

Interações intermoleculares

Hana Gabriela



1 Introdução

Sem as forças entre as moléculas, os tecidos de seu corpo se separariam dos ossos e os oceanos virariam gás. - Peter Atkins, Princípios de química

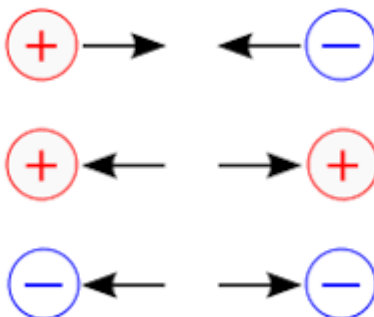
Por quê a água e petróleo são líquidos? Por quê a areia da praia e o plástico são sólidos? Essas são consequências das interações entre as moléculas, ou seja, de forças **intermoleculares**.

Para aprender sobre como as interações entre as moléculas ocorrem, deve-se ter um conhecimento prévio dos tipos de ligações químicas: iônica, covalente e metálica, já que as mesmas influenciarão diretamente a polaridade desses compostos e portanto, as interações com outros.

Além disso, entender como as moléculas se relacionam é importante para explicar, por exemplo, a aderência de tintas no papel, o motivo de porquê água e óleo não se misturam e a regra "semelhante dissolve semelhante", bem como, o motivo de porquê a água tem ponto de ebulição em 100°, algo que dada a "baixa complexidade"¹ da molécula, seria inesperado.

2 Os opostos se atraem

Sempre é bom lembrar que em interações eletrostáticas, cargas de mesmo sinal se repelem e cargas opostas se atraem.



Dessa forma, é possível prever "de onde vêm as forças intermoleculares". São interações eletrostáticas em que cargas positivas interagem com cargas negativas, no caso de atrações, nas repulsões, tem-se a interação de cargas de mesmo sinal.

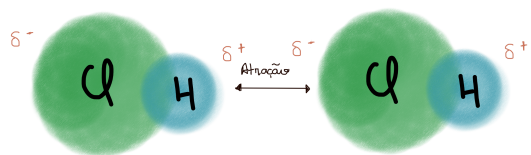
¹Comparada com as enormes biomoléculas, é claro!

3 Dipolos permanentes

O primeiro caso a ser estudado é quando ambas as moléculas que interagem são polares, ou seja, uma parte da molécula é positiva e outra é negativa, devido uma diferença de eletronegatividade entre os átomos conectados.

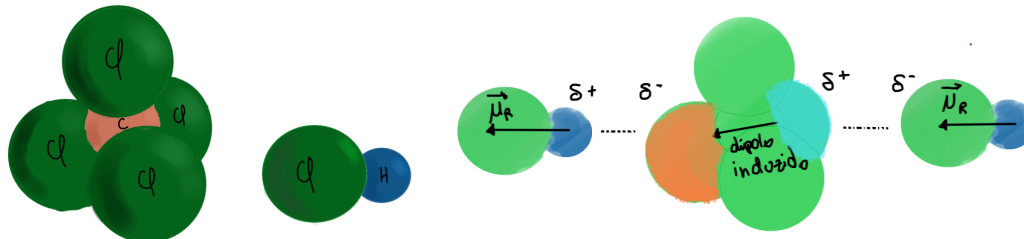
Lembrete! Moléculas podem ter suas polaridades medidas pelo vetor momento dipolar resultante $\vec{\mu}_R$. O módulo do vetor momento dipolar de cada átomo é o produto entre a carga do átomo e a distância intermolecular $\mu = q \cdot r$. Quando o vetor resultante é nulo, a molécula é apolar, e quando o vetor resultante é diferente de zero, a molécula é polar. Por isso, moléculas polares têm dipolos permanentes.

Um exemplo de interação de dipolos permanentes ocorre entre duas moléculas de HCl .



4 Dipolo-dipolo induzido

Nesse caso, uma molécula polar interage com uma apolar, assim, quando a molécula polar se aproxima da apolar, esta tem uma polaridade induzida, como por exemplo na figura a interação entre CCl_4 e HCl .

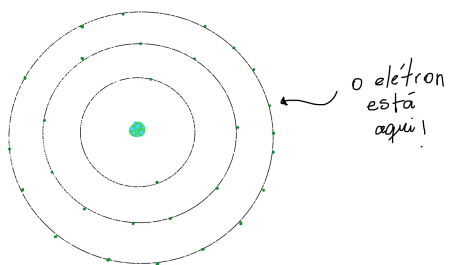


5 Dipolos induzidos

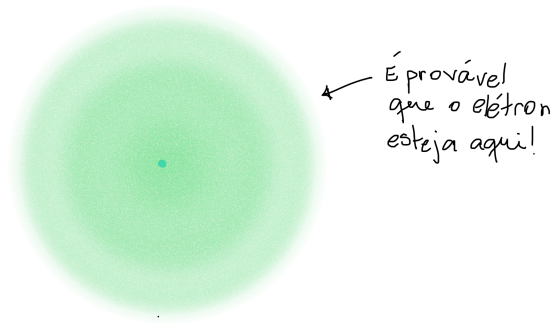
A interação de dipolos induzidos é a responsável pela interação de moléculas apolares.

Já que a molécula apolar não tem "uma parte" positiva e outra "negativa", como é que compostos de moléculas apolares como hexano conseguem ser líquidos? Como é que há interação entre elas? É então, que se introduz os conceitos de **momento dipolar instantâneo e polarizabilidade**.

Foi-se o tempo em que se pensava em um elétron "estático" nos átomos: não é possível nem localizá-lo sem perder informações valiosas, pelo princípio da incerteza. Sabe-se através das equações de onda que, elétrons têm maior probabilidade de serem encontrados nos *orbitais*. Como consequência, as moléculas, formadas por átomos, terão *nuvens eletrônicas* em que os elétrons terão maior probabilidade de serem encontrados.



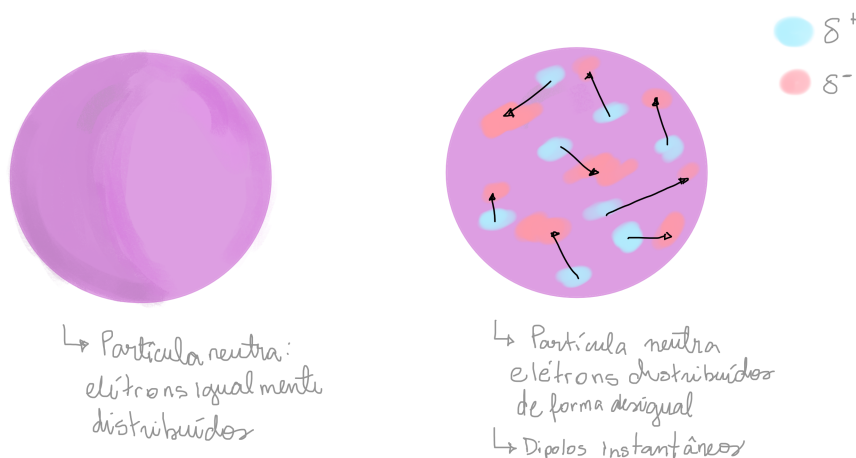
↳ órbitas



↳ orbitais

Em moléculas polares é intuitivo avaliar qualitativamente que na maior parte do tempo, uma maior parcela dos elétrons estará próxima do átomo mais eletronegativo, e então, descreve-se a interação dipolo-dipolo permanente.

Agora, como explicar as interações intermoleculares para moléculas apolares? Os elétrons não estão perfeitamente distribuídos na nuvem eletrônica, mas sim, separados e formando "cargas momentâneas", ou seja, **dipolos instantâneos**.



Dipolos instantâneos de diferentes moléculas podem interagir entre si, e então, temos as chamadas **interações dispersivas de London**.

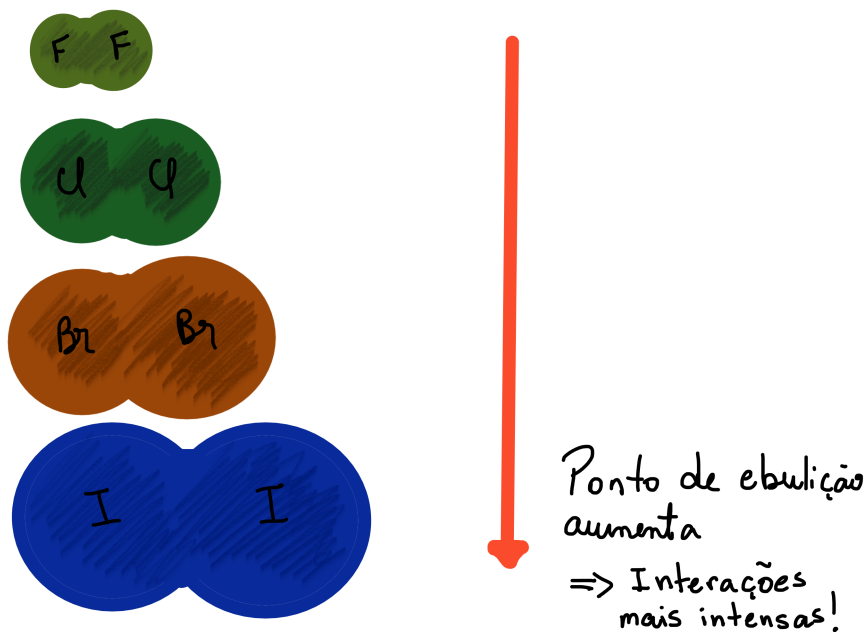
Utilizamos as forças de London para explicar as interações em moléculas apolares, mas na verdade, como qualquer molécula pode ter seus momentos dipolares instantâneos, as interações de dispersões estão presentes em todas as moléculas e átomos. Sendo um caso particular as interações de dipolos induzidos, já que estas são formadas apenas por dipolos instantâneos.

Já a polarizabilidade corresponde à facilidade de deformação da nuvem eletrônica. Assim, quanto mais polarizável uma molécula, mais favorável é a formação de momentos dipolares instantâneos e portanto, as interações de dispersão são mais intensas.

Uma molécula tem maior polarizabilidade quando a densidade eletrônica é pequena: há um espaço "grande" para "poucos elétrons" ocuparem, assim, os elétrons terão maior liberdade em seu movimento.

Assim, explica-se o motivo de porquê flúor e cloro serem gasosos, o bromo ser líquido e o iodo ser sólido. Quanto maior o raio atômico, menor a densidade eletrônica e maior a polarizabilidade, daí, o iodo tem interações mais intensas e

o flúor tem as interações mais fracas de forma que é menos energia é necessária para vaporizar o flúor, deixando seu ponto de ebulição menor e tornando-o gasoso em condições padrão e $T=273K$.



6 Íon-dipolo

Não podemos esquecer das interações entre íons e dipolos permanentes. Seguem o mesmo princípio das demais: interações eletrostáticas entre cargas positivas e negativas.

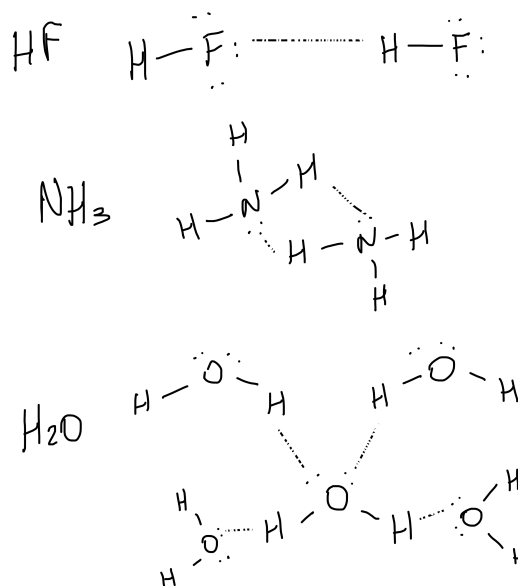
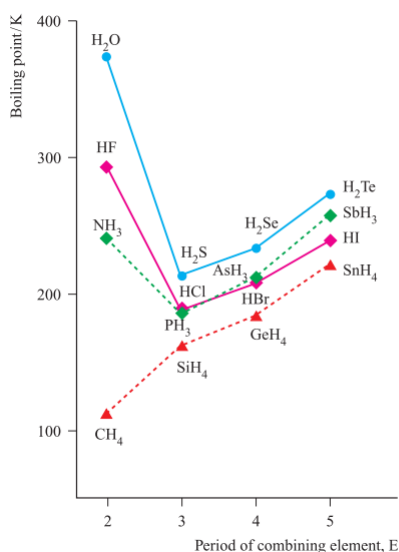
OBS.: Forças de Van der Waals - Interações de dipolos permanentes, de dipolos induzidos, dipolos instantâneos e íon dipolos são chamadas de forças de Van der Waals, como homenagem ao cientista que estudou em detalhes as diferentes interações.

7 Ligação de hidrogênio

As ligações de hidrogênio, antigamente chamadas de "pontes de hidrogênio", são as interações que explicam o ponto de ebulição anômalo da água.

As ligações de hidrogênio correspondem a uma interação de um hidrogênio de pouca densidade eletrônica com um par eletrônico de um átomo de alta densidade eletrônica, como os de maior eletronegatividade: Flúor, Oxigênio e Nitrogênio.

Assim, a amônia e o fluoreto de hidrogênio também têm ligações de hidrogênio.



No caso de ligações de hidrogênio, a intensidade está atrelada a eletronegatividade dos átomos: ligações de hidrogênio com flúor, são mais fortes que as com oxigênio. Mas isso não significa que o fluoreto de hidrogênio tem maior ponto de ebulição que a água. As interações da água são mais intensas pela quantidade! Enquanto o flúor tem apenas um hidrogênio com pouca densidade eletrônica, a água tem dois hidrogênios aptos a terem interações de hidrogênio e dois pares não ligantes. Assim, cada água pode fazer quatro ligações de hidrogênio, mas um flúor só pode fazer duas ligações de hidrogênio.

8 Repulsões

As repulsões ocorrem quando os átomos ou moléculas estão **realmente** muito próximos, de forma que orbitais desses átomos se subrepõem e formam orbitais moleculares antiligantes com elétrons, sendo uma situação muito instável.

9 Comparando as intensidades das forças intermoleculares

Quanto maior o módulo das cargas envolvidas nas interações, maior a intensidade da força eletrostática. Por isso, podemos ordenar as interações em ordem decrescente de intensidade.

1. Íon-dipolo
2. Ligações de hidrogênio
3. Dipolos permanentes
4. Dipolo permanente - dipolo induzido
5. Dipolos instantâneos.

10 O fim

Agora que sabemos um pouco mais da natureza das interações intermoleculares, podemos dar uma explicação razoável de porquê água e óleo não se misturam, ou seja, somos capazes de explicar a regra "semelhante dissolve semelhante". Quando se misturam dois componentes, há quebra e formação de ligações/interações. Devemos lembrar que essas alterações de ligações envolvem trocas energéticas - variações de entalpia: quebra de ligações é endotérmica e a construção é exotérmica. Uma forma de favorecer termodinamicamente o processo é ele ser exotérmico. Um processo espontâneo de mistura, seria aquele que construiria mais interações e mais intensas do que as ligações rompidas. No caso da água e do óleo, a água teria suas interações de ligação de hidrogênio rompidas, para ter interações de dipolo-dipolo induzido com o óleo, o qual é apolar. E assim ocorre com outras misturas.