonicidad cuando es alargado). Si esto es comparado con una pelota ordinaria de béisbol de, por decir 3,7 cm de radio, tendremos un incremento lineal de $3{,}7x10^{8}$veces o un incremento de volumen de $51x10^{24}$ veces. Si las fuerzas son multiplicadas por este factor, se obtienen $0{,}411x51x10^{24}$ = $21x10^{24}$ μg o **23 billones de toneladas** para una fuerza máxima de $0{,}36x51x10^{24}$= $6{,}9x10^{24}$ μg o **7,6 billones de toneladas** para la fuerza promedio. Así, uno puede imaginar la separación de una molécula como equivalente a separar un par de pelotas de béisbol conectadas con un resorte requiriendo una fuerza máxima de 23 billones de toneladas. La fuerza máxima ocurrirá en una separación de los centros de las pelotas de béisbol de $3{,}7x10^{8}x2{,}33x10^{-8}$ cm= 8,6 cm y el resorte se "romperá" **[2]** en $3{,}7x10^{8}x4{,}93x10^{-8}$ cm= 18 cm. Para ser correcto la masa de la pelota de béisbol deberá estar concentrada en el "centro" (el núcleo). Puesto que la razón del diámetro nuclear atómico para el Cl es aproximadamente (10^{-6}*pm*)/(0,02*pm*)=$5x10^{-5}$ el núcleo de cada átomo de la pelota de béisbol seria ≈ 0,037 *mm* de diámetro y comprimiría prácticamente toda la masa 7,4 *cm.* El resto de la molécula "macroscópica" consistiría de nubes aproximadamente esféricas de electrones, llenando el espacio entre el núcleo las cuales están separadas por 7,4 *cm*. Estas nubes forman el enlace muy fuerte. Esto, entonces, tendría la característica de una molécula que ha sido aumentada al tamaño del mundo macroscópico.

La molécula (microscópica) y sus propiedades son ilustradas en la Figura 3

Figura 3. Descripción de una molécula de dimensiones macroscópicas, no se ilustra la nube electrónica.

---

[1] La distancia y el valor de la fuerza máxima son calculados de la relación:

$$-\frac{df}{dr} = 0 = 232.2\left[-2.037^{-2.37(r-198.8)} + 4.074e^{-4.074(r-198.8)}\right]$$

la cual da la solución de r= 232,8 *pm*; esto puede ser rigurosamente demostrado ser una distancia de la fuerza máxima evaluando d^2/dr^2 en 232,8 *pm* y observando que es menor que 0, f_{max} es entonces calculada para ser 2,4309 $kJ \times mol^{-1}\ pm^{-1}$.

[2] El lector puede notar que la energía de ionización de enlace de la molécula de pelotas de béisbol es[(18,2 *cm*–7,4 *cm*) ($7,62x10^{12}$ *tons*x906 184 g·ton^{-1})= $7,457x10^{19}$ *cm·g* o $7,322x10^{12}$ *kJ*)]. Es un factor de $1,85x10^{34}$ mayor que el de la molécula del Cl_2 (238,48 $kJ\cdot mol^{-1}$ o $39,59x10^{-23}$ $kJ\cdot molecula^{-1}$), aunque la razón de masa (volumen es de solamente $5,1x10^{25}$), la diferencia es solo un factor de $3,7x10^{8}$, la razón de las longitudes de enlace. Esto, claro, resulta debido a que el enlace de la molécula de pelotas de béisbol es alargado más

allá de un factor de $3{,}7x10^8$ más alejado que el enlace de Cl_2 antes de romperse. El autor siente que la analogía de un resorte "torpe" de la molécula de béisbol, que es mayor que la de la molécula de Cl_2 por un factor de la razón de la masa, es más apropiada que la razón alternativa de usar la razón de masa de 2/3 de fuerza.

REFERENCIAS:

Este artículo fue publicado en el Journal of Chemical Education, Volume 50, Number 3, pags. 176 – 177, March 1973. La conversión de las unidades al Sistema Internacional, fue hecha por los traductores.