



Universidade Federal do ABC

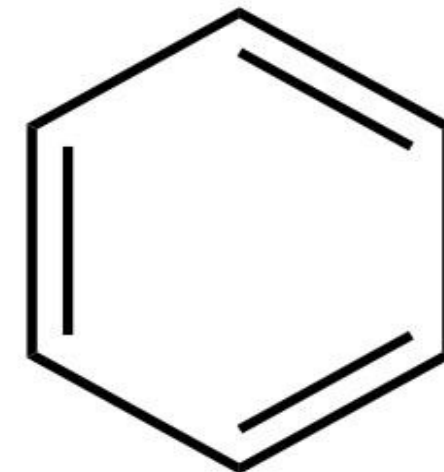
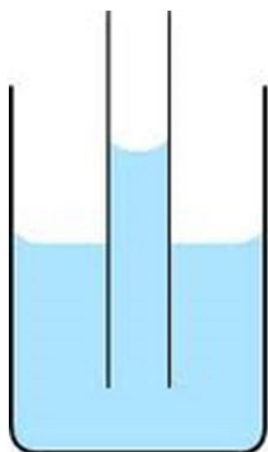
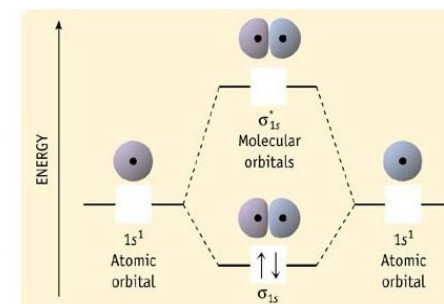
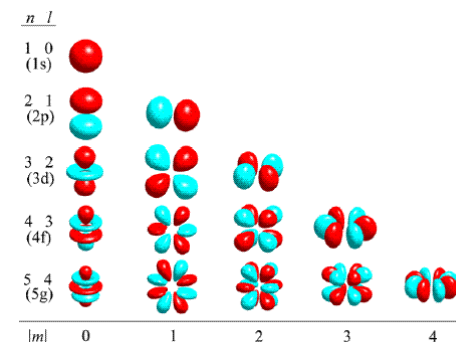
Interações Atômicas e Moleculares

7. Interações Intermoleculares

Prof. Pieter Westera

pieter.westera@ufabc.edu.br

<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/IAM.html>



Interações Intermoleculares

São de natureza **eletromagnética**.

=> Temos que saber mais sobre a distribuição de carga nas moléculas.

Ela pode ser vista como uma sobreposição de **multipolos** (n -polos).

=> Fazer uma **expansão** em **momentos multipolos**.

Interações Intermoleculares

O Momento Monopolo (1-polo, $n = 1$)

é a **carga total** q da molécula,

- 0 para moléculas neutras
- um múltiplo (positivo ou negativo) da carga elementar $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ C para moléculas iônicas.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo (2-polo, $n = 2$)

para moléculas neutras, o momento dipolo μ é o **vetor** apontando do **centro** da distribuição de **carga negativa** para o **centro** da distribuição de **carga positiva**, multiplicado pelo **módulo** da carga positiva, δ_+ , ou da carga negativa, $|\delta_-|$, que são iguais.

Unidade: $[\mu] = [l \cdot q] = \text{m} \cdot \text{C}$

Para moléculas é frequentemente usado o Debye:

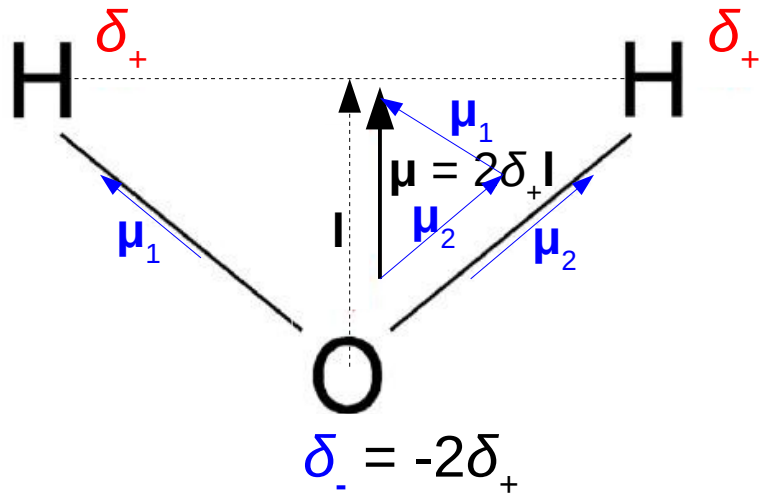
$$1 \text{ D} = 3.335 \cdot 10^{-30} \text{ m} \cdot \text{C}$$

Moléculas com **momento dipolo permanente** $\neq 0$ são chamadas moléculas **polares**.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Exemplo: Molécula de água (H_2O)



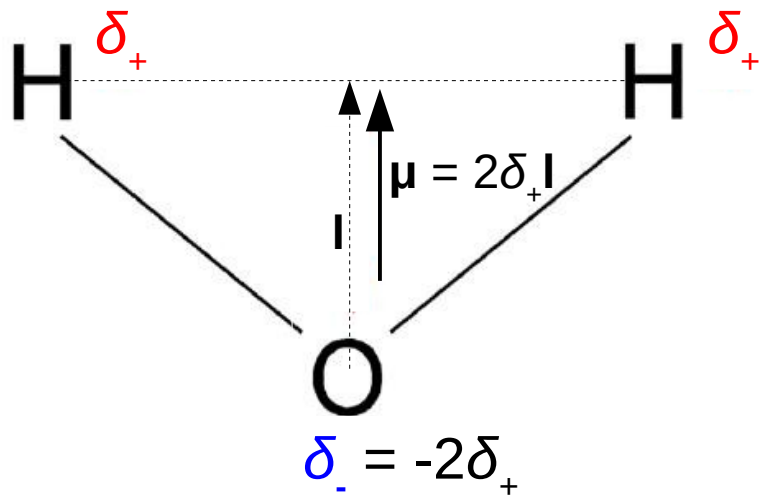
Oxigênio tem **eletronegatividade alta**, e hidrogênio, **baixa**.
=> Os **elétrons** das ligações O-H se **concentram** no átomo de O.
=> **carga parcial negativa δ_-** no O, **cargas parciais positivas δ_+** nos Hs.

Uma maneira de calcular o **momento dipolo** da **molécula** é como a **soma vetorial** dos **momentos** das **ligações interatômicas individuais**, aqui μ_1 e μ_2 .

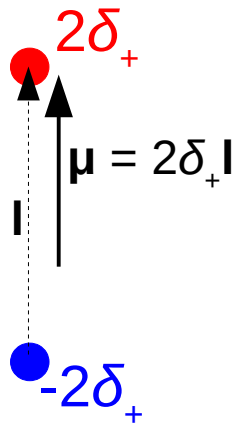
Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Exemplo: Molécula de água (H_2O)



Oxigênio tem **eletronegatividade alta**, e **hidrogênio, baixa**.
=> Os **elétrons** das ligações O-H se **concentram** no átomo de O.
=> **carga parcial negativa δ_-** no O, **cargas parciais positivas δ_+** nos Hs.

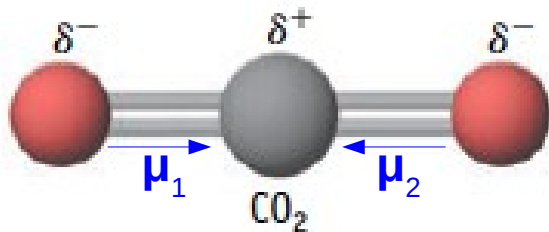


Para facilitar, podemos representar o dipolo como duas cargas encontrando-se nos centros das distribuições das cargas negativa e positiva.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Exemplo: **Dióxido de carbono** (CO_2 , anidrido carbônico, gás carbônico)



Pela **simetria** da molécula, dióxido de carbono **não** tem momento dipolo

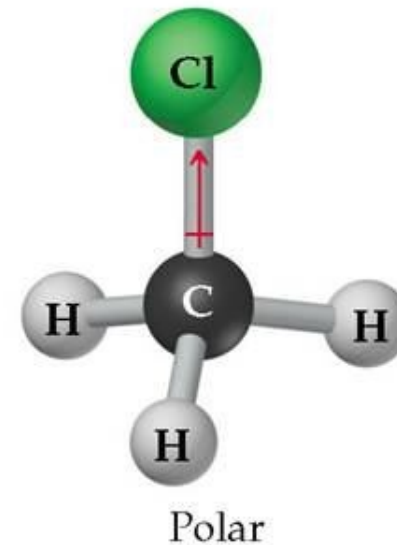
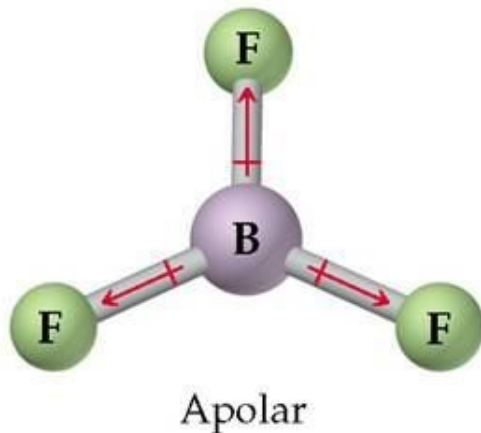
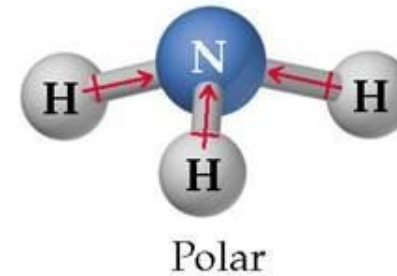
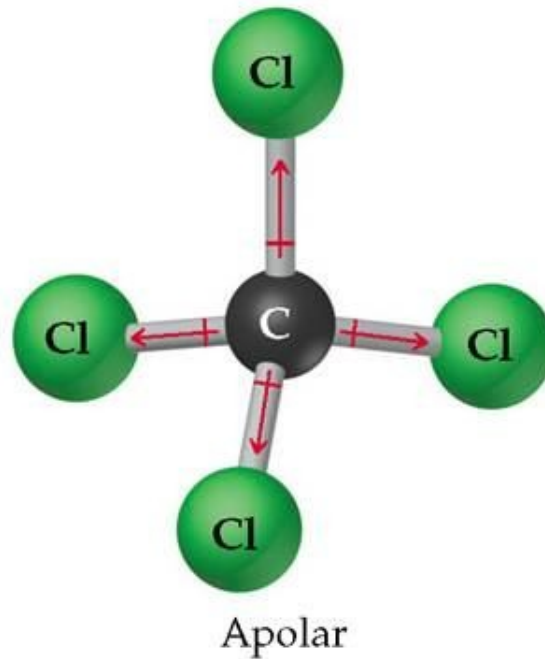
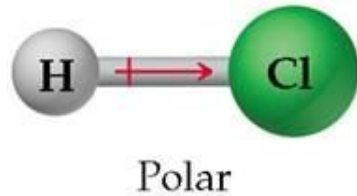
Isto pode ser entendido de duas maneiras:

- Os **centros** da **carga positiva** e da **carga negativa coincidem** (no meio da molécula / no átomo de C) $\Rightarrow I = 0$
- As duas **ligações interatômicas** têm **dipolos** do **mesmo módulo** mas **direções opostas**. \Rightarrow A **soma é nula**.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Alguns outros exemplos



! As flechas apontam para onde os elétrons estão, na direção oposta do momento dipolo

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

O momento dipolo de uma **ligação** entre **dois átomos** (por exemplo, de cada uma das ligações O-H na molécula de H₂O) em **Debye** equivale aproximadamente à **diferença** de **eletronegatividade** de Pauling dos dois átomos A e B:

$$\mu[\text{D}] = \chi_{\text{P,A}} - \chi_{\text{P,B}} = \Delta\chi_{\text{P}}$$

apontando do átomo com eletronegatividade maior para aquele com eletronegatividade menor.

Interações Intermoleculares

O Momento Dipolo

Os momentos dipolo de algumas moléculas

TABLE 8.7 Dipole Moments of Selected Molecules

Molecule (AX)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₂)	Moment (μ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H ₂ O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H ₂ S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO ₂	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO ₂	0	linear
H ₂	0	linear			
Molecule (AX ₃)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₄)	Moment (μ , D)	Geometry
NH ₃	1.47	trigonal pyramidal	CH ₄	0	tetrahedral
NF ₃	0.23	trigonal pyramidal	CH ₃ Cl	1.92	tetrahedral
BF ₃	0	trigonal planar	CH ₂ Cl ₂	1.60	tetrahedral
			CHCl ₃	1.04	tetrahedral
			CCl ₄	0	tetrahedral

Interações Intermoleculares

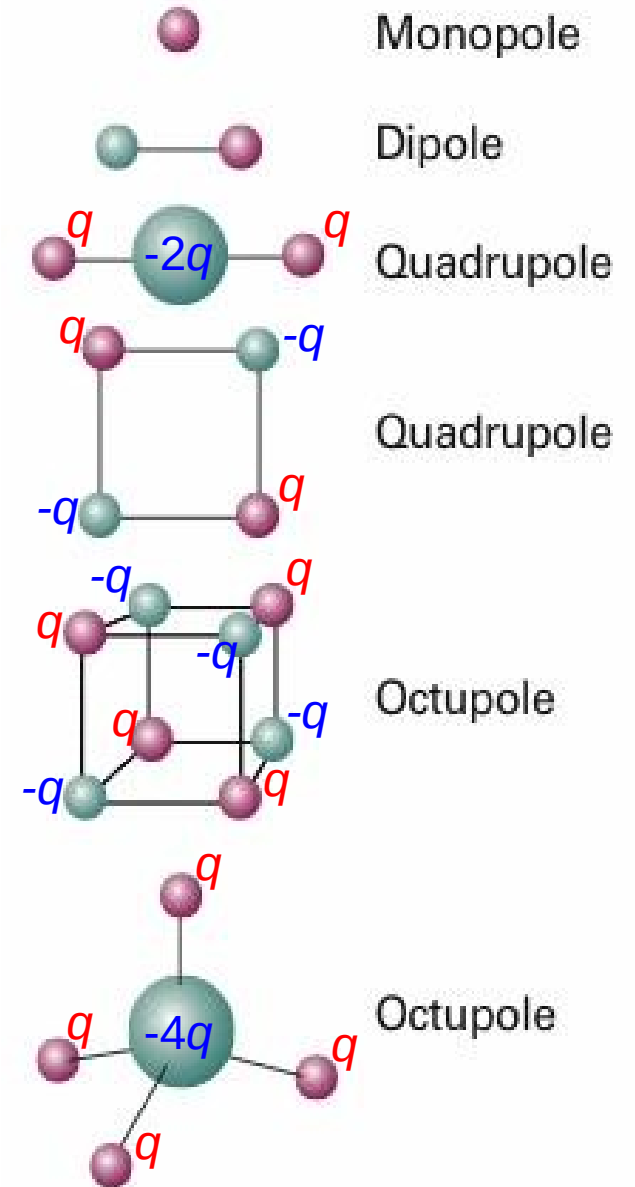
Moléculas mais complexas podem ter momentos de ordens maiores também:

Momentos **Quadrupolos** (3-polo, $n = 3$),

Octopolos ($n = 4$)

etc.

Veremos mais tarde que estes não importam tanto para as interações intermoleculares (a distância).



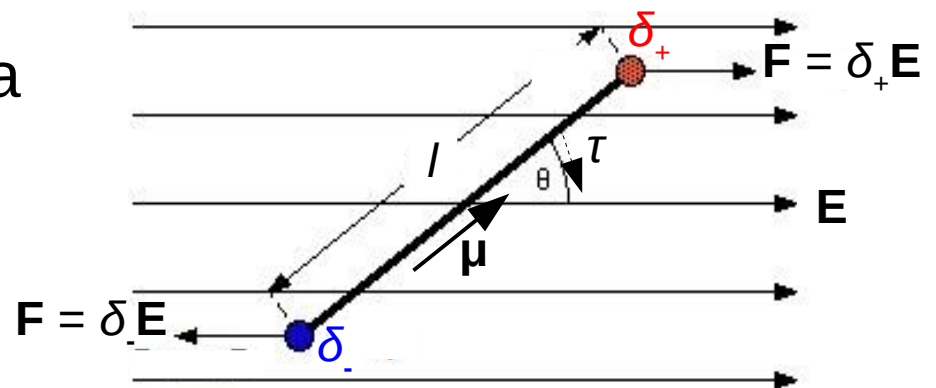
Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

Moléculas polares com rotação livre (como em gases e líquidos)

Na carga positiva age uma força na direção do campo e na carga negativa, na direção oposta.

=> A **força total** sobre a molécula é **nula**, mas há uma **torque** agindo.



Dipolos tendem a se **alinhar** com o campo.

Quanto **menor** é a **temperatura**, tanto **maior** é este **alinhamento**.
Média dos componentes dos momentos das moléculas paralelos ao campo:

$$\langle \mu_{\parallel} \rangle = \mu^2 E / 3k_B T$$

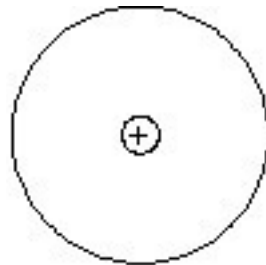
Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

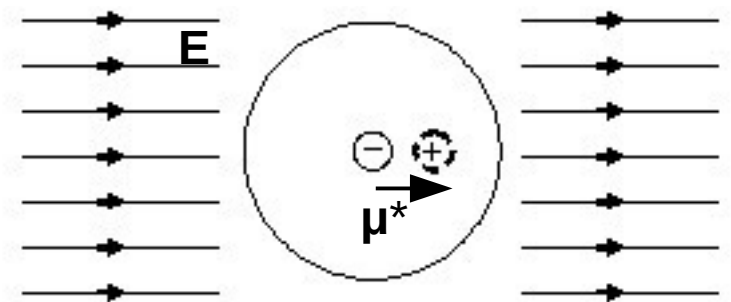
Moléculas não-polares: O momento dipolo induzido

Os (orbitais dos) **elétrons** são **deslocados** na **direção oposta** ao **campo** (e os núcleos dos átomos minimamente na direção do campo, tal que o centro de massa da molécula não se mexe; afinal a força total que o campo aplica é zero para moléculas neutras).

Sem campo



Com campo



=> Moléculas não-polares ganham um **momento dipolo induzido** μ^* na **direção** do **campo** **E**.

Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

O momento dipolo induzido

O mesmo acontece com moléculas polares estacionários (como em sólidos) num campo externo \mathbf{E} .

Neste caso, o **momento induzido** μ^* é **somado** ao **momento permanente** μ_0 :

$$\mu = \mu_0 + \mu^*,$$

causando um **aumento** ($\mu^* \parallel \mu_0$), uma **redução** ($\mu^* \text{ anti-} \parallel \mu_0$) e/ou uma **mudança de direção** ($\mu^* \nparallel \mu_0$) do **momento da molécula**.

Deve acontecer até em moléculas polares com rotação livre. Neste caso, o momento induzido é na mesma direção que o alinhamento do momento permanente, $\parallel \mathbf{E}$.

Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

O momento dipolo induzido: Polarizabilidade

O momento dipolo induzido é proporcional ao campo elétrico externo:

$$\mu^* = \alpha E,$$

onde α é chamado polarizabilidade da molécula,

unidade: $[\alpha] = \text{C}^2\text{m}^2/\text{J}$.

Às vezes se usa a grandeza volume de polarizabilidade

$$\alpha' = \alpha / 4\pi\epsilon_0,$$

que tem unidade m^3 , mas tem nada a ver com volumes geométricos, mas é da ordem de volumes de moléculas.

Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

O momento dipolo induzido: Polarizabilidade

$$\mu^* = \alpha E$$

Em geral, quanto **maior** é a **lacuna HOMO-LUMO** (a diferença em energia entre os orbitais moleculares desocupados e ocupados) da molécula, tanto **menor** é a sua **polarizabilidade**.

Normalmente, a polarizabilidade é **anisotrópica**, isto é, ela depende da orientação da molécula no campo (exemplo: benzeno), e α é um tensor, representado por uma matriz.

Interações Intermoleculares

Moléculas num Campo Elétrico (Externo)

O momento dipolo induzido: Polarizabilidade

Alguns valores de momento de dipolo e polarizabilidade volumar médias:

Table 15.2

Dipole moments and mean polarizability volumes

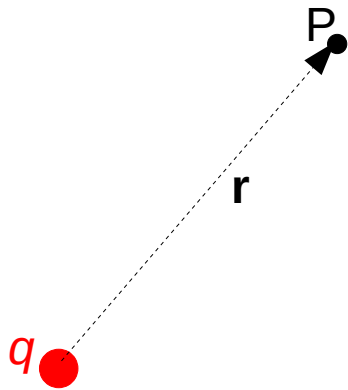
	μ/D	$\alpha'/(10^{-30} \text{ m}^3)$
Ar	0	1.85
CCl ₄	0	11.7
C ₆ H ₆	0	11.6
H ₂	0	0.911
H ₂ O	1.85	1.65
NH ₃	1.47	2.47
HCl	1.08	2.93
HBr	0.80	4.01
HI	0.42	6.06

Interações Intermoleculares

O potencial elétrico gerado por um n -polo

- por um **monopolo** ($n = 1$)

$V = q/4\pi\epsilon_0 r$ prop. r^{-1} (potencial de Coulomb, => Fen. EM)

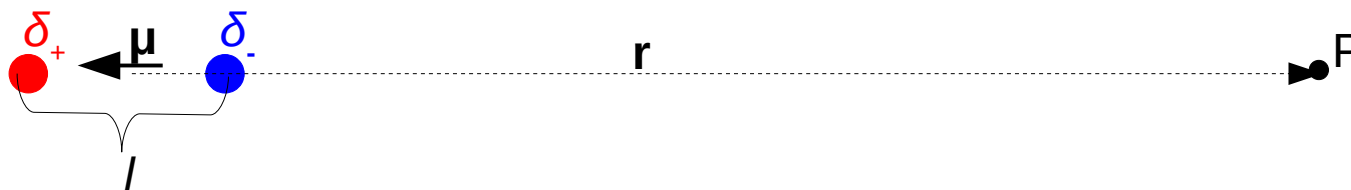


Interações Intermoleculares

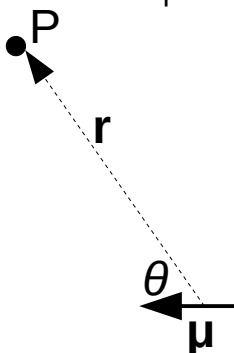
O potencial elétrico gerado por um n -polo

- por um **dipolo** ($n = 2$)

Calculando o potencial num ponto no eixo do momento dipolo:



$$\begin{aligned}
 V &= V_{\delta_+} + V_{\delta_-} = 1/4\pi\epsilon_0 \cdot [\delta_+/(r+1/2l) + \delta_-/(r-1/2l)] && \text{(usando } \delta_- = -\delta_+ \text{)} \\
 &= 1/4\pi\epsilon_0 \cdot [\delta_+ r^{-1}/(1+1/2l/r) - \delta_+ r^{-1}/(1-1/2l/r)] && \text{(usando } 1/(1+x)=1-x+x^2-\dots \text{)} \\
 &= \delta_+/4\pi\epsilon_0 r \cdot [1 - (1/2l/r) + (1/2l/r)^2 - \dots - 1 + (-1/2l/r) - (-1/2l/r)^2 - \dots] && \text{(para } r \gg l \text{)} \\
 &\approx \delta_+/4\pi\epsilon_0 r \cdot (-2) \cdot 1/2l/r = -\delta_+ l / 4\pi\epsilon_0 r^2 = -\mu / 4\pi\epsilon_0 r^2 \text{ prop. } r^{-2}
 \end{aligned}$$



Em outras direções que no eixo, V também cai com r^{-2} :

$$V = \mu \cos \theta / 4\pi\epsilon_0 r^2 \quad \text{(também, } \Rightarrow \text{ Fen. EM)}$$

Interações Intermoleculares

O potencial elétrico gerado por um n -polo

Em geral, o **potencial** devido a um **n -polo** cai com a **n -ésima potência** da **distância**:

$$V(\mathbf{r}) \text{ prop. } 1/r^n$$

=> Em **grandes distâncias**, só o momento com **menor n** importa:

- para íons, a carga total
- para moléculas neutras, o momento dipolo

Já que na interação intermolecular, as moléculas **sempre** têm um **momento dipolo** (nem que seja apenas um momento induzido), normalmente precisamos **levar** em **conta** apenas os **momentos monopolo e dipolo**.

Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos **estacionários** (como em sólidos)

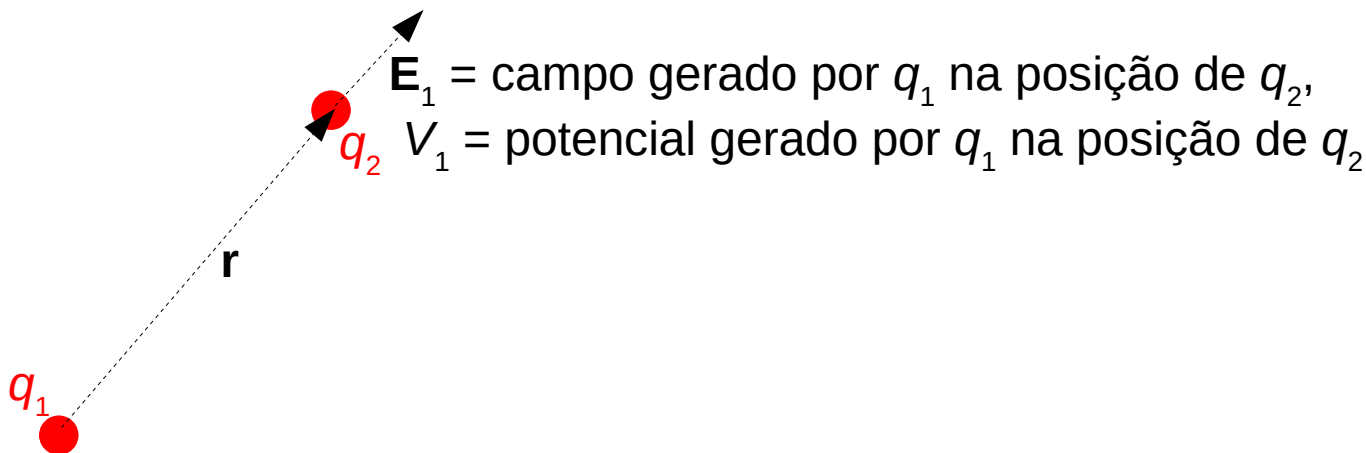
Exemplos:

monopolo-monopolo, $n_1 = n_2 = 1$, ou seja, **2 íons**

(momentos monopolos, isto é, cargas q_1 e q_2):

$U = V_1 q_2 = q_1 q_2 / 4\pi\epsilon_0 r$ prop. $1/r = 1/r^{(1+1-1)}$ (potencial de Coulomb), e

$F = q_1 q_2 / 4\pi\epsilon_0 r^2$ prop. $1/r^2 = 1/r^{(1+1)}$ (a força de Coulomb)



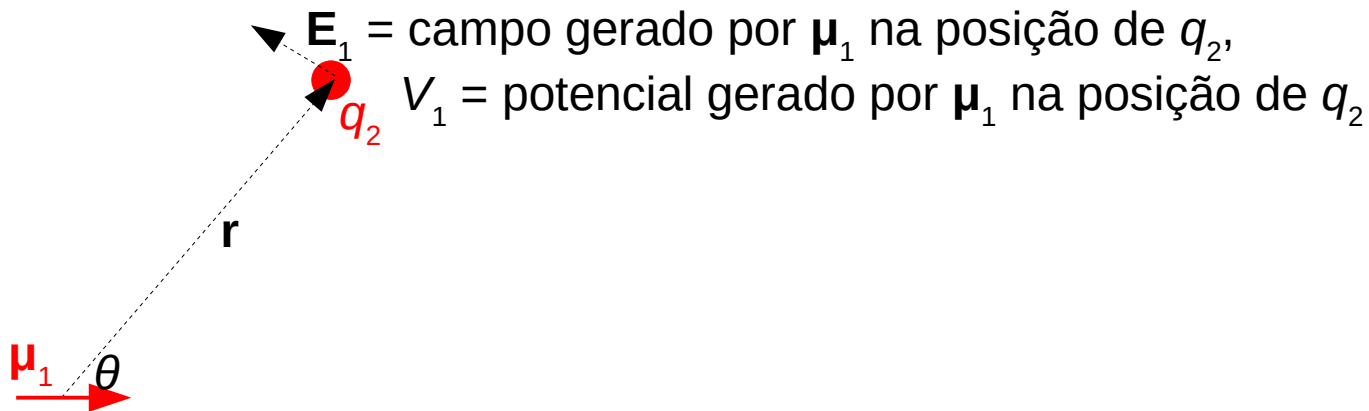
Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos **estacionários** (como em sólidos)

Exemplos:

dipolo-monopolo, $n_1 = 2$, $n_2 = 1$, ou seja, **dipolo-íon** (ou vice-versa) (momentos μ_1 e q_2):

$$U = V_1 q_2 = \mu_1 \cos \theta q_2 / 4\pi\epsilon_0 r^2 \quad \text{prop. } 1/r^2 = 1/r^{(2+1-1)},$$
$$F \quad \text{prop. } 1/r^3 = 1/r^{(2+1)}$$



Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos **estacionários** (como em sólidos)


Exemplos:

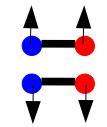
dipolo-dipolo (paralelos), $n_1 = n_2 = 2$

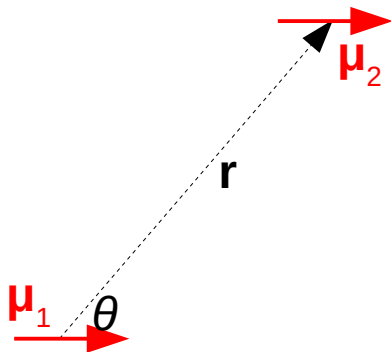
(momentos μ_1 e μ_2):

$$U = \mu_1 \mu_2 (1 - 3 \cdot \cos^2 \theta) / 4\pi\epsilon_0 r^3 \quad \text{prop. } 1/r^3 = 1/r^{(2+2-1)},$$

$$F \quad \text{prop. } 1/r^4 = 1/r^{(2+2)}$$

$\theta < 54.7^\circ$ ou $\theta > 125.3^\circ$: dipolos “um atrás do outro” \Rightarrow atração $\Rightarrow U$ negativa 

$54.7^\circ < \theta < 125.3^\circ$: dipolos “lado ao lado” \Rightarrow repulsão $\Rightarrow U$ positiva 



Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos **estacionários** (como em sólidos)

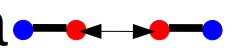
Exemplos:

dipolo-dipolo (**anti**paralelos), $n_1 = n_2 = 2$

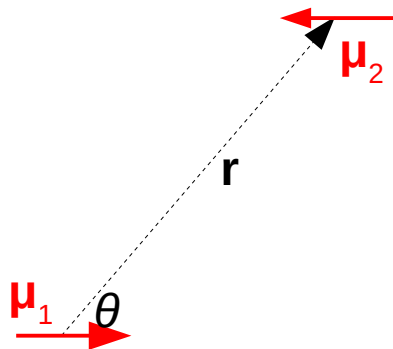
(momentos μ_1 e μ_2):

$U = \mu_1 \mu_2 (3 \cdot \cos^2 \theta - 1) / 4\pi \epsilon_0 r^3$ também prop. $1/r^3 = 1/r^{(2+2-1)}$,

F também prop. $1/r^4 = 1/r^{(2+2)}$

$\theta < 54.7^\circ$ ou $\theta > 125.3^\circ$: dipolos “batendo de frente” => repulsão => U positiva 

$54.7^\circ < \theta < 125.3^\circ$: dipolos “lado contra lado” => atração => U negativa 



Para outras orientações relativas entre μ_1 e μ_2 , U também cai com $1/r^3$ e F , com $1/r^4$.

Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos **estacionários** (como em sólidos)

Em geral temos para a **energia potencial** da interação entre dois n -polos **estacionários** com n_1 e n_2 :

U prop. $1/r^{(n_1+n_2-1)}$,

e para a **força**

F prop. $1/r^{(n_1+n_2)}$

Interações Intermoleculares

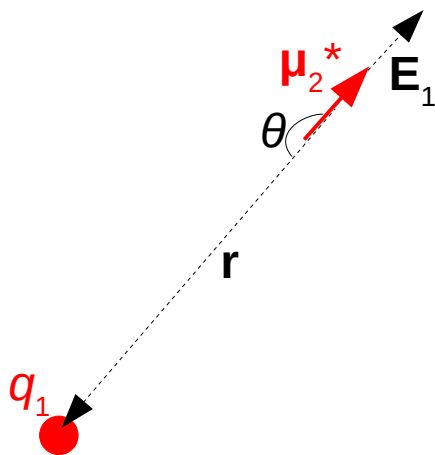
A energia potencial da interação entre dois n -polos **não-estacionários**

Porém, em **gases** e **líquidos** (e em sólidos feitos de moléculas neutras), os **momentos dipolo não** são estacionários.

Eles podem se **alinhar** com o **campo** gerado pela **outra molécula** por **rotação** e/ou **indução**.

Exemplo: **Interação íon-dipolo induzido**

- O íon com carga q_1 induz um momento μ_2^* na molécula 2, que tem polarizabilidade α :



Energia potencial da interação $q_1 - \mu_2^*$:

$$\begin{aligned}U &= \mu_2^* \cos \theta q_1 / 4\pi\epsilon_0 r^2 = -\mu_2^* q_1 / 4\pi\epsilon_0 r^2 \\ &= -\alpha E_1 q_1 / 4\pi\epsilon_0 r^2 = -\alpha (q_1 / 4\pi\epsilon_0 r^2) q_1 / 4\pi\epsilon_0 r^2 \\ &= -\alpha q_1^2 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 r^4 \\ &\text{prop. } 1/r^4\end{aligned}$$

Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos não-estacionários

Exemplo: Interação íon-dipolo induzido

$$U = -\alpha q_1^2 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 r^4 \text{ prop. } -1/r^4$$

$$\Rightarrow F \text{ prop. } 1/r^5$$

A força é **atractiva** (sinal negativo) e a energia correspondente cai com r^{-4} (e não r^{-2}).

Isto é **geral** para **interações** envolvendo **momentos induzidos** ou **alinhados por rotação**:

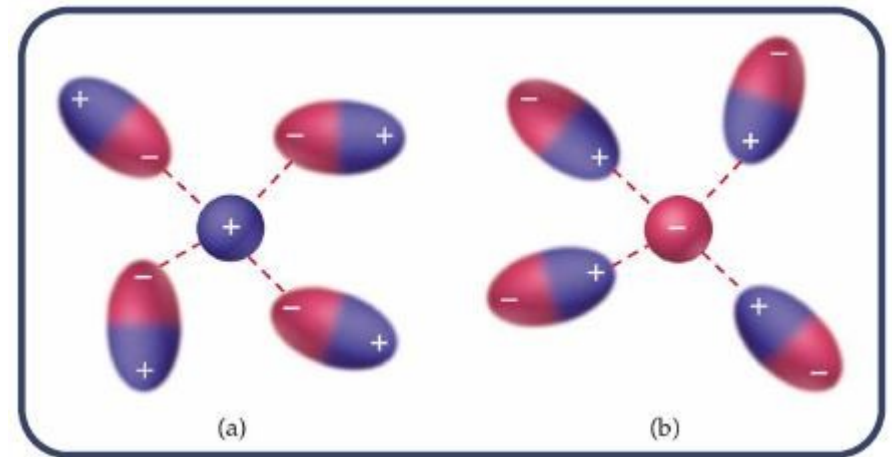
- **Atrativas**, por que o **momento** se **alinha** desta maneira (simbolizo isto com o sinal negativo na energia).
- Caem mais rapidamente com a distância, que as forças entre n -polos estacionários.
- **Diminuem** com a **temperatura**, são proporcionais a $1/k_B T$.

Interações Intermoleculares

Exemplos: Força Íon-Dipolo

Em **gases** ou **líquidos**, naqueles há **íons** e dipolos (permanentes), isto é, **dipolos** com **rotação livre**, os dipolos se **alinham** tal, que eles acabam sendo **atraídos** pelos **íons**.

Ou: Em **substâncias**, naqueles há **íons** e **moléculas apolares**, os íons **induzem** um **momento dipolo** nas moléculas apolares, também tal, que estas são **atraídos** pelos **íons**.



Estas forças são, então, sempre **atrativas**, **mais fracas** que as forças **íon-íon**, e caem com a 5ª potência das distâncias intermoleculares (a energia potencial correspondente cai com a 4ª potência das distâncias intermoleculares).

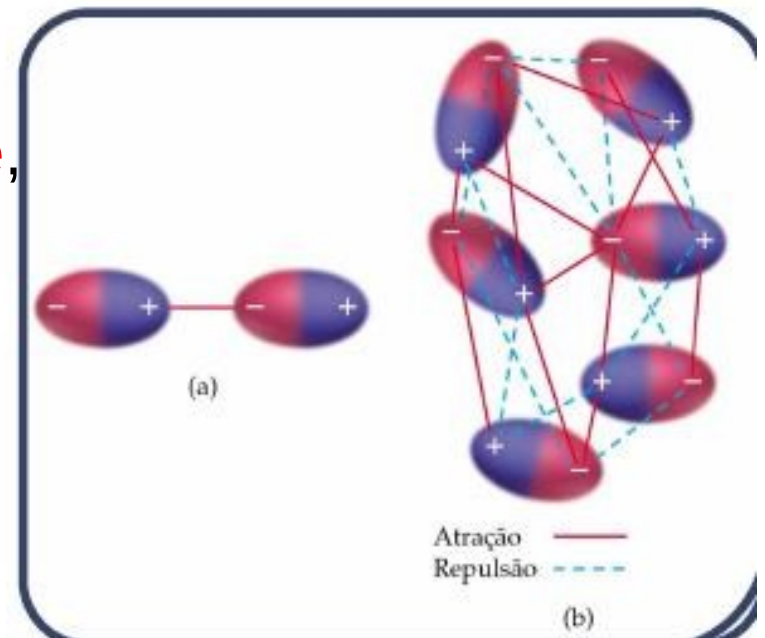
Interações Intermoleculares

Exemplos: Forças entre Dipolos com Rotação Livre, de Keesom

De maneira análoga, em **gases** ou **líquidos**, naqueles há dipolos (permanentes), isto é, com **rotação livre**, os dipolos se **alinham** tal, que eles acabam, em média, se **atraindo**.

Estas forças são, então, também **atrativas**, ainda **mais fracas**, e caem com a 7ª potência das distâncias intermoleculares

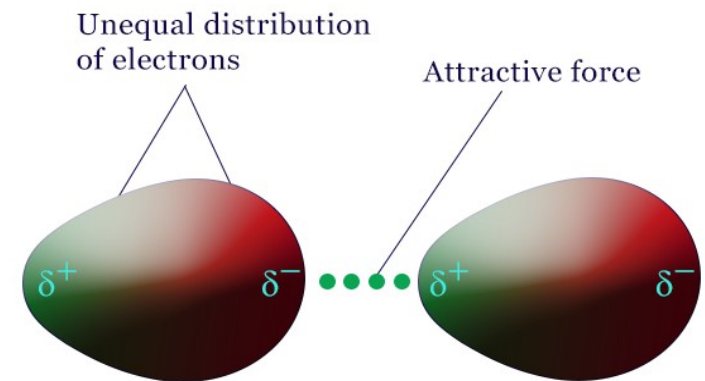
(a energia potencial correspondente cai com a 6ª potência das distâncias intermoleculares).



Interações Intermoleculares

Exemplos: Forças de Dispersão de London

Acontecem em **todas** as **substâncias**:
Flutuações na **distribuição** dos e^- na molécula 1 causam um **momento dipolo aleatório** nesta, que **induz** um **momento** na molécula 2, os dois sendo **alinhados** tal que eles se mantêm um o outro e, em média, as moléculas se **atraem**.



Temporary dipoles

Estas forças são, então, também **atrativas**, **fracas**, e também caem com a 7^a potência das distâncias intermoleculares (a energia potencial caindo com a 6^a potência das distâncias).

Interações Intermoleculares

A energia potencial da interação entre dois n -polos não-estacionários

Estas últimas duas, Keesom e London, que caem com $-1/r^6$, resp. $1/r^7$, são chamadas **Forças Van der Waals**.

Em **gases** e **líquidos** feitos de moléculas (ou átomos) **neutras**, **todas** as **forças** são do tipo **Keesom** e **London**, e são responsáveis para o termo proporcional ao inverso do quadrado do volume na equação para gases reais, a equação de Van der Waals (\Rightarrow FeTerm).

Interações Intermoleculares

Todas as forças mencionadas até agora são de natureza **eletrostática**.

=> Elas contêm o termo $1/4\pi\epsilon_0$, às vezes em quadrado, onde ϵ_0 = permissividade do vácuo.

Em **dielétricos**, ϵ_0 tem que ser substituído por $\epsilon = \kappa_e\epsilon_0$,
 ϵ = **permissividade** do **material**, κ_e = **constante dielétrica** do **material**.

Exemplo: água: $\kappa_e = 78$

=> A **energia atrativa** entre **2 íons** (p. e. Na^+ e Cl^-) é 78 vezes **mais fraca** na água, do que no vácuo (ou ar).

=> **solubilidade** de **sais** (i. e. NaCl , sal de cozinha) na **água**.

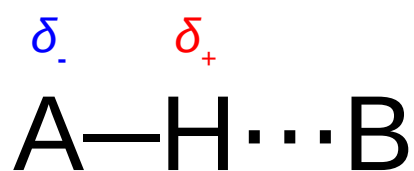
Interações Intermoleculares

Ligações de Hidrogênio (Pontes de Hidrogênio)

Moléculas que contêm átomos de **hidrogênio** (p. e. H_2O) podem interagir de uma maneira adicional, a **ligação de hidrogênio**, também chamada de ponte de hidrogênio.

São ligações do tipo $\text{A}-\text{H}\cdots\text{B}$, onde A e B são **altamente eletronegativas**, principalmente N, O, F e espécies aniônicas (Cl^- , ...).

Vista “clássica”



- os e^- do $\text{A}-\text{H}$ ficam **mais pertos** do **A**

=> **carga parcial positiva** no **H**

=> **atração eletrostática** entre **H** e **B** (que tem uma carga parcial positiva devida à molécula, daquela B participa).

Interações Intermoleculares

Ligações de Hidrogênio

Vista quântica



- 3 orbitais de base (o do H é o orbital 1s) com 4 e⁻ (2 do A—H, 2 do B):

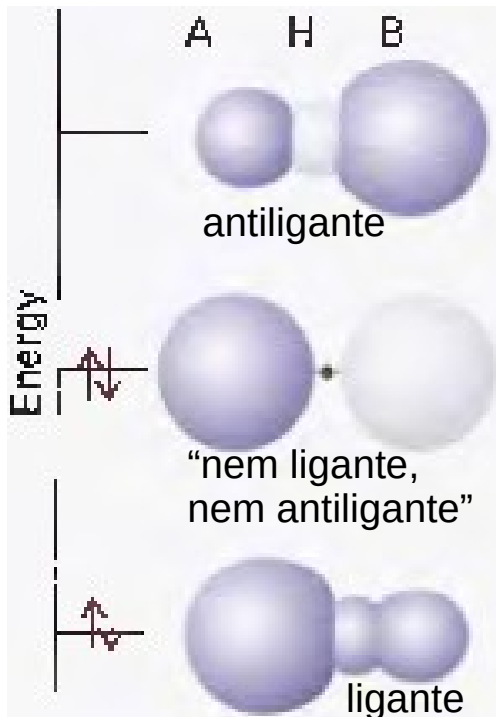
$$\psi = c_1 \psi_A + c_2 \psi_{H1s} + c_3 \psi_B$$

=> 3 orbitais “inter-moleculares”

- 2 e⁻ ficam no orbital ligante, e 2 e⁻, no “nem ligante, nem antiligante”

- Dependendo da energia do orbital “nem ligante, nem antiligante”, a energia total pode ser menor, do que para A—H e B separados (se A e B são suficientemente eletronegativos)

=> A “ponte” se forma.



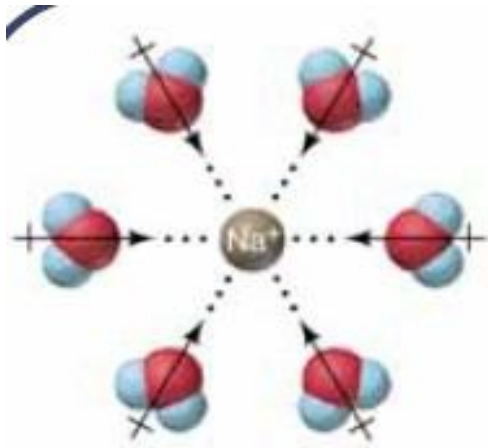
Interações Intermoleculares

Ligações de Hidrogênio

- A **força** da ligação é da ordem de 20 kJ/mol, **mais forte** que as **outras interações** (tirando íon-íon).
=> quando ela acontece, ela **domina** a interação entre as moléculas
- A ligação $H \cdots B$ é da ordem da **distância** de **ligações interatômicas** em **moléculas**.
=> interação “de **contato**”, a **curta distância**.
- As pontes de hidrogênio são responsáveis, e. o., pelas **ligações intermoleculares** na **água** e no **gelo**, e pela **estrutura cristalina hexagonal** do **gelo** (=> flocos de neve), e
- pelas **ligações** entre **pares** de **genes** no **DNA**, ...

Interações Intermoleculares

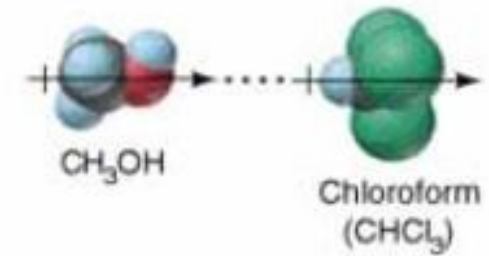
Resumo



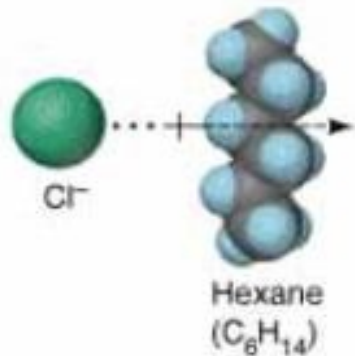
Íon-Dipolo



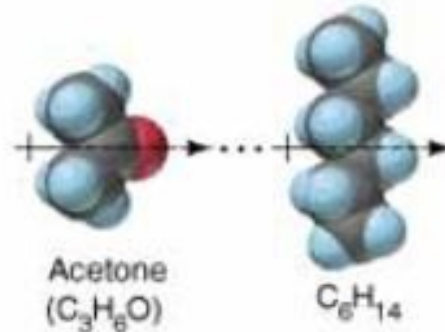
Ligação de Hidrogênio



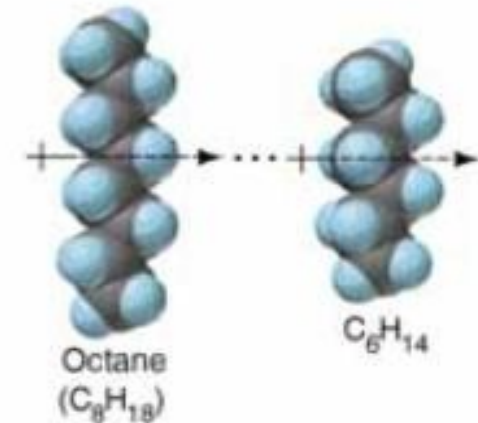
Dipolo-dipolo



Íon - dipolo induzido



dipolo - dipolo induzido



Dispersão

Interações Intermoleculares

Intensidades e Dependência da Distância das Interações Intermoleculares

Interação	Intensidade	$U(r)$
Íon-íon	250 kJ/mol	$1/r$
Ponte de H	20 kJ/mol	“de contato”
Íon-dipolo	15 kJ/mol	$1/r^2$
dipolo-dipolo (estacionários)	2 kJ/mol	$1/r^3$
dip.ind.-dip.ind. (London)	2 kJ/mol	$1/r^6$
dip.-dip. com rotação livre (Keesom)	0.6 kJ/mol	$1/r^6$

} Forças Van der Waals

Em comparação, as **ligações iônicas**, **covalentes** e **metálicas** são de 625-1550 kJ/mol, 520-1250 kJ/mol e 100-800 kJ/mol, respectivamente.

Interações Intermoleculares

O potencial de Lennard-Jones

Voltando para o **potencial** das **forças Van der Waals**:

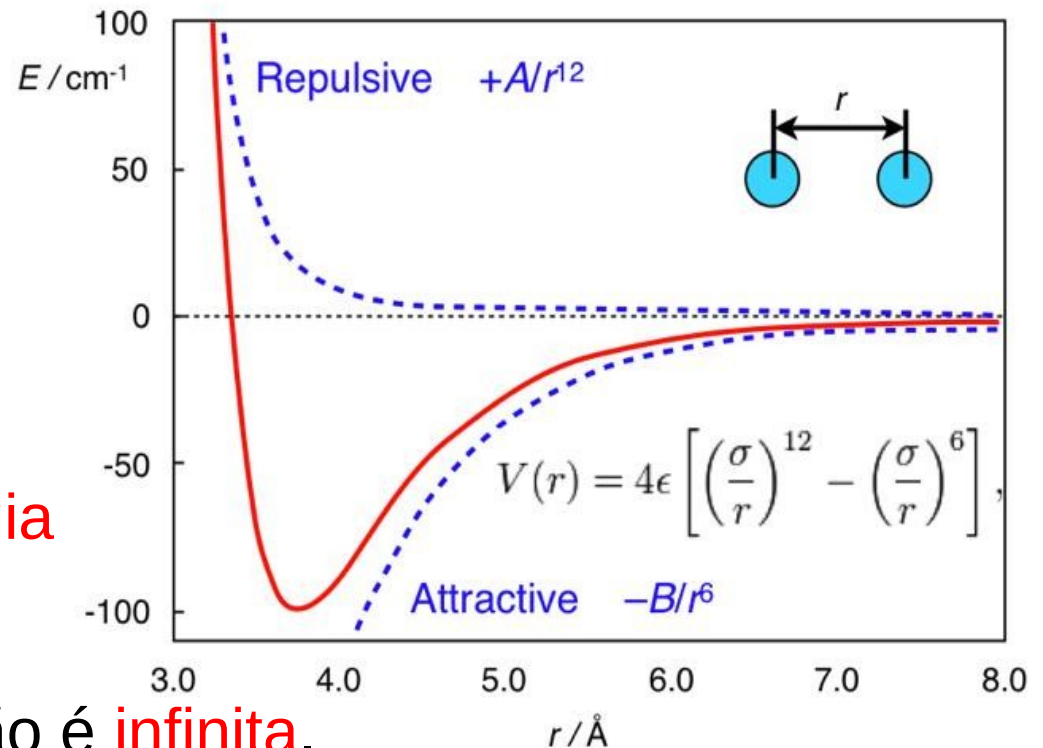
$$V(r) = -B/r^6$$

para $r \rightarrow 0$, $V \rightarrow -\infty$.

=> Para este potencial, a **energia mínima** ocorre para **distâncias intermoleculares de zero**, e a **energia liberada** na aproximação é **infinita**.

Isto, por que o potencial de Van der Waals **não** leva em conta a **repulsão a curta distância**, quando as moléculas começam a se tocar ou até sobrepor, devida ao **princípio de exclusão** de Pauli.

Ela pode ser tratada introduzindo um termo que tende a $+\infty$ para $r \rightarrow 0$ e a 0 para $r \rightarrow \infty$, e que domina para $r \rightarrow 0$ e é desprezível para $r \rightarrow \infty$, por exemplo $+A/r^{12}$.



Interações Intermoleculares

O potencial de Lennard-Jones

Este **potencial**, proposto em 1924 por John **Lennard-Jones**:

$$V_{LJ}(r) = A/r^{12} - B/r^6$$

pode ser escrito como

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \cdot \left\{ (r_0/r)^{12} - (r_0/r)^6 \right\},$$

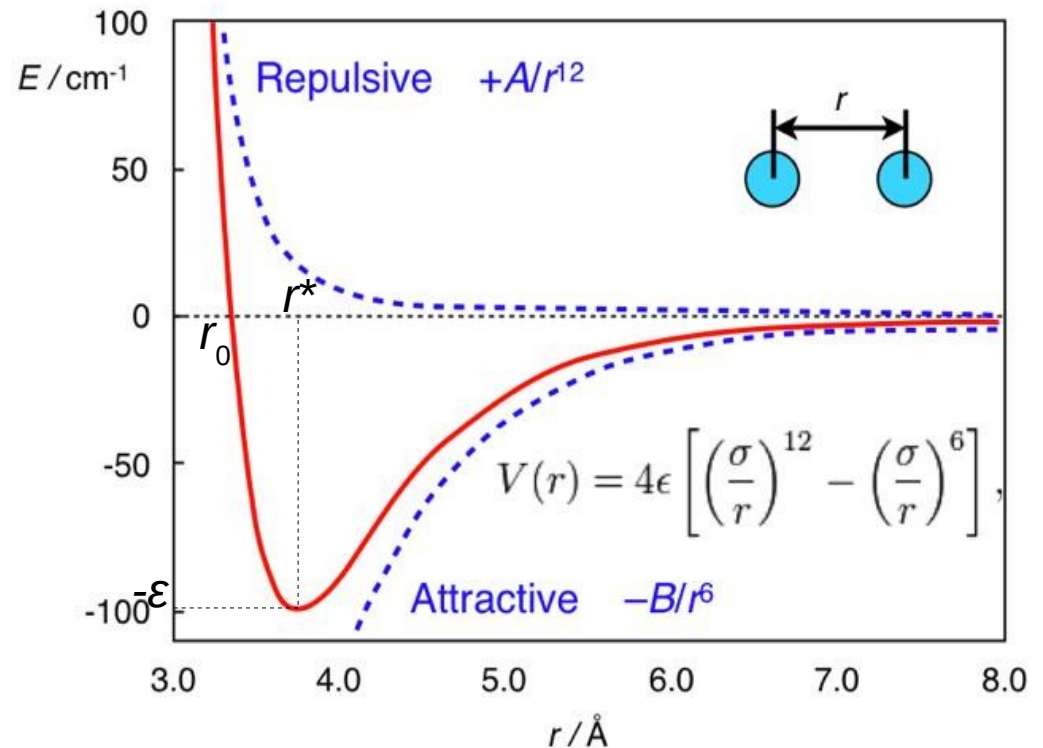
onde r_0 (ou, às vezes, σ) é a

separação intermolecular,

para aquela $V_{LJ} = 0$, e ϵ é a **profundidade do poço de potencial**, ou

$$V_{LJ}(r) = \epsilon \cdot \left\{ (r^*/r)^{12} - 2(r^*/r)^6 \right\},$$

onde r^* é a **separação**, para aquela V_{LJ} é **mínimo** (vide a lista).



Interações Intermoleculares

O potencial de Lennard-Jones

Na verdade, a repulsão “de contato” não é da forma

$$+A/r^{12},$$

(uma função exponencial seria melhor) mas este potencial se

aproxima bem ao potencial medido

empiricamente, e é **fácil** de **tratar** ma-

tematicamente, i. e., de derivar e integrar e assim

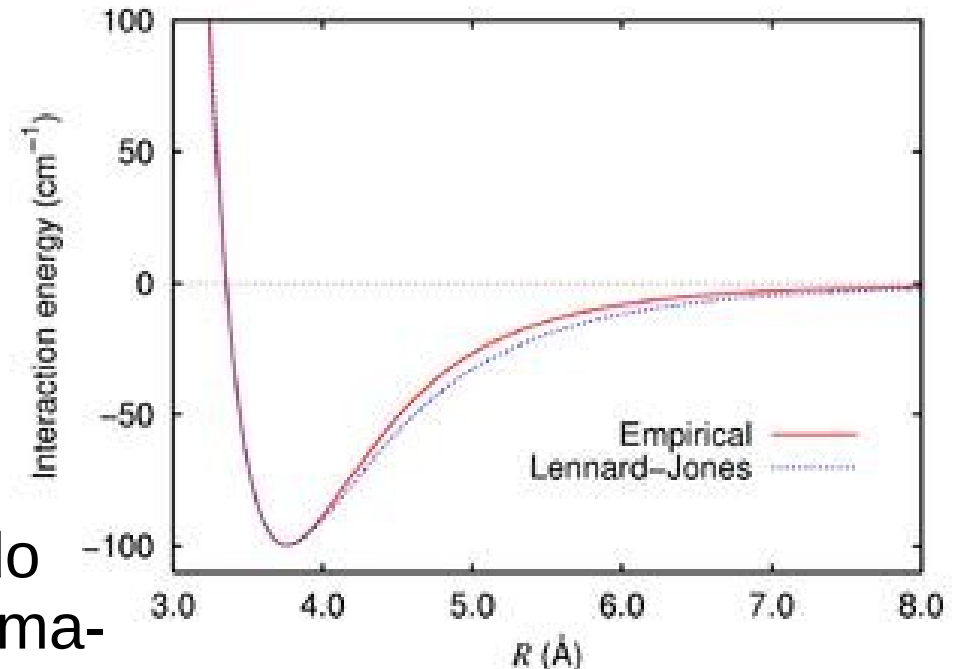
achar a **força** correspondente (\Rightarrow lista)

e a **distância** de **equilíbrio** (onde V_{LJ} é mínimo, também \Rightarrow lista).

Termos similares podem ser introduzidas para evitar a divergência para as outras forças para aquelas $V \rightarrow -\infty$ quando $r \rightarrow 0$.

Potenciais da forma $V(r) = C_n/r^n - C_m/r^m$ são chamados

potenciais de Mie.





Universidade Federal do ABC

Interações Atômicas e Moleculares

FIM PRA HOJE

