

## Texto de Apoio

### Ligação covalente – Curva de energia da molécula de H<sub>2</sub>

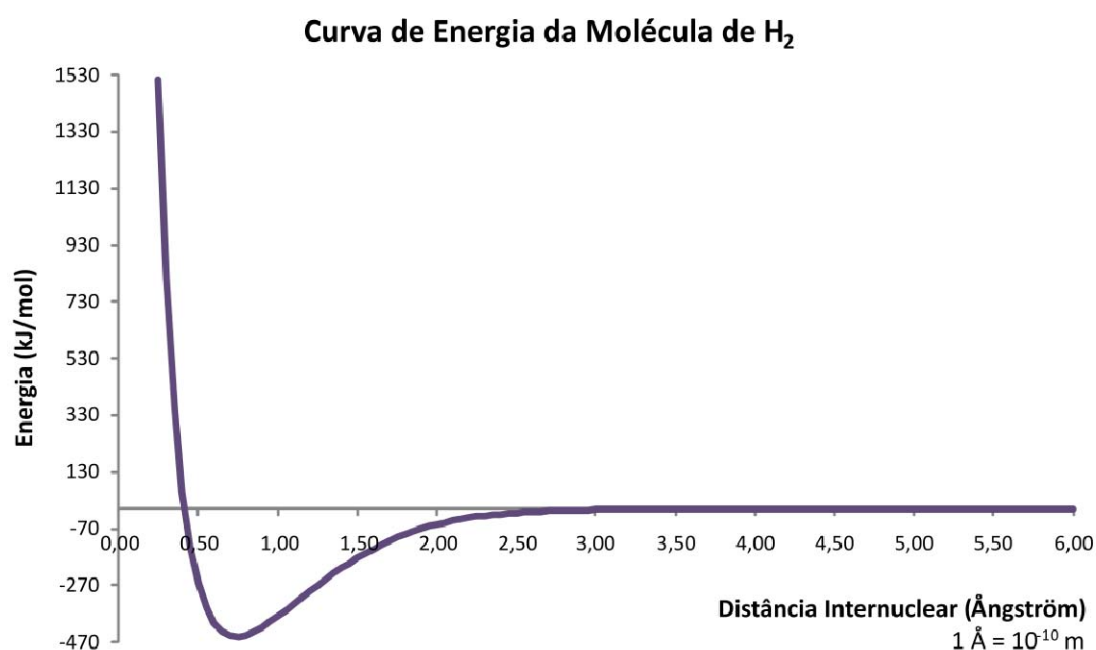
No âmbito do tema “Ligação Química”, foi elaborada uma apresentação multimédia sobre o modelo de ligação covalente para a molécula de hidrogénio (H<sub>2</sub>). Esta apresentação constitui um material de apoio a professores que leccionem o tema da ligação química no Ensino Secundário, possível de ser aplicada e discutida na sala de aula.

#### 1.1. Descrição da apresentação

A apresentação multimédia começa por uma breve descrição dos conceitos de ligação química e ligação covalente e da constituição do hidrogénio no seu estado livre (molécula constituída por dois átomos do isótopo prótio), numa linguagem científica compreensível por parte dos alunos do Ensino Secundário.

O aspecto principal deste material de apoio é o facto de apresentar um gráfico onde é apresentada a energia do hidrogénio no seu estado livre para várias distâncias entre os núcleos dos átomos de hidrogénio (**Figura 1**). Em simultâneo, são apresentadas imagens representativas de conformações da molécula, para várias distâncias internucleares definidas, onde é possível observar os núcleos de hidrogénio e superfícies de isodensidade electrónica para a molécula (zonas a vermelho e a azul). Verifica-se que, para grandes distâncias internucleares, existem dois átomos de hidrogénio separados e não a molécula (**Figura 2**). Os valores utilizados na representação em causa foram calculados

propositadamente para este trabalho utilizando o software Gaussian03 e o nível teórico CCSD/6-311++G(3df,3pd) por recurso ao supercomputador QTrex, o cluster de computação de alta performance utilizado para cálculo científico, do Grupo de Química Teórica e Computacional, do Laboratório Associado REQUIMTE, Departamento de Química, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto.



**Figura 1 – Gráfico da energia do hidrogênio no seu estado livre.**

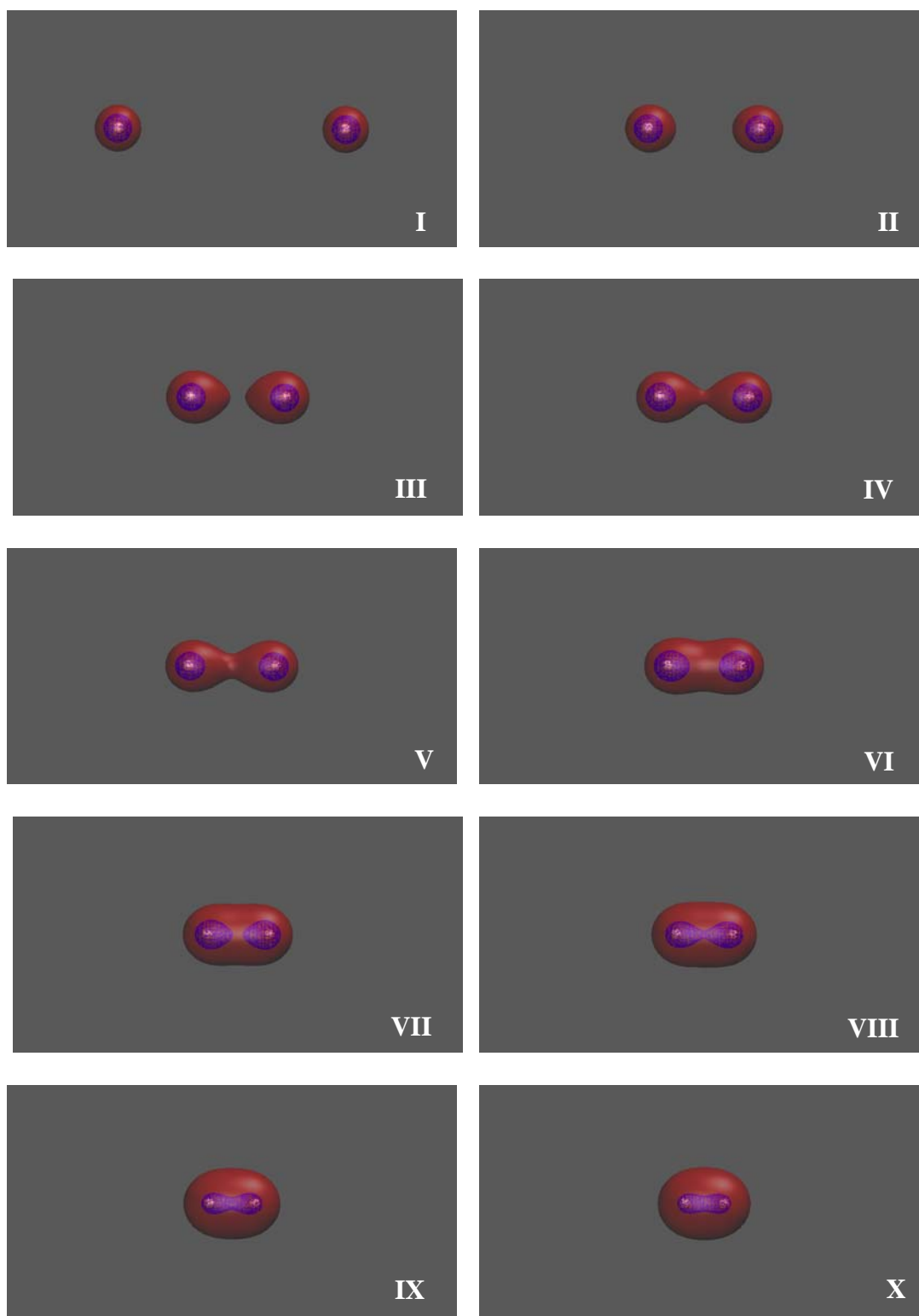


Figura 2 – Representação do hidrogénio no seu estado livre para algumas distâncias: 4,00Å (I); 2,00Å (II); 1,70Å (III); 1,60Å (IV); 1,55Å (V); 1,30Å (VI); 1,10Å (VII); 1,00 Å (VIII); 0,80Å (IX); 0,75Å (X)

Na **Figura 2** é apresentada uma sequência de imagens onde é possível observar a deformação da zona internuclear, à medida que os átomos se

aproximam. Verifica-se que a zona a azul (que representa um valor de densidade de probabilidade menor) apenas sofre deformação para distâncias internucleares pequenas, o que é lógico visto que os electrões mais internos encontram-se mais fortemente atraídos pelo núcleo do que os de valência.

É importante salientar que nas representações apresentadas o diâmetro dos núcleos é exagerado, quando comparado com o da possível nuvem electrónica. Isto acontece porque, se os esquemas fossem representados com a escala correcta, não seria possível visualizar os núcleos, tornando a apresentação mais pobre. Este tipo de representação “incorrecta” apenas se torna inconveniente para distâncias internucleares bastante pequenas, em que poderá parecer que ocorre o fenómeno de fusão nuclear, o que não acontece na realidade.

## **1.2. Exploração da apresentação na sala de aula**

A apresentação multimédia elaborada pode ser projectada na aula, como ponto de partida para o estudo da ligação química, mais concretamente da ligação covalente.

O resumo inicial sobre ligação química e ligação covalente apresenta-se como uma maneira de situar os alunos no tema a estudar e permitir que estes consigam perceber melhor o gráfico presente, não descurando a explicação do professor durante a visualização da apresentação.

Muito genericamente, a ligação covalente consiste num par de electrões compartilhado por um par de núcleos. O gráfico da energia total da molécula (energia total electrónica – cinética e potencial – e energia potencial dos núcleos) *versus* a distância entre os núcleos (de hidrogénio, neste caso) permite observar a mudança na energia, à medida que essa distância diminui.

Quando os átomos de hidrogénio se encontram longe um do outro, convencionam-se o valor da energia como zero. Isto torna-se fácil de aceitar, quando se considera as equações [1] e [2], relativas à força eléctrica  $F_{el}$  e à energia potencial eléctrica  $E_{pel}$ :

$$F_{el} = k \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \quad [1]$$

e

$$E_{pel} = k \frac{Q_1 Q_2}{r} \quad [2]$$

sendo  $Q_1$  e  $Q_2$  as cargas dos electrões e  $r$  a distância entre essas cargas.

À medida que se aproximam, os átomos atraem-se mutuamente e cada vez mais, diminuindo a energia até atingir um valor mínimo, correspondendo à formação de uma molécula estável de hidrogénio. Caso os núcleos se aproximem mais, a energia aumenta rapidamente devido a repulsões nucleares e electrónicas.

Estudando a densidade de probabilidade electrónica para os átomos, verifica-se que, quando os átomos estão muito distantes não se sentem. Porém, à medida que eles se aproximam, o núcleo de um átomo atrai a nuvem electrónica do outro e a atracção faz com que os átomos fiquem ainda mais perto. É possível notar a deformação da nuvem electrónica dos átomos e a crescente densidade electrónica entre os núcleos, ocorrendo penetração de ambas as nuvens. As atracções dominam mas as repulsões entre os núcleos e entre os electrões tornam-se também mais fortes.

No ponto de mais baixa energia, as atracções equilibram as repulsões e os dois átomos de hidrogénio existem como uma molécula  $H_2$ . A ligação covalente é, assim, a atracção mútua entre os núcleos e os electrões.

Se os núcleos se aproximassem mais, as repulsões seriam superiores às atracções. O aumento do potencial energético poderia desestabilizar o sistema e

os átomos distanciar-se-iam novamente. Isto pode ser concluído quando se analisa o gráfico, verificando que o valor da energia aumenta abruptamente.

Na realidade, a molécula vibra e os átomos deslocam-se ligeiramente em torno do ponto de mínimo de energia, embora não seja possível visualizar na apresentação. A distância média correspondente ao mínimo de energia é a **distância internuclear de equilíbrio**, vulgarmente designada **comprimento de ligação**. O comprimento de ligação para o caso da molécula  $H_2$  é de cerca de  $0,75\text{\AA}$ , isto é, cerca de 75 pm.

A **energia da ligação**, por sua vez, é a energia necessária para quebrar uma mole de moléculas de  $H_2$  em átomos de H separados, ou seja, é a diferença entre o mínimo de energia e o ponto de partida (0 kJ/mol, neste caso). Para a molécula de  $H_2$ , a energia de ligação apresenta o valor de cerca de 450 kJ.

A exploração desta apresentação multimédia permite introduzir, numa fase posterior, assuntos como a Teoria de Lewis e a Teoria das Repulsões dos Pares Electrónicos de Valência, que constam do programa do Ensino Secundário.