

Ligação Covalente

Curva de energia do H₂

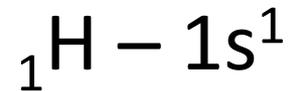
Trabalho de: Rita Duarte

O que é a ligação química?

- **Ligação química:** conjunto de interacções que mantêm os átomos unidos numa molécula.
- **Ligação covalente:** modelo de ligação química que ocorre por partilha de electrões de valência entre os átomos envolvidos na ligação.

Como é caracterizado o hidrogénio no seu estado livre?

- Distribuição electrónica do átomo de H:

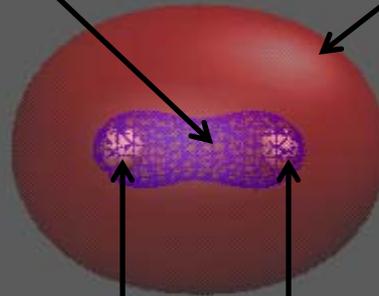


- Nº de electrões de valência do hidrogénio: 1
- O hidrogénio no seu estado livre é formado por dois átomos do elemento hidrogénio, ligados por uma ligação covalente. Esta molécula é constituída por dois electrões e dois protões.

Legenda da molécula

Superfície de
isodensidade
electrónica (75 %)

Superfície de
isodensidade
electrónica (95 %)



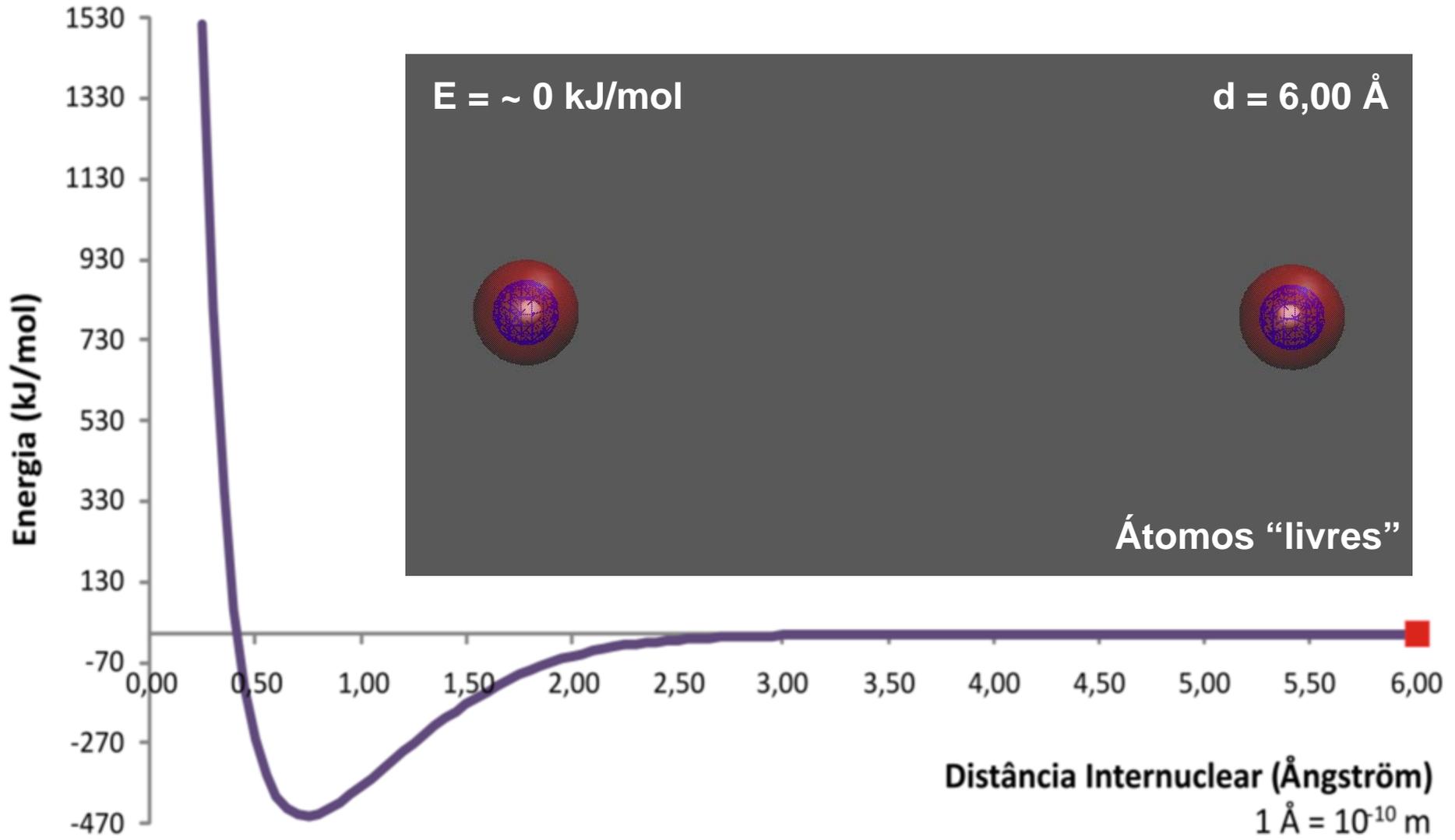
Núcleos de hidrogénio
(*não se encontram à escala*)

Curva de Energia da Molécula de H₂

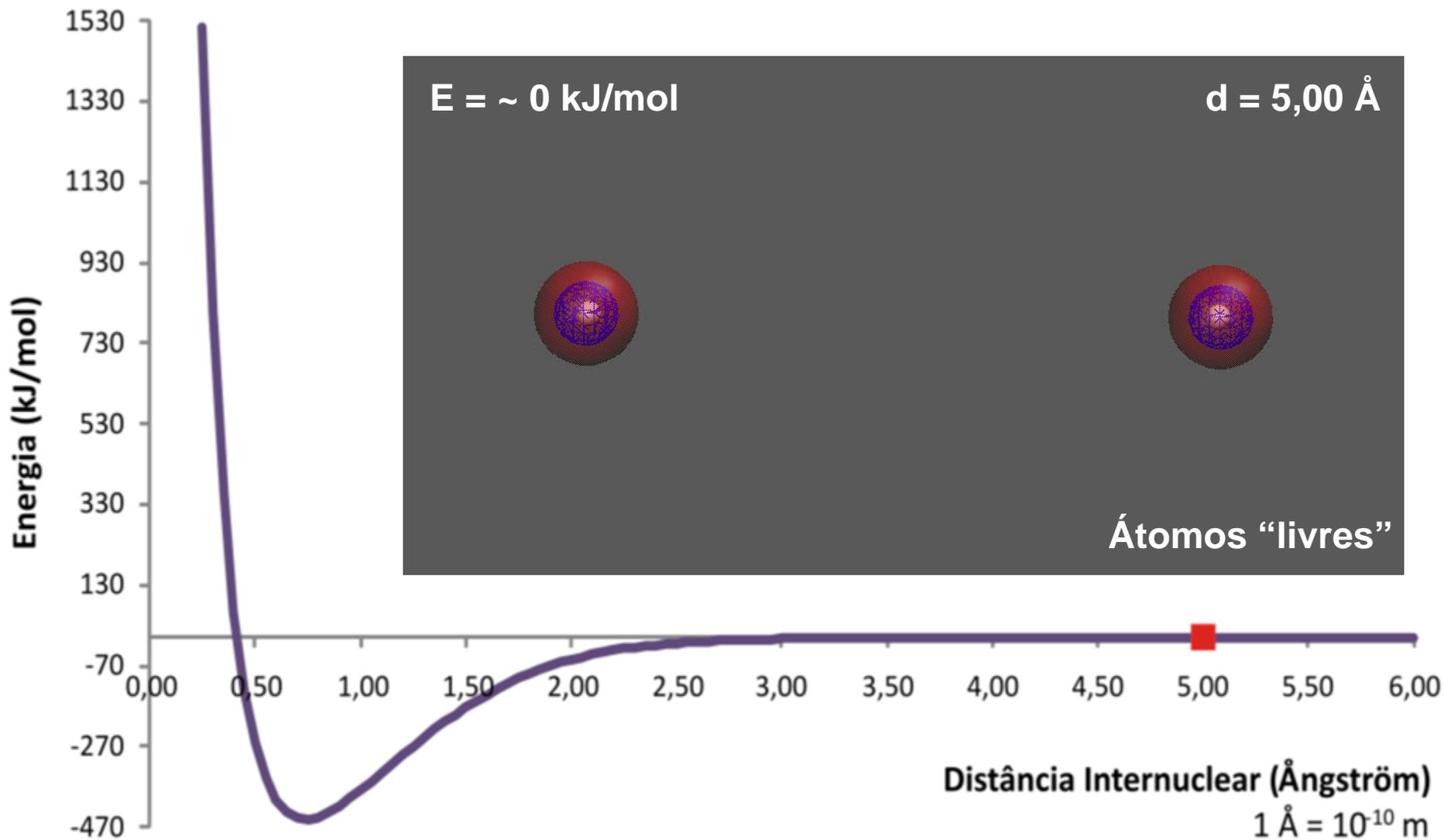
- Os próximos 27 slides representam a energia e conformação da molécula de hidrogénio, para várias distâncias internucleares.

(Ao rodar o scroll do rato é possível ver a sequência de imagens representativas da formação da molécula.)

Curva de Energia da Molécula de H₂



Curva de Energia da Molécula de H₂



$E = \sim 0 \text{ kJ/mol}$

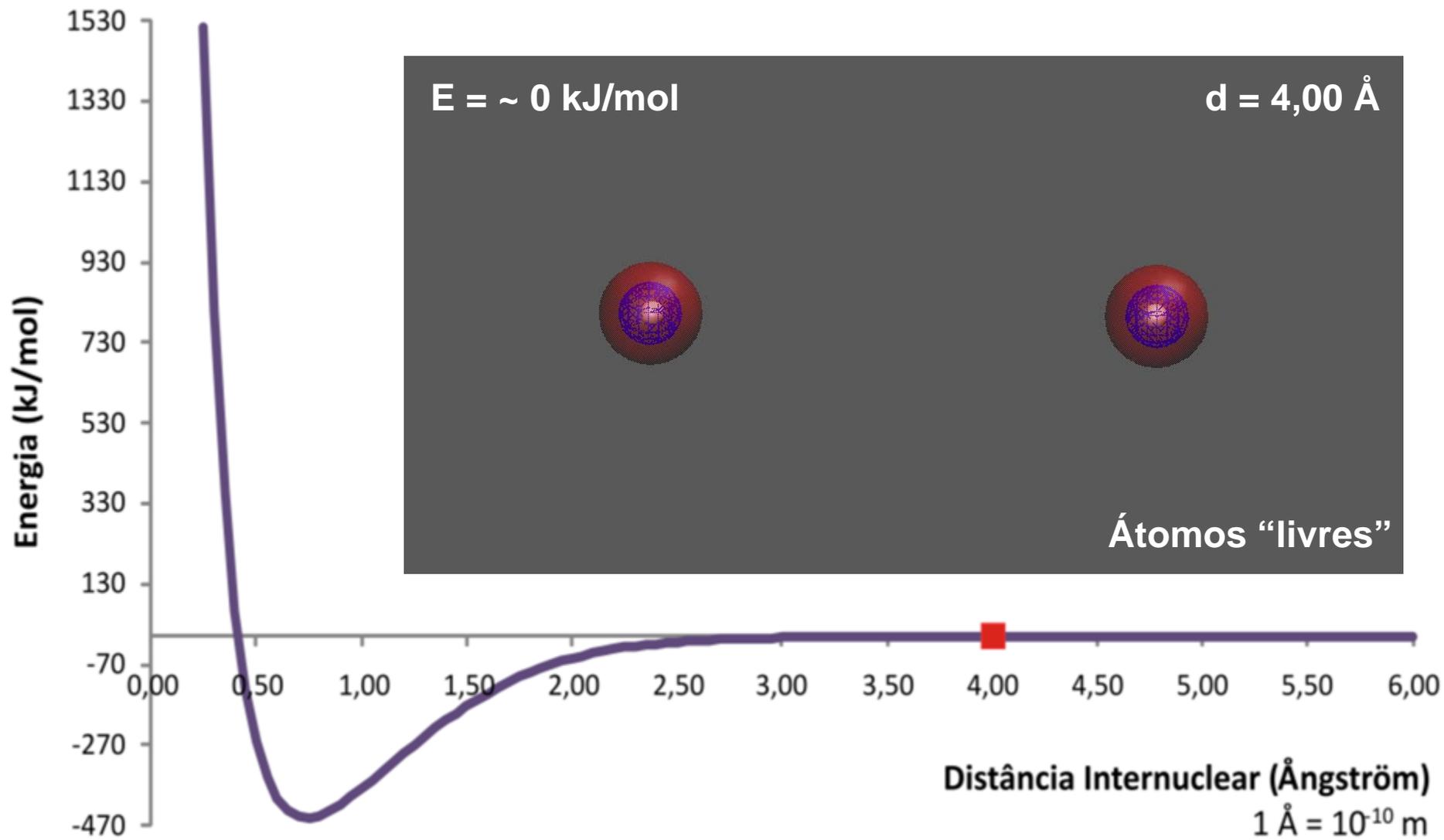
$d = 5,00 \text{ \AA}$

Átomos “livres”

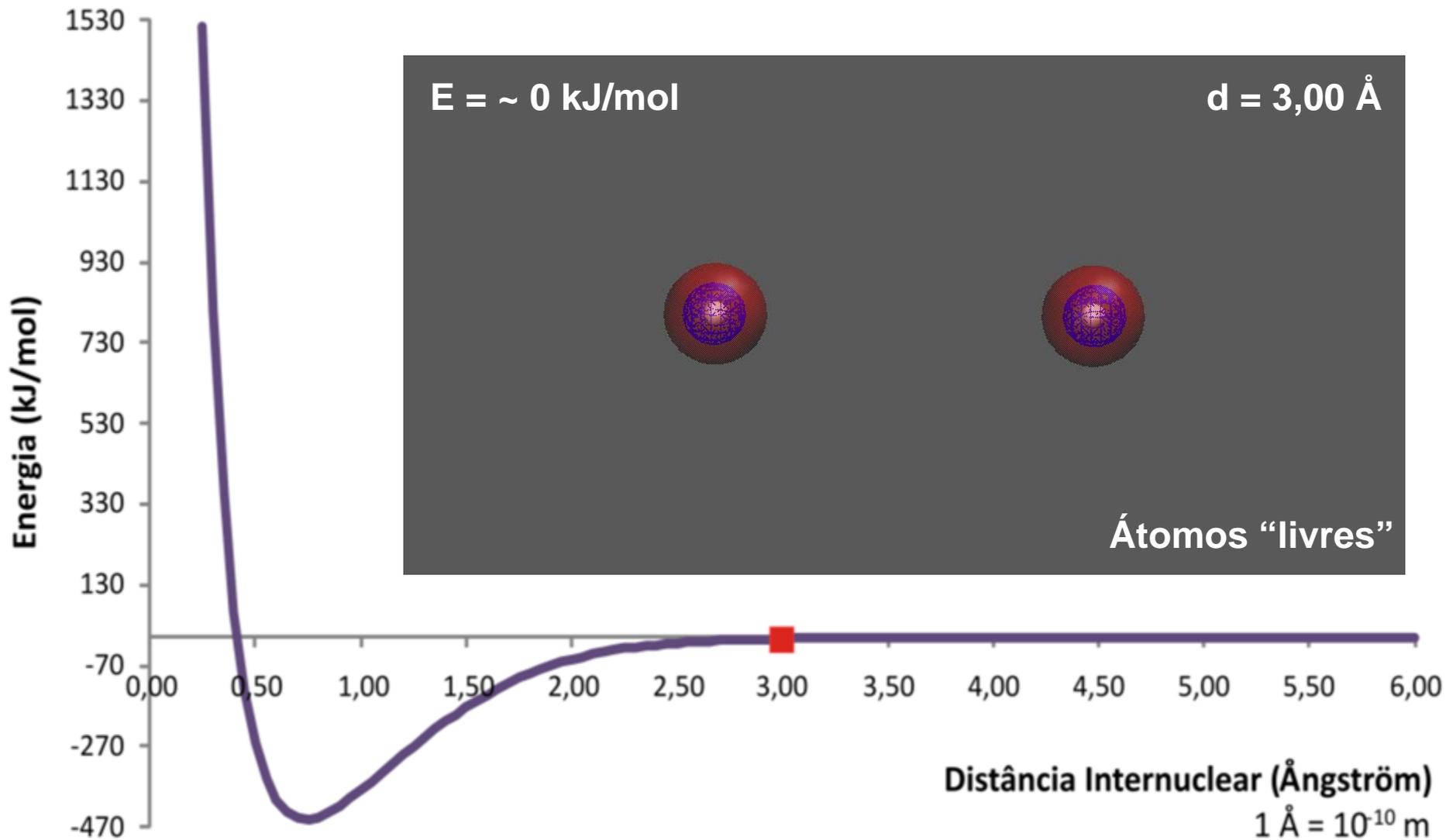
Distância Internuclear (Ångström)

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

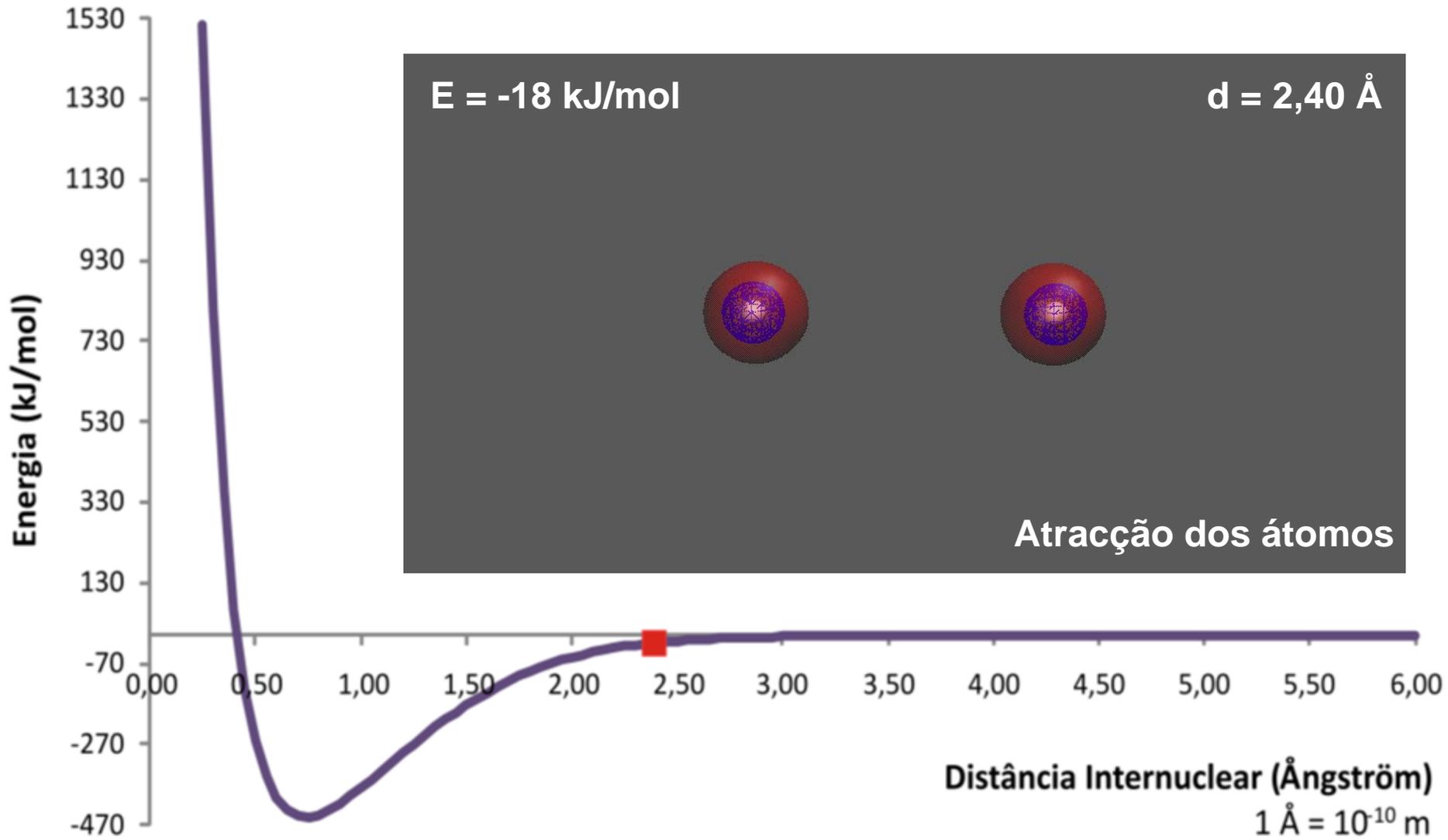
Curva de Energia da Molécula de H₂



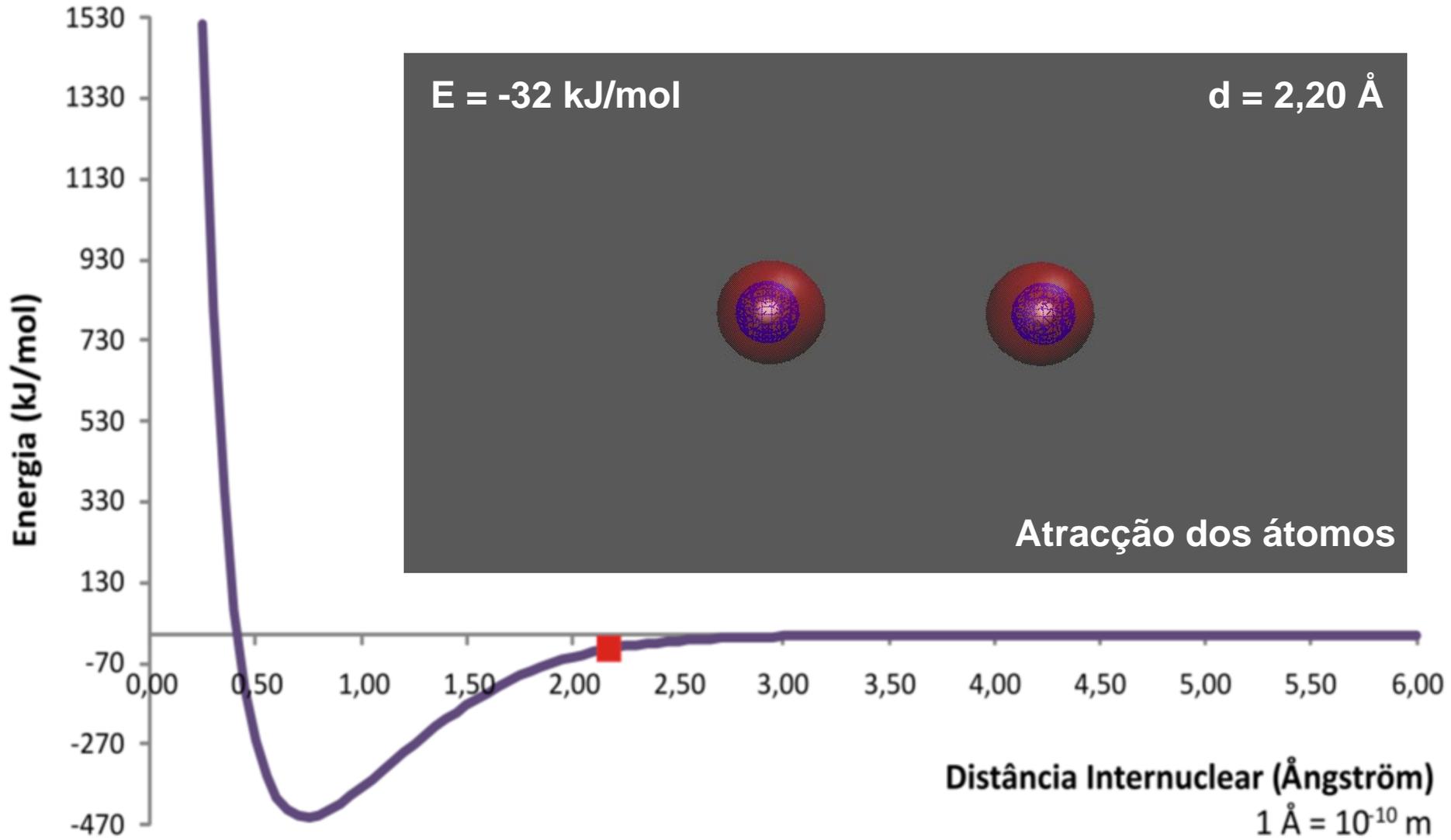
Curva de Energia da Molécula de H₂



Curva de Energia da Molécula de H₂

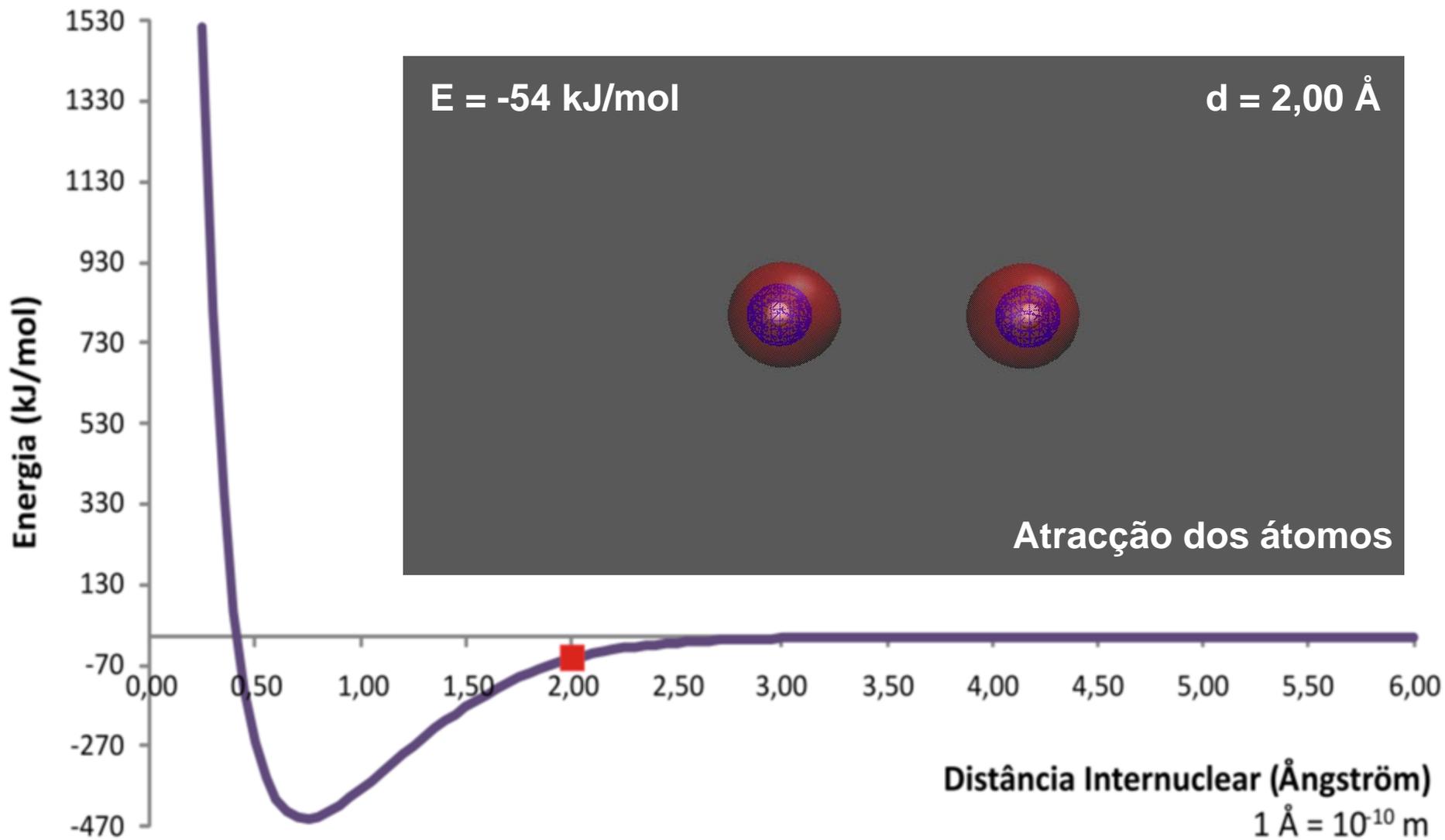


Curva de Energia da Molécula de H₂



Distância Internuclear (Ångström)
1 Å = 10⁻¹⁰ m

Curva de Energia da Molécula de H₂



$E = -54 \text{ kJ/mol}$

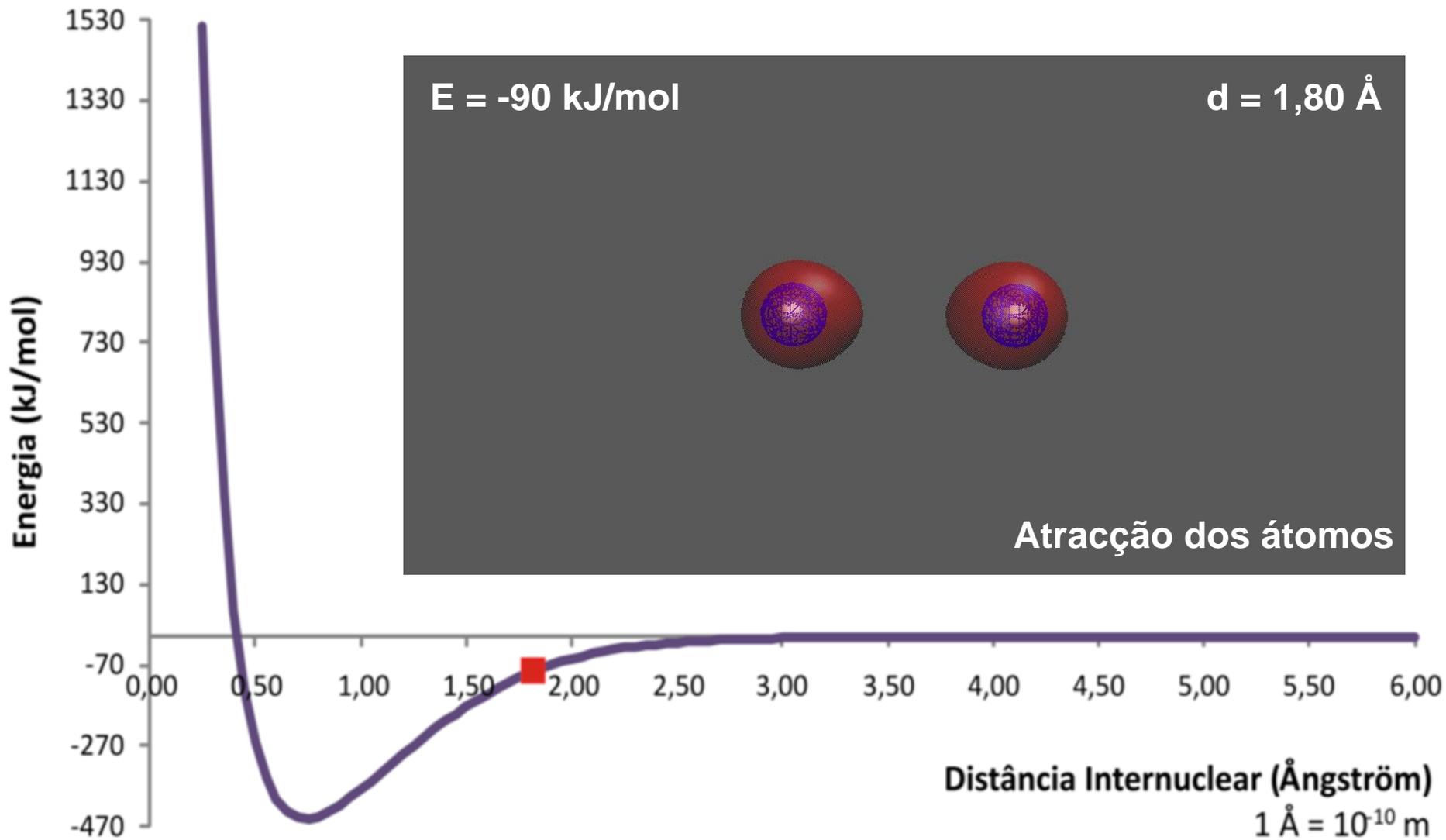
$d = 2,00 \text{ \AA}$

Atracção dos átomos

Distância Internuclear (Ångström)

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

Curva de Energia da Molécula de H₂



$E = -90 \text{ kJ/mol}$

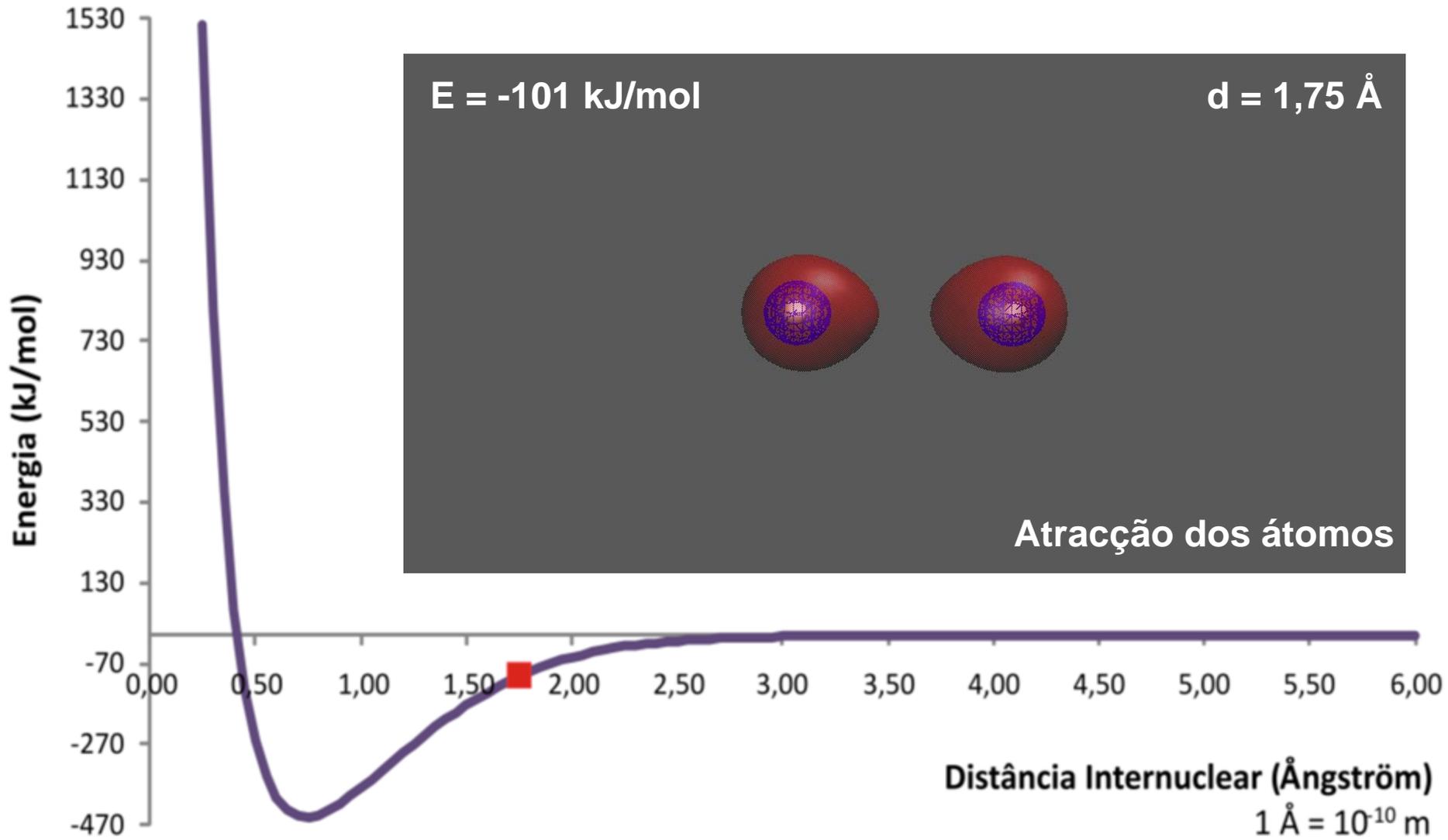
$d = 1,80 \text{ \AA}$

Atracção dos átomos

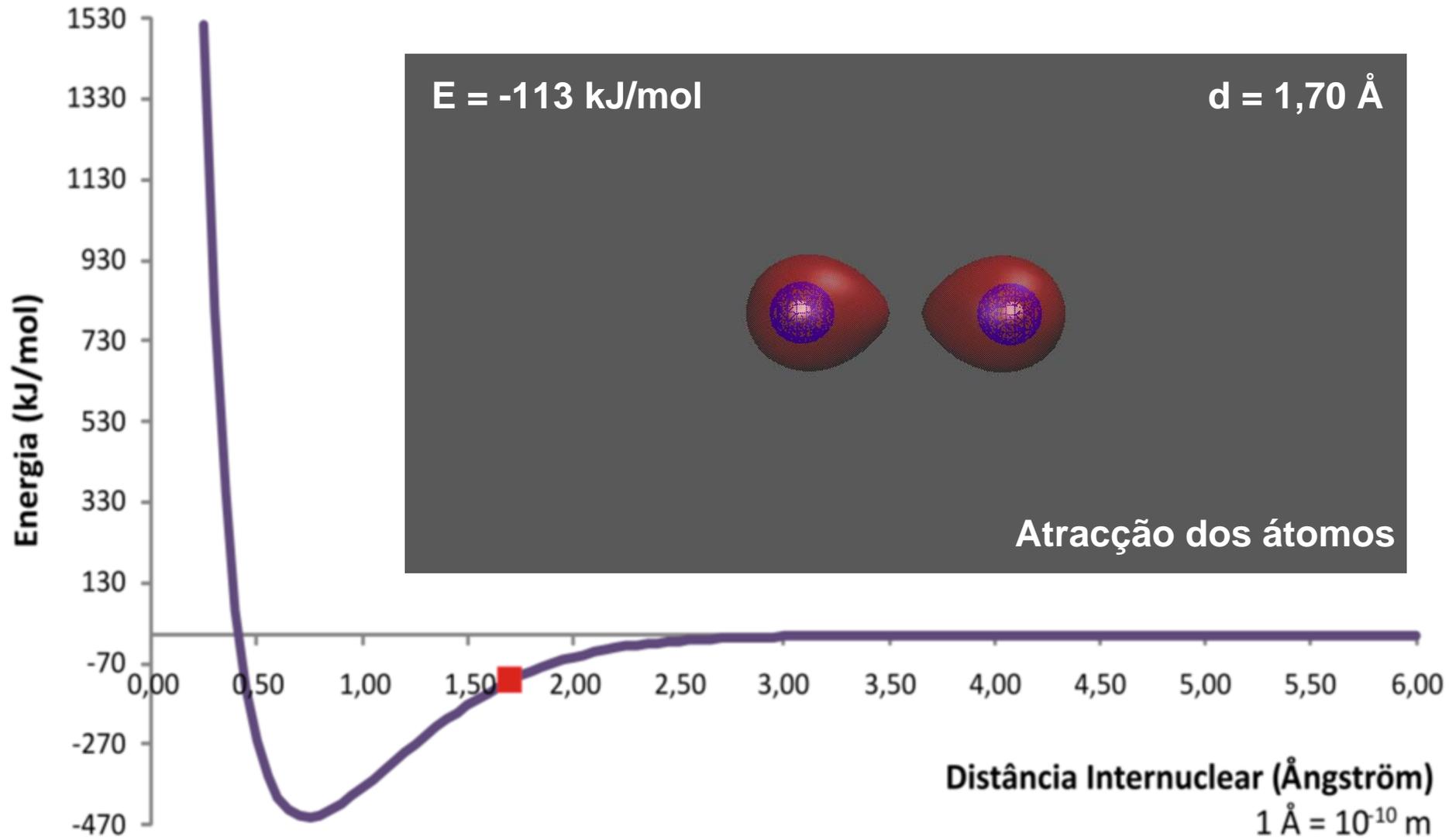
Distância Internuclear (Ångström)

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

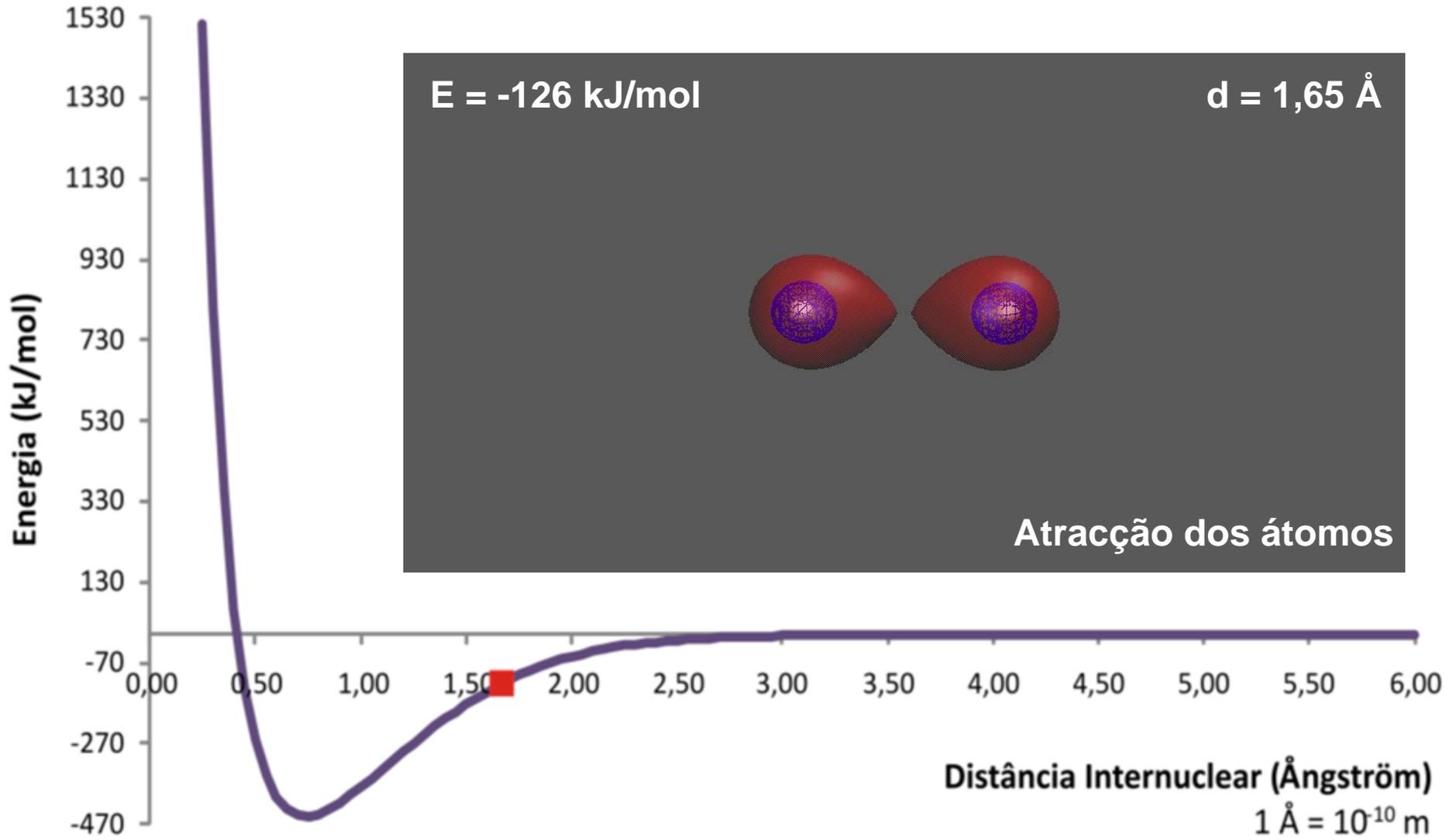
Curva de Energia da Molécula de H₂



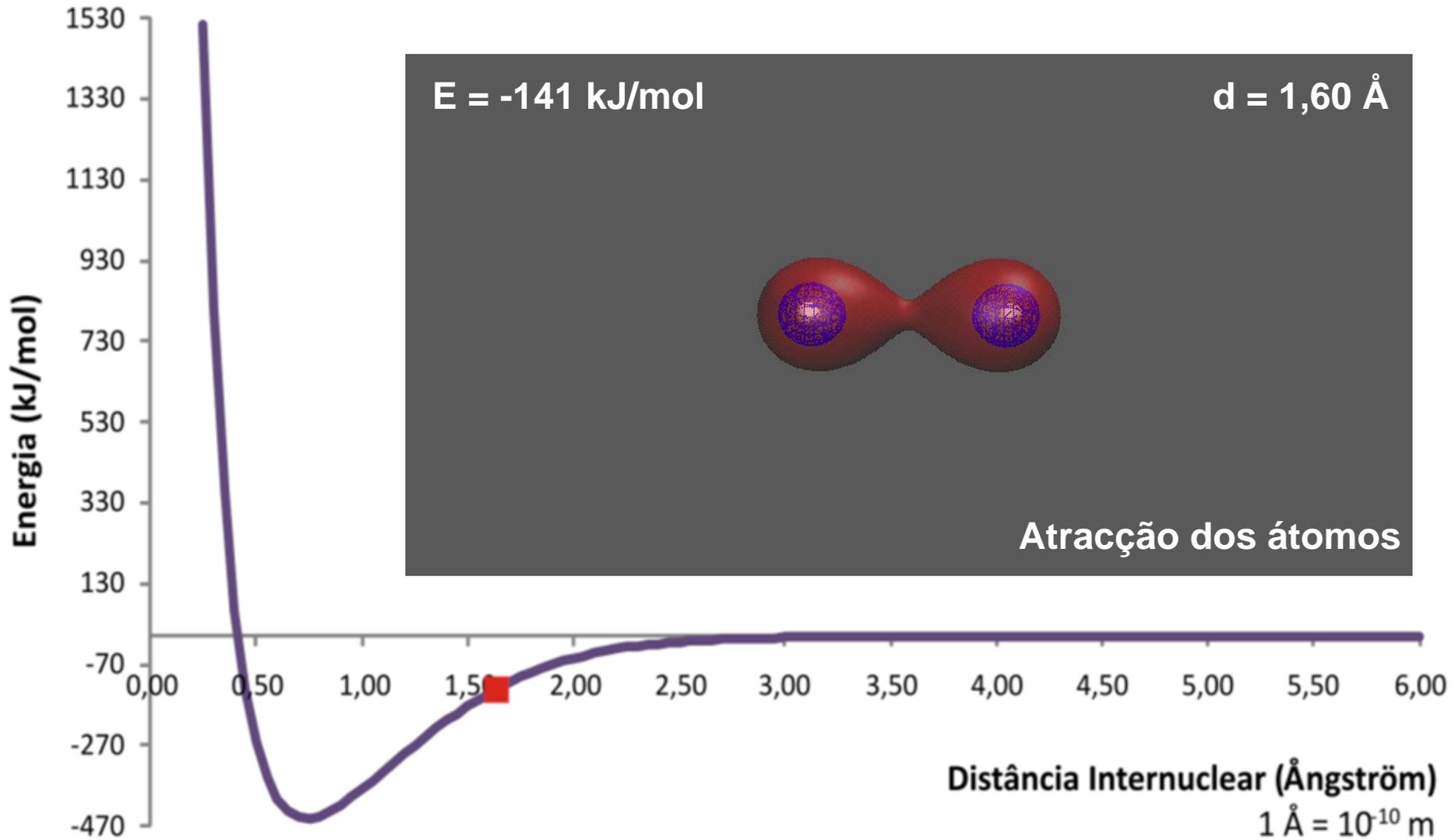
Curva de Energia da Molécula de H₂



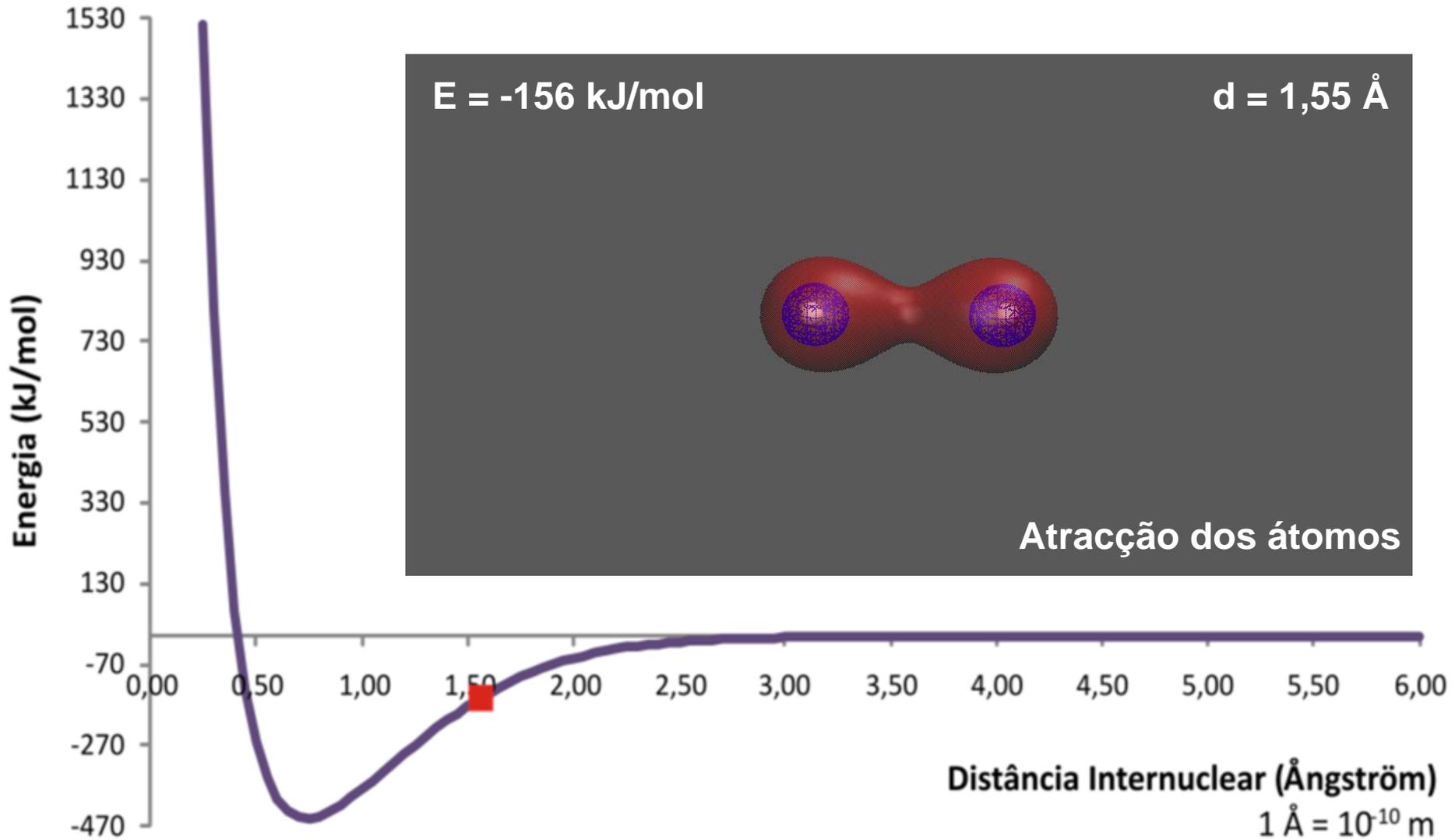
Curva de Energia da Molécula de H₂



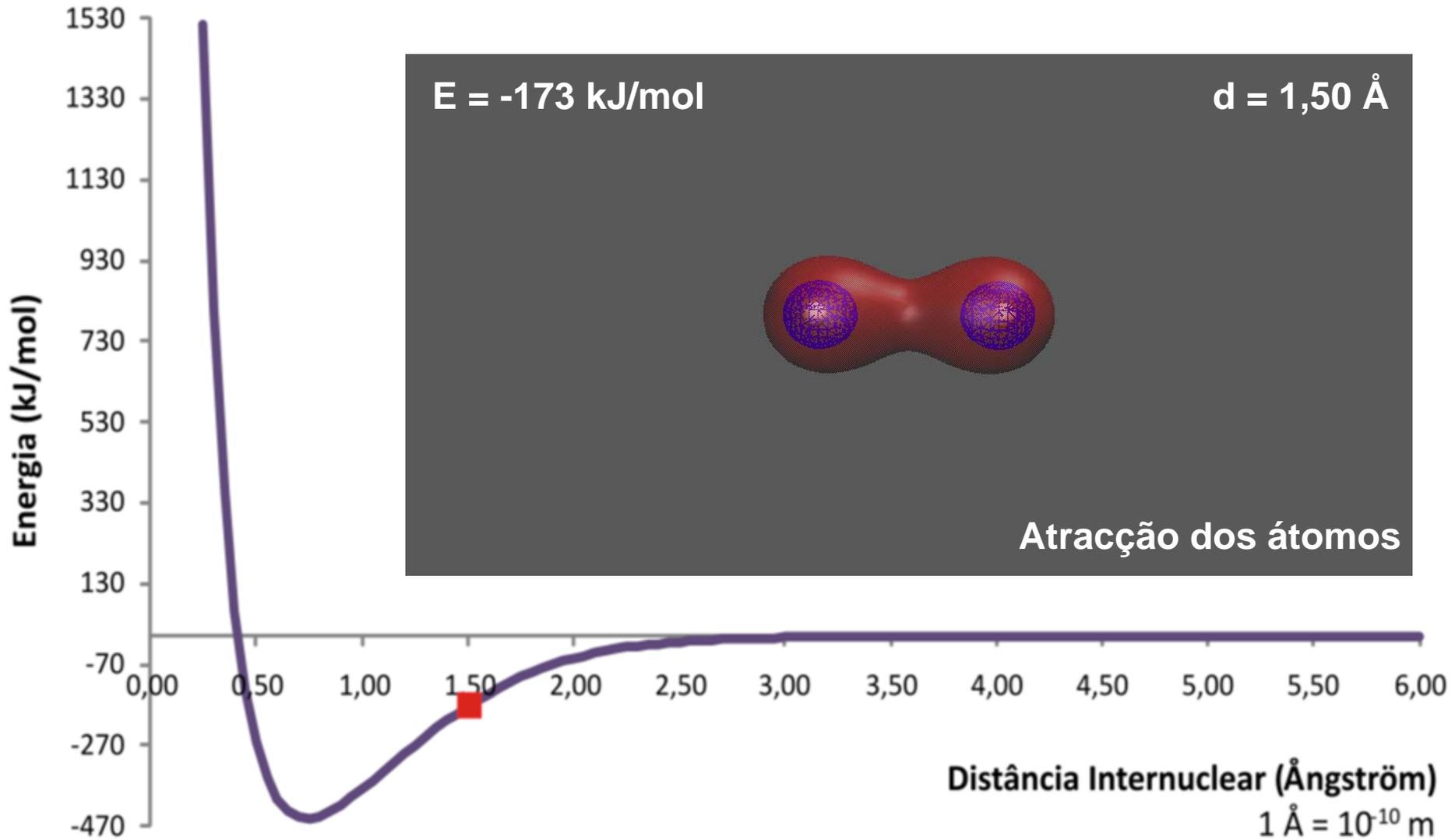
Curva de Energia da Molécula de H₂



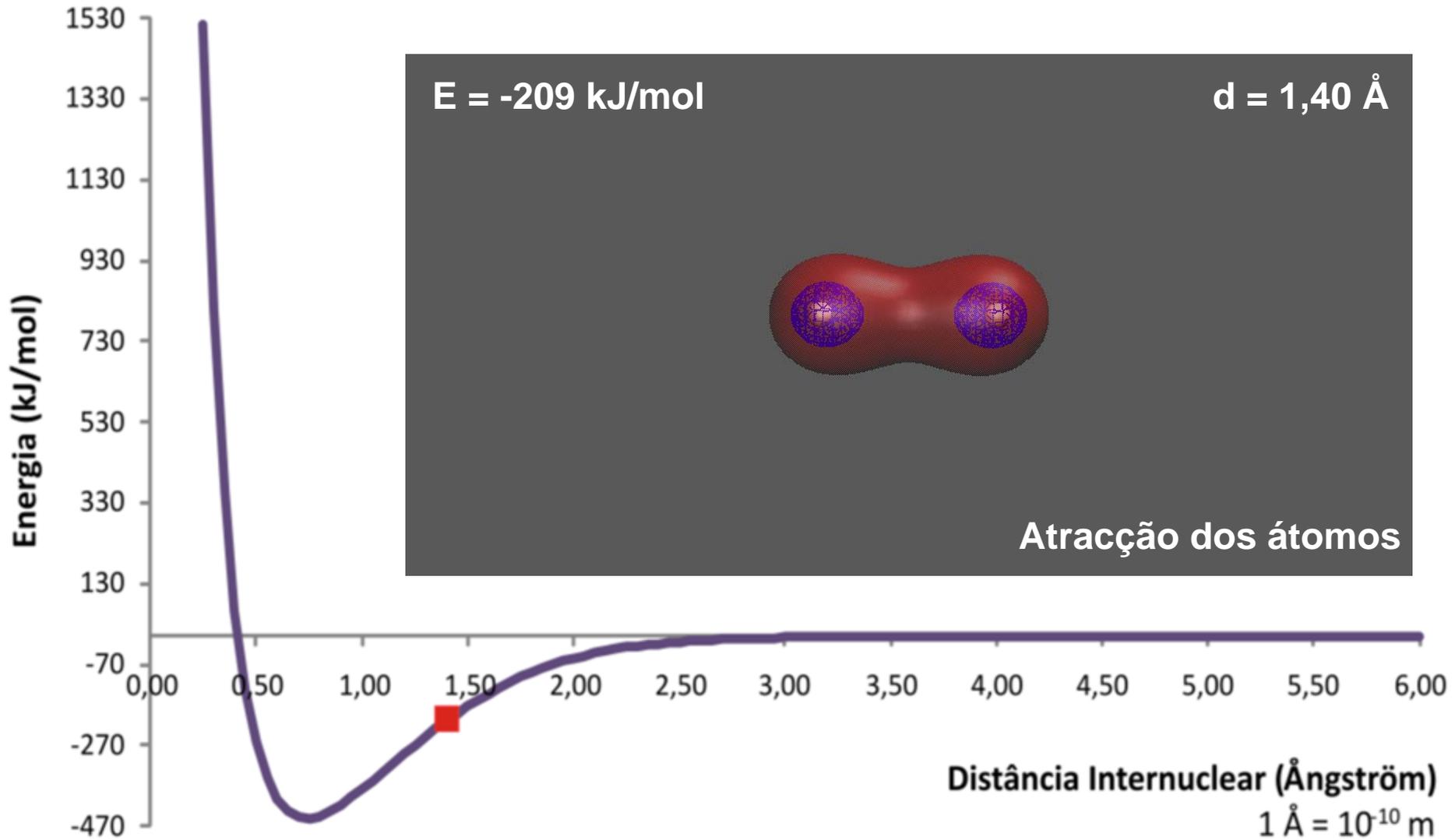
Curva de Energia da Molécula de H₂



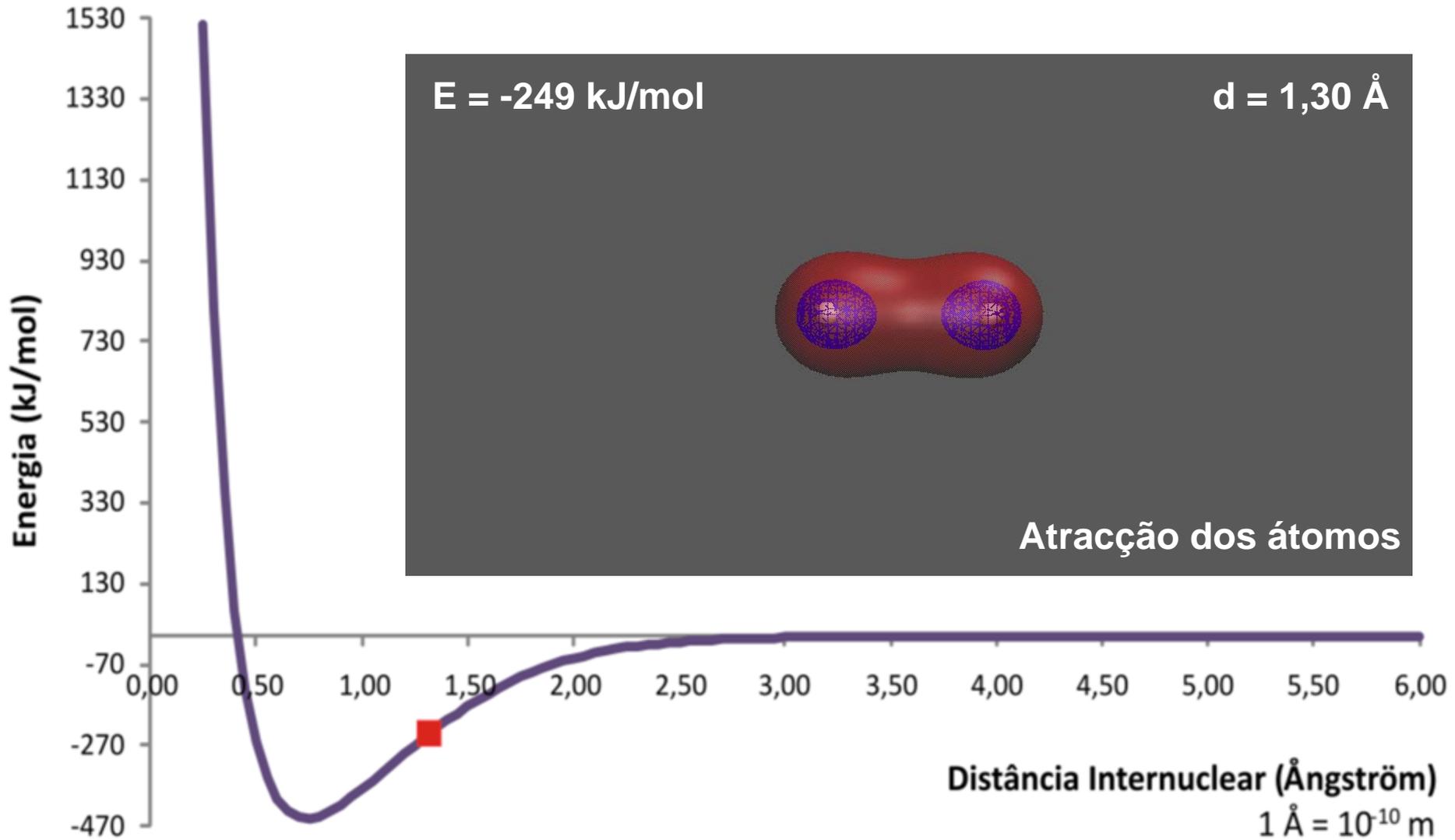
Curva de Energia da Molécula de H₂



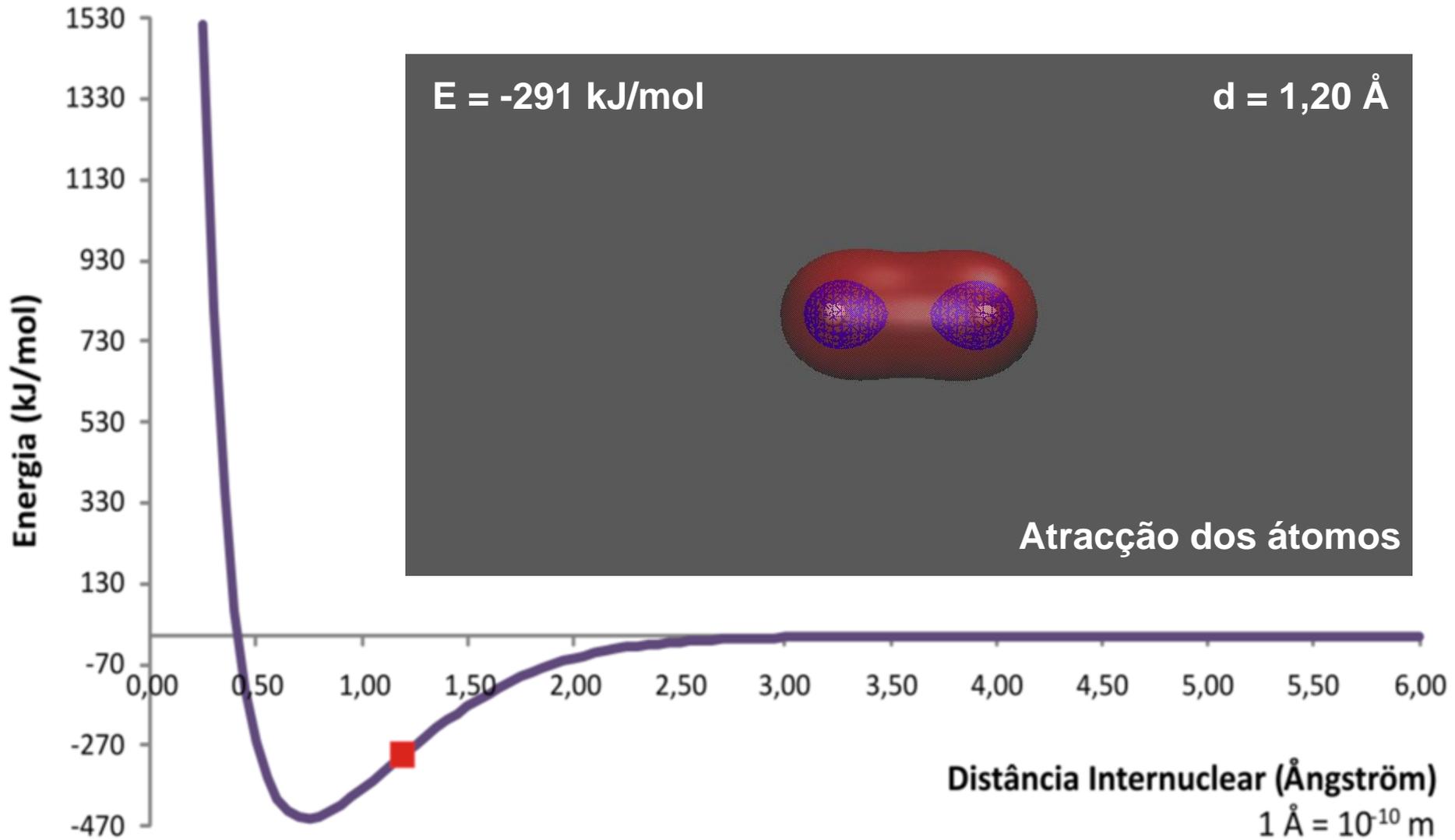
Curva de Energia da Molécula de H₂



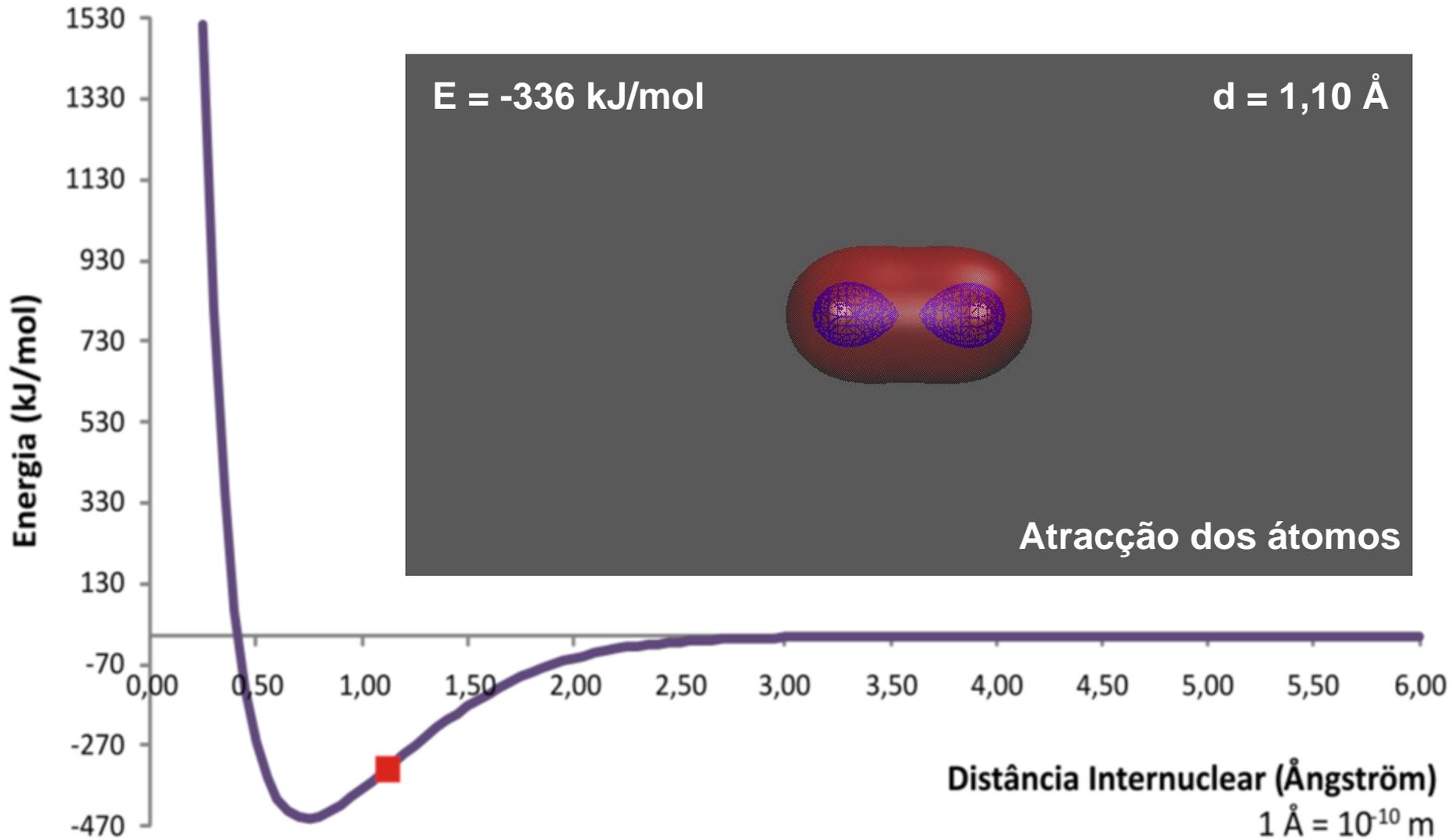
Curva de Energia da Molécula de H₂



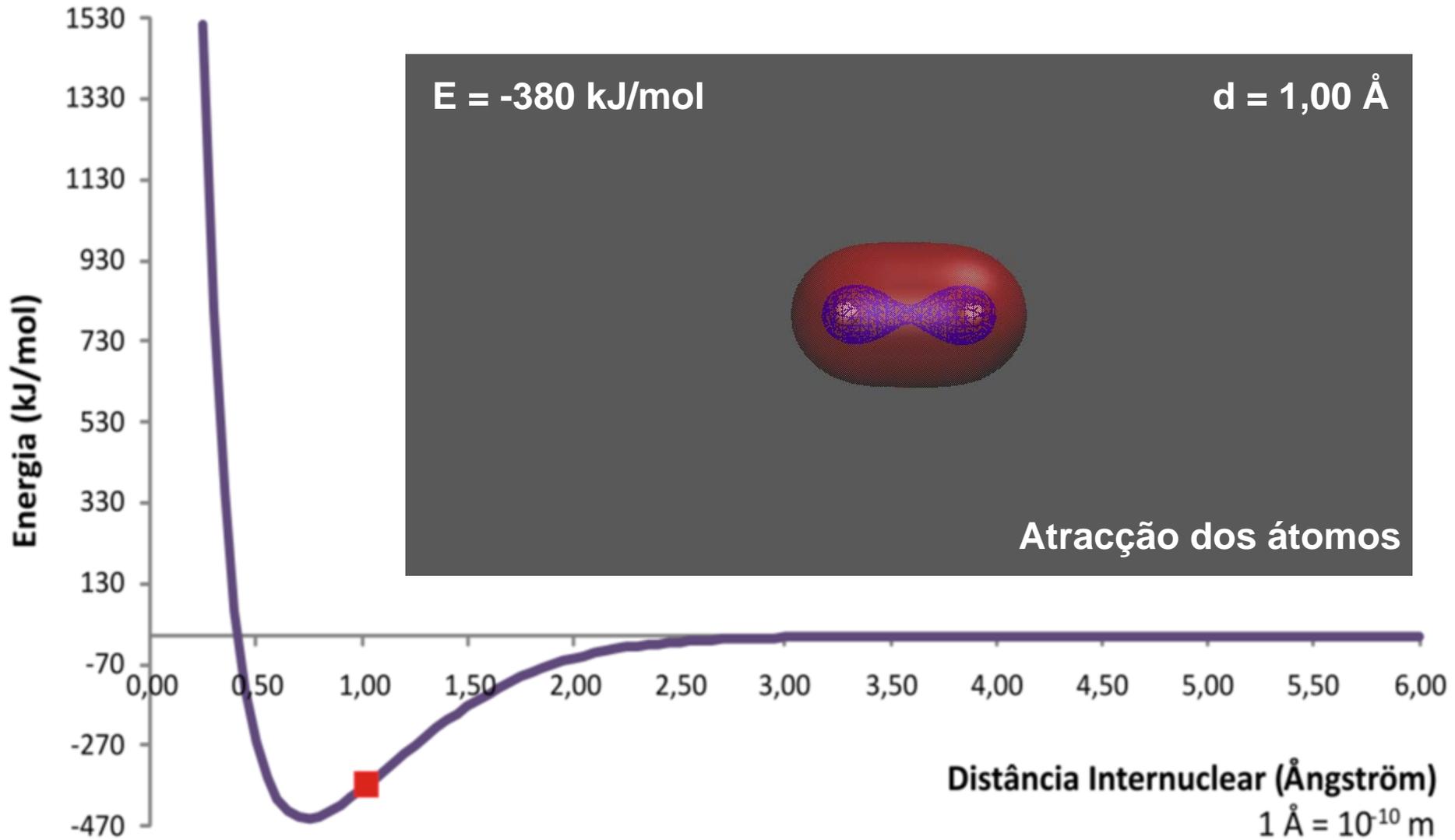
Curva de Energia da Molécula de H₂



Curva de Energia da Molécula de H₂



Curva de Energia da Molécula de H₂



$E = -380 \text{ kJ/mol}$

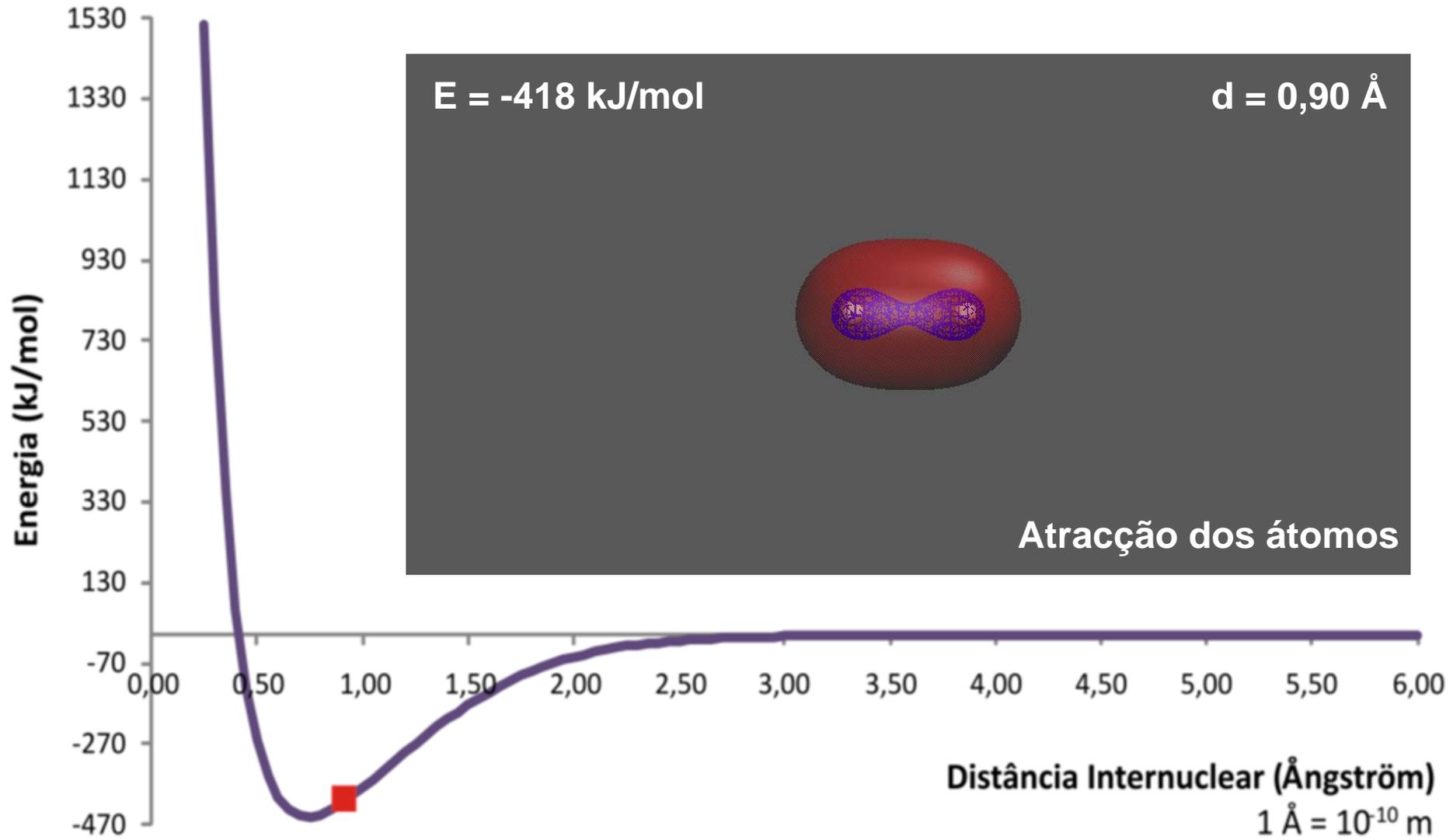
$d = 1,00 \text{ \AA}$

Atracção dos átomos

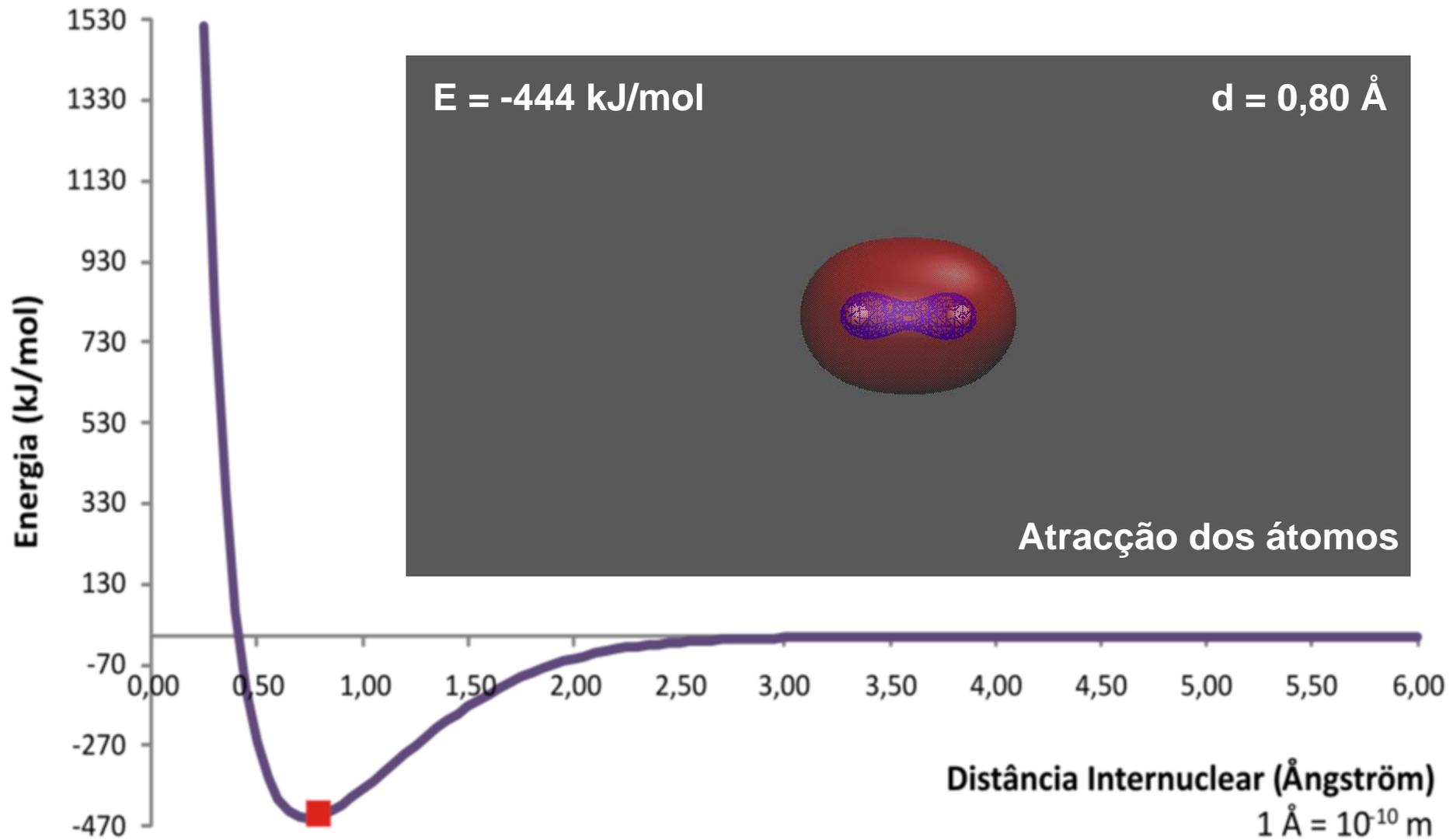
Distância Internuclear (Ångström)

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

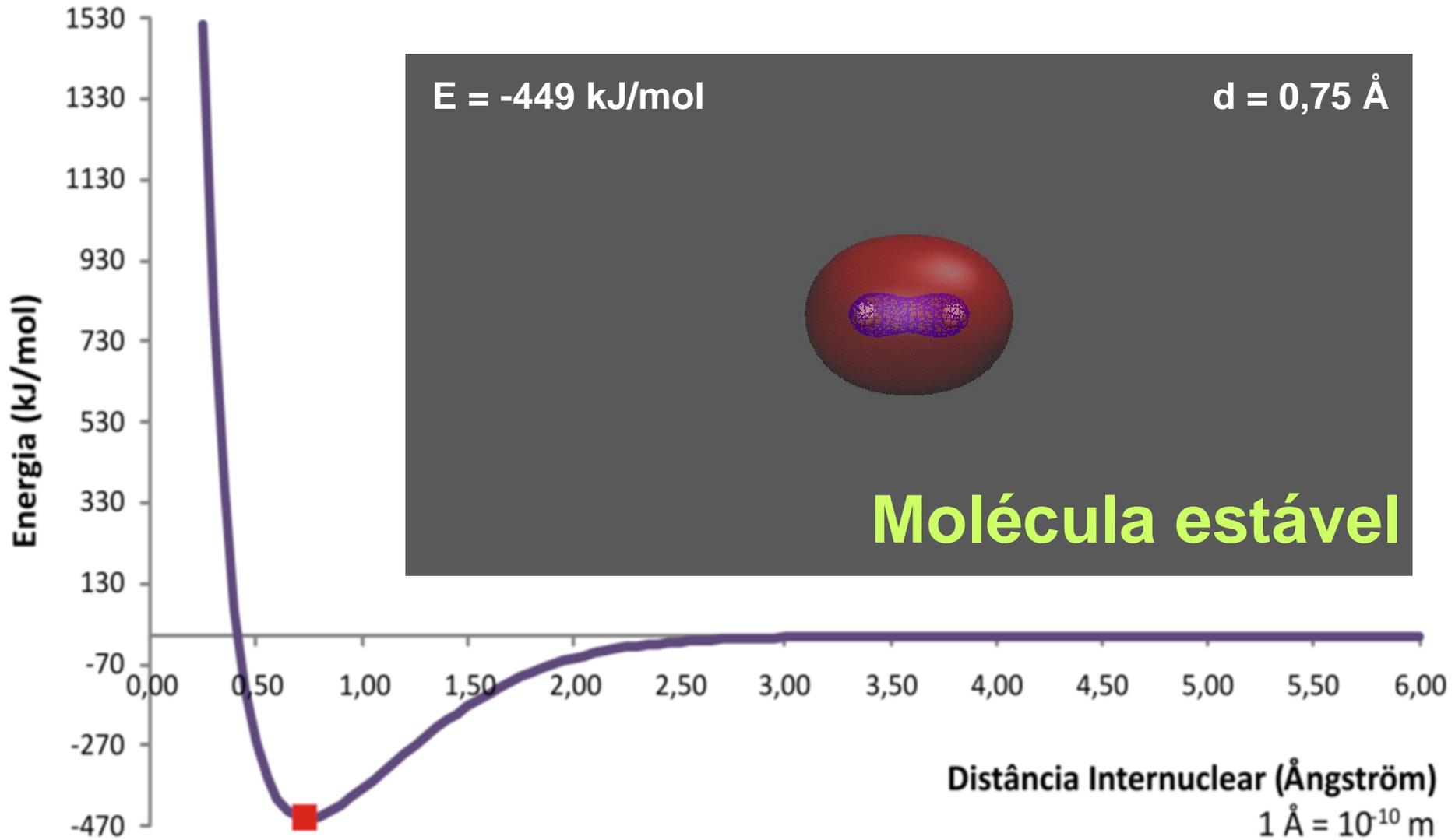
Curva de Energia da Molécula de H₂



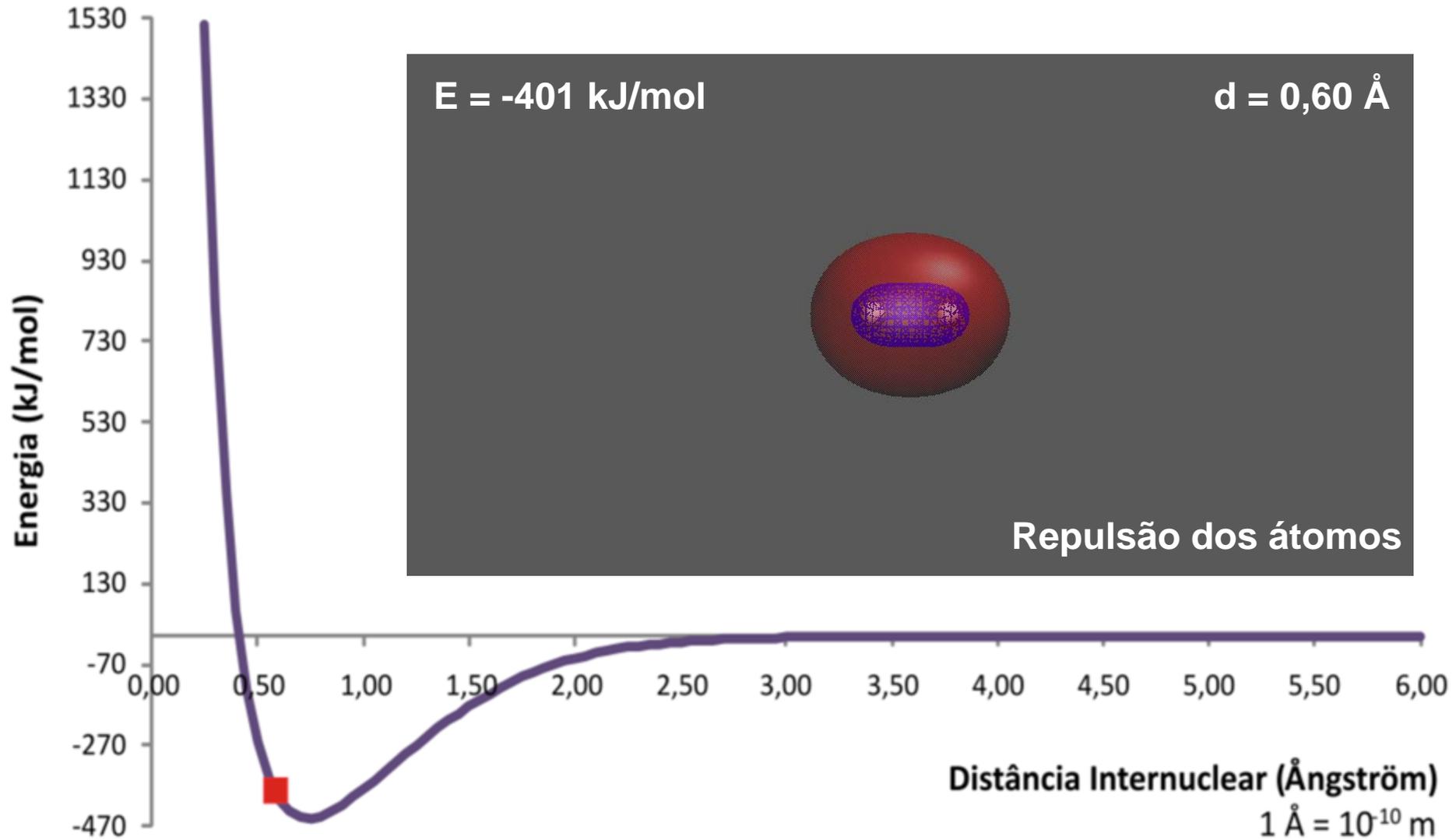
Curva de Energia da Molécula de H₂



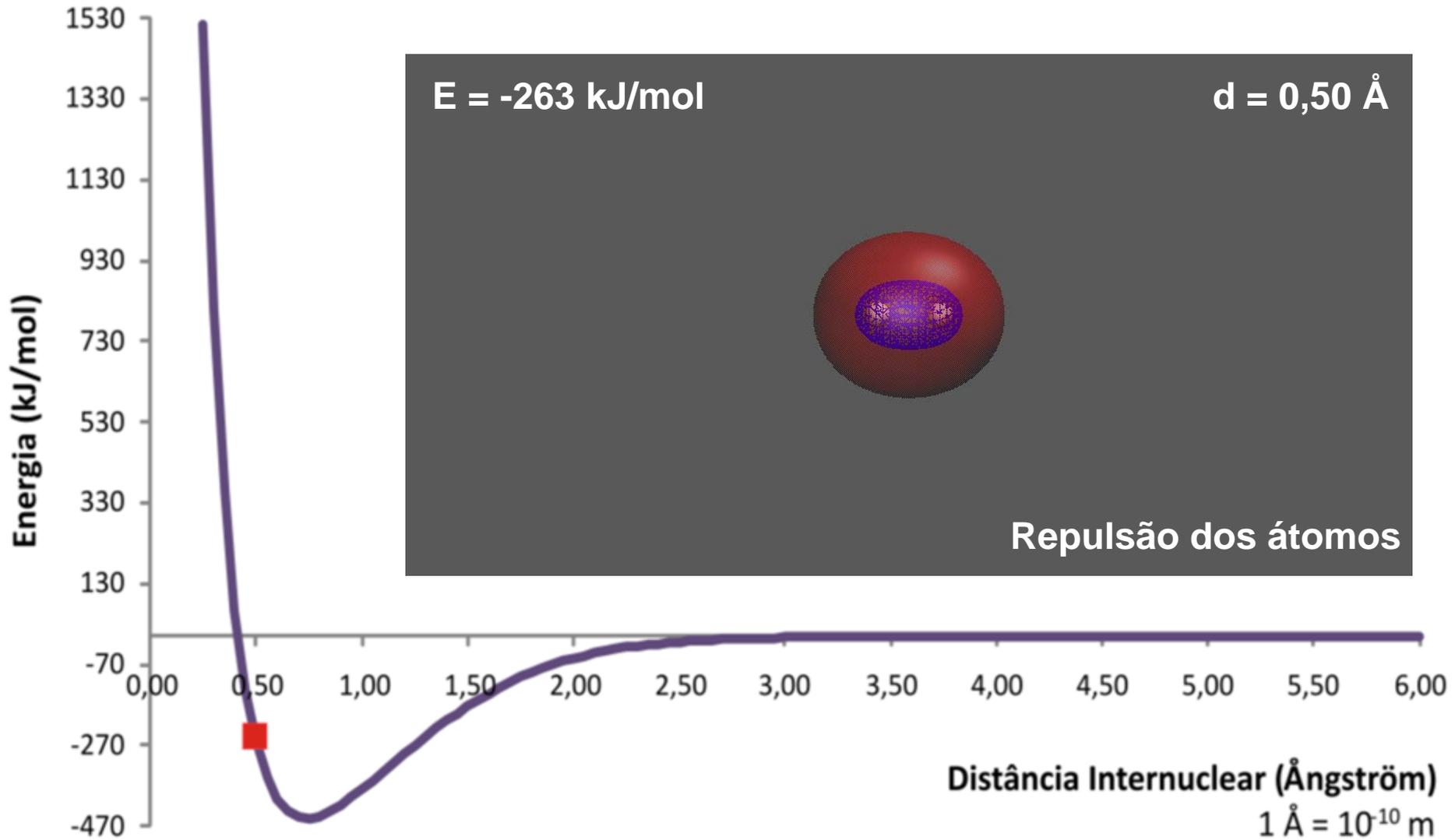
Curva de Energia da Molécula de H₂



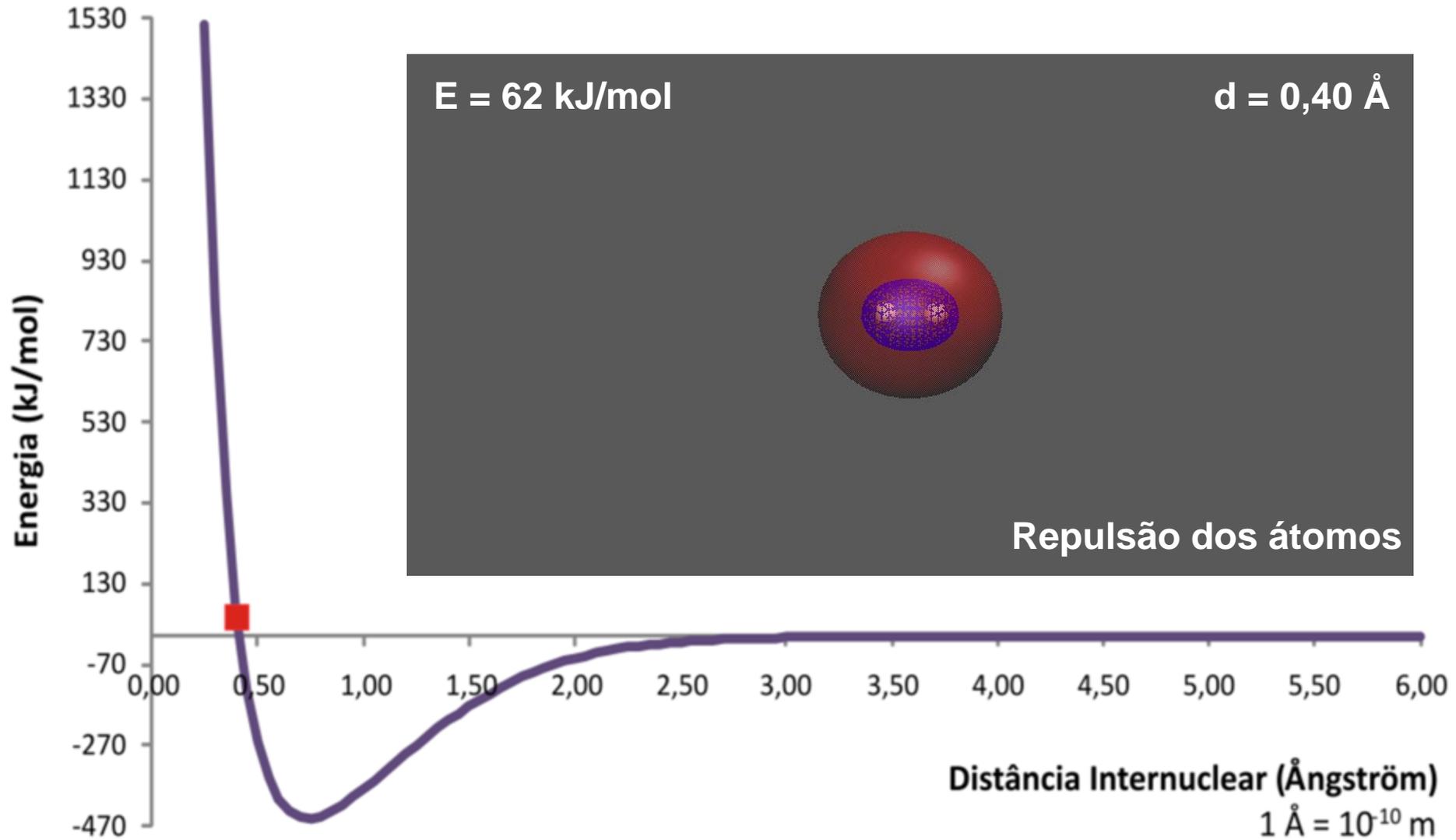
Curva de Energia da Molécula de H₂



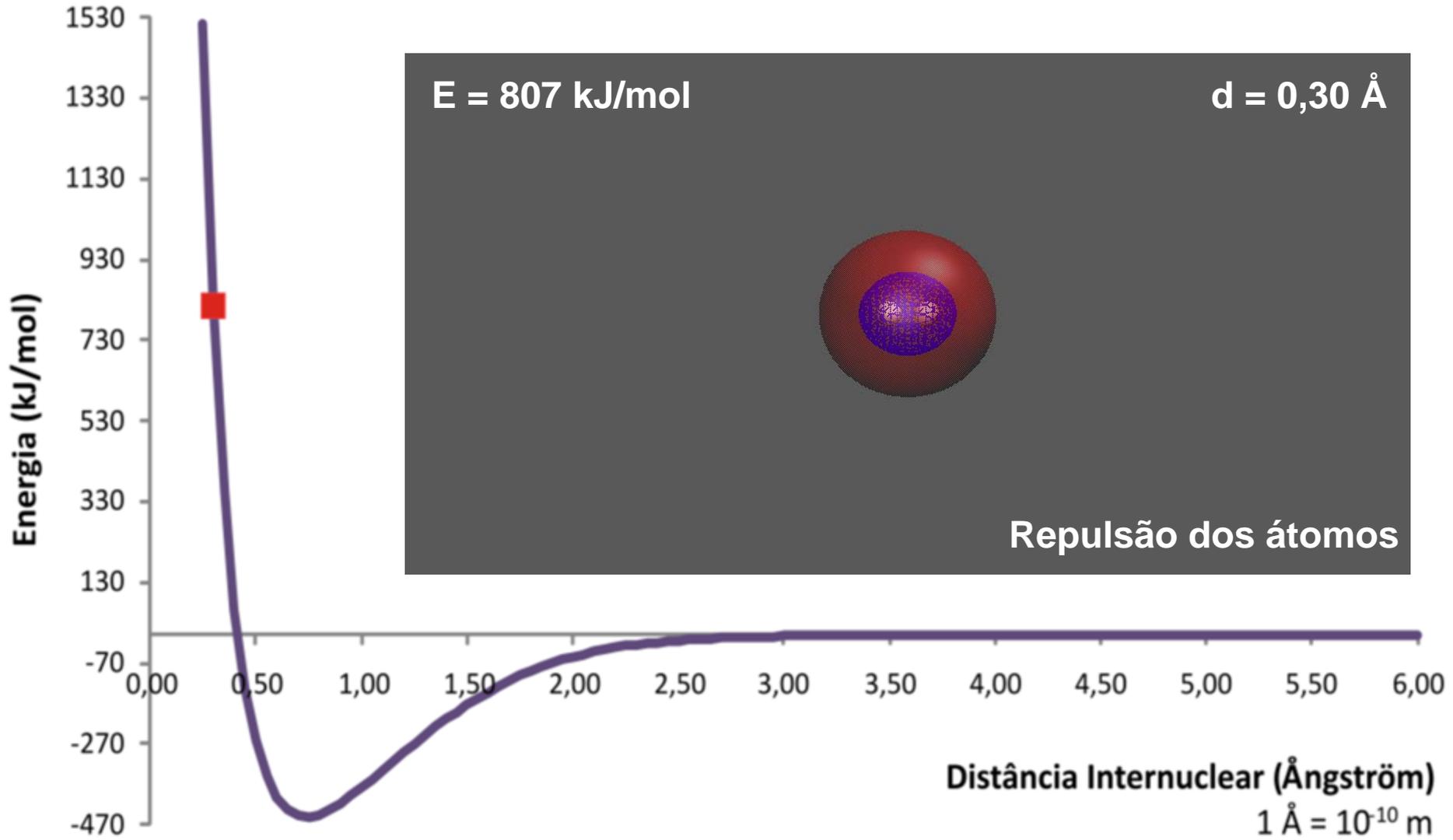
Curva de Energia da Molécula de H₂



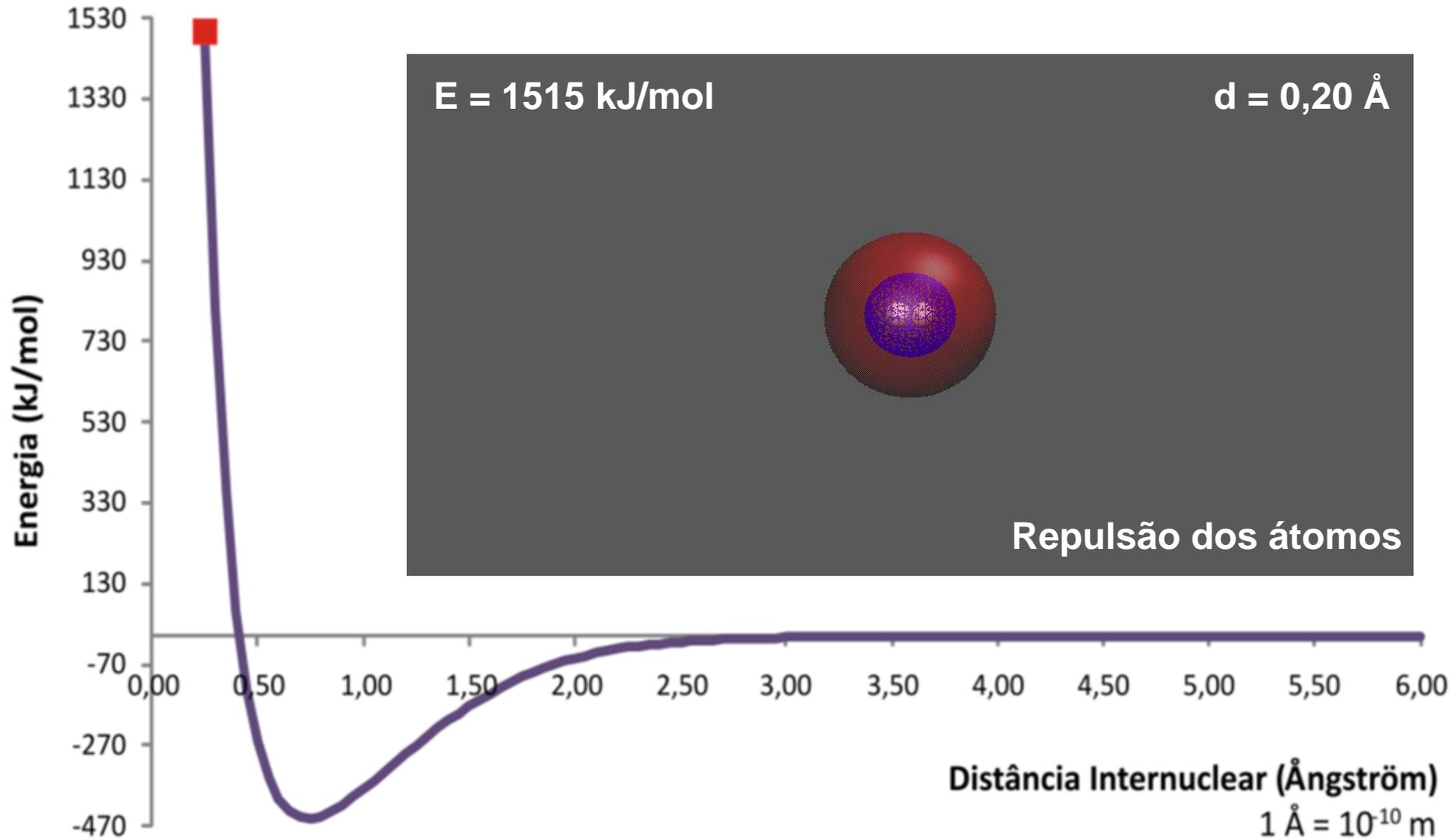
Curva de Energia da Molécula de H₂



Curva de Energia da Molécula de H₂



Curva de Energia da Molécula de H₂



Conclusão

- A ligação química resulta de um equilíbrio entre os diferentes tipos de interacções entre os átomos que constituem a molécula.
- As atracções entre electrões e núcleos originam uma deformação da nuvem electrónicas na zona internuclear.
- As repulsões entre núcleos originam um aumento abrupto da energia da molécula.