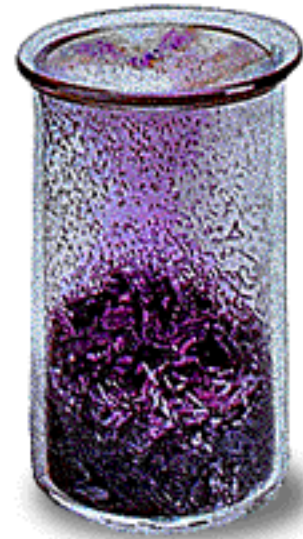
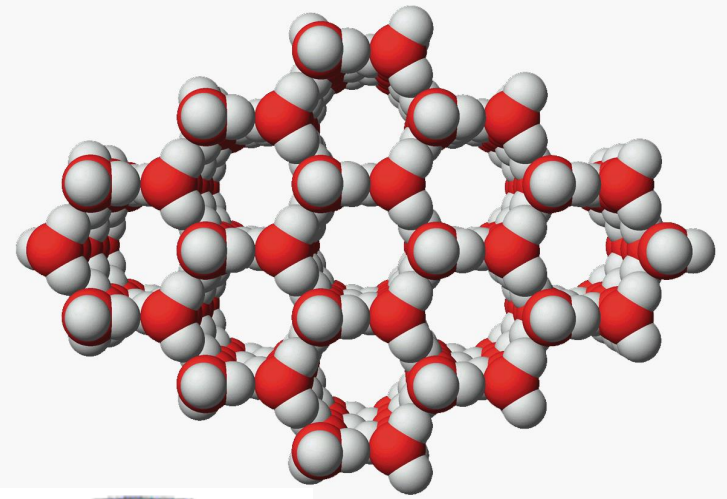
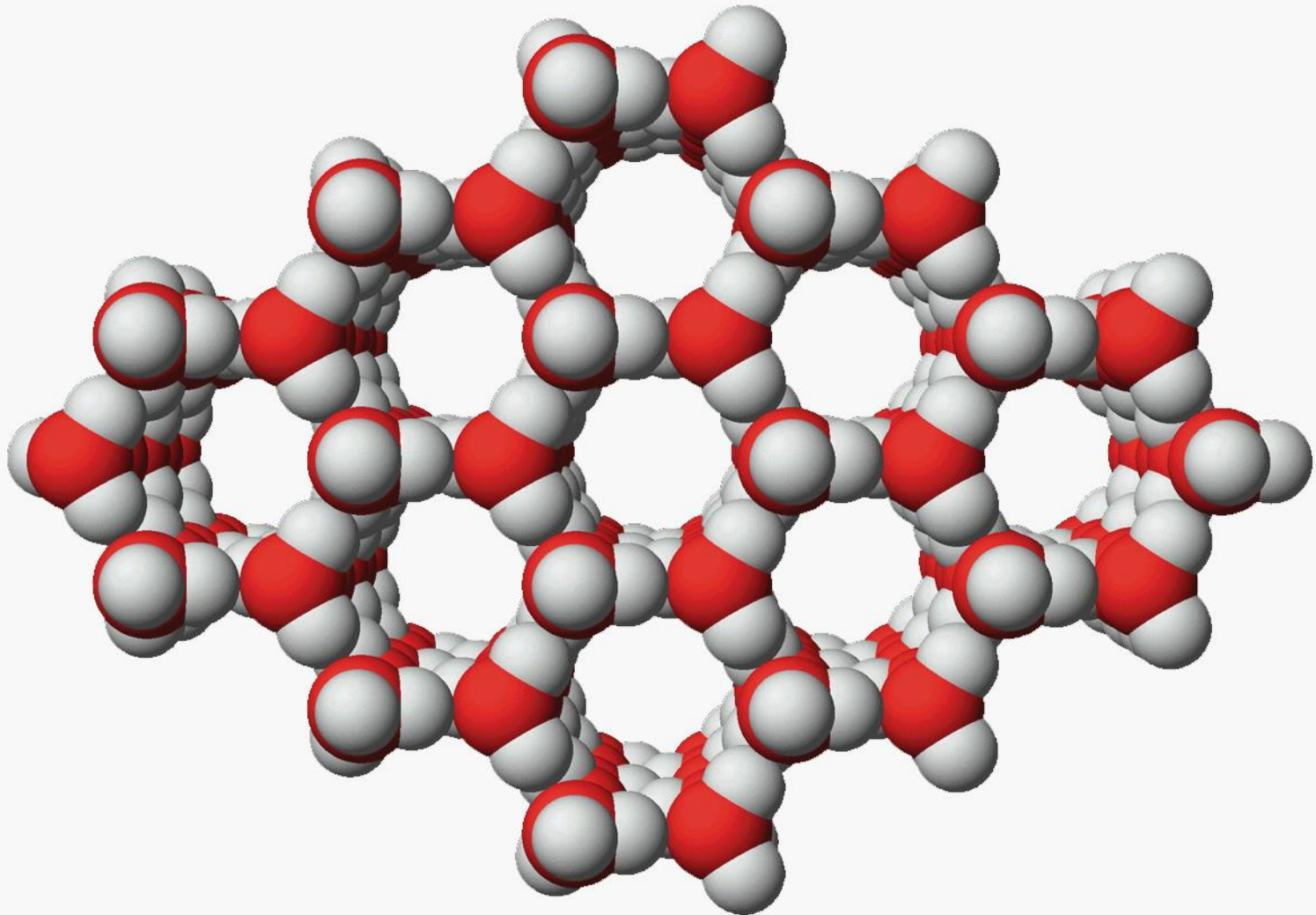


POR QUE?

- A água, em geral, é um líquido e não um gás?
- A água líquida ferve a uma temperatura tão alta sendo uma molécula tão pequena?
- O gelo flutua na água?
- Os flocos de neve têm 6 lados?
- O I_2 é um sólido ao passo que o Cl_2 é um gás?
- Os cristais de NaCl são pequenos cubos?



Líquidos, Sólidos & Forças Intermoleculares



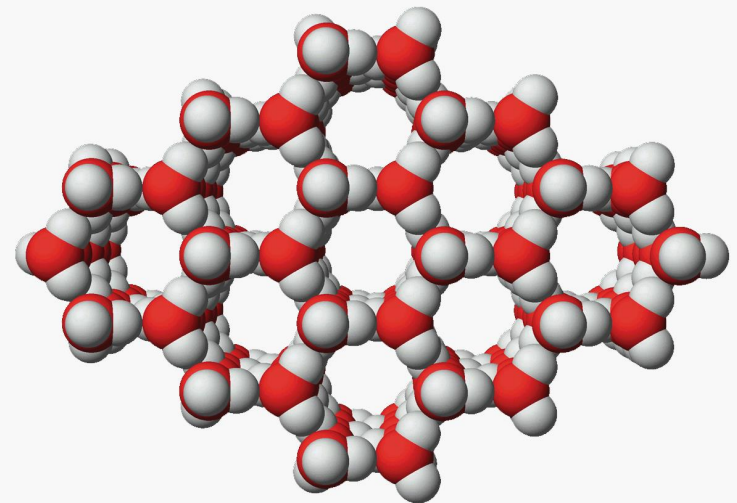
FORÇAS INTRAmoleculares

—são forças que mantêm juntos os átomos que formam as moléculas.

Forças Inter- moleculares

FORÇAS INTERmoleculares

—são forças entre moléculas entre íons, ou entre moléculas e íons.



Forças Íon-Íon

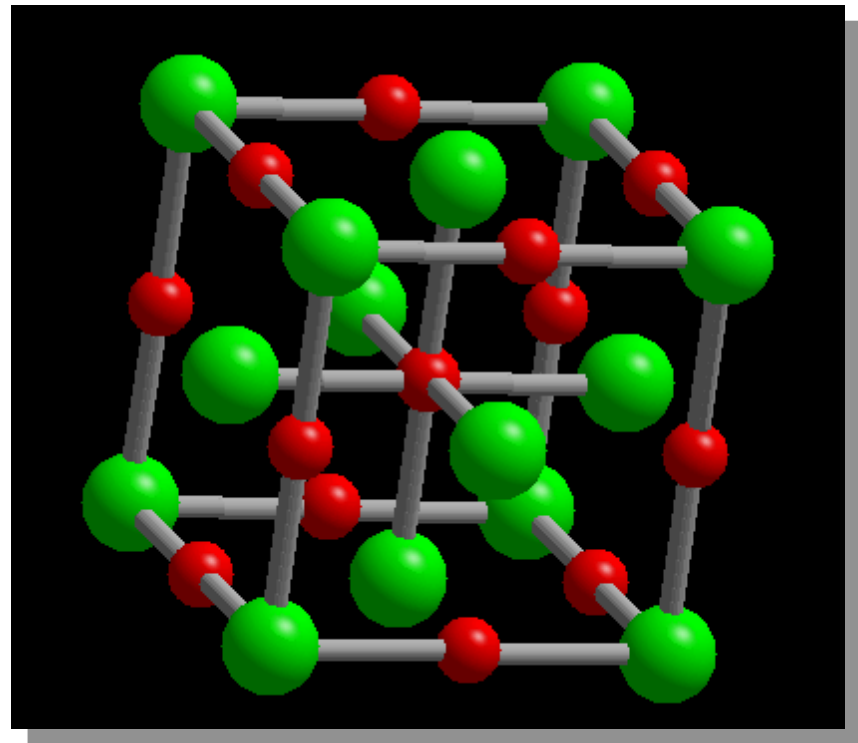
$\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$ no sal de cozinha

São as forças mais fortes.

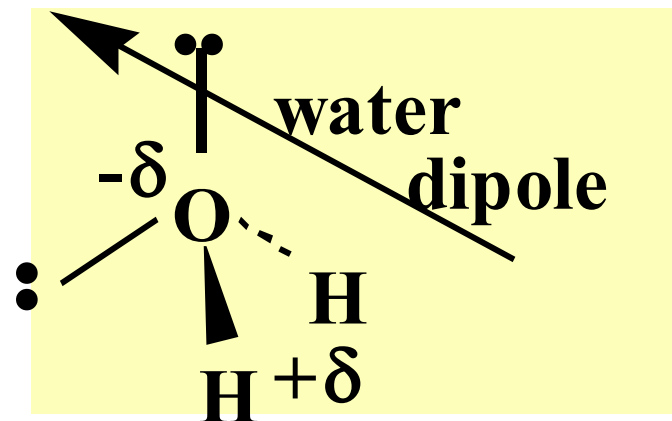
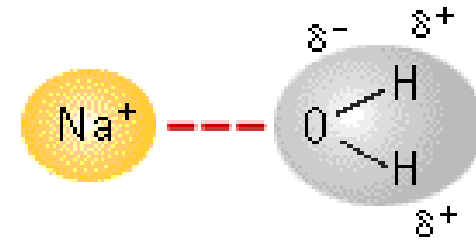
SÓLIDOS têm altas temperaturas de ebulição.

NaCl , pf = $800\text{ }^\circ\text{C}$

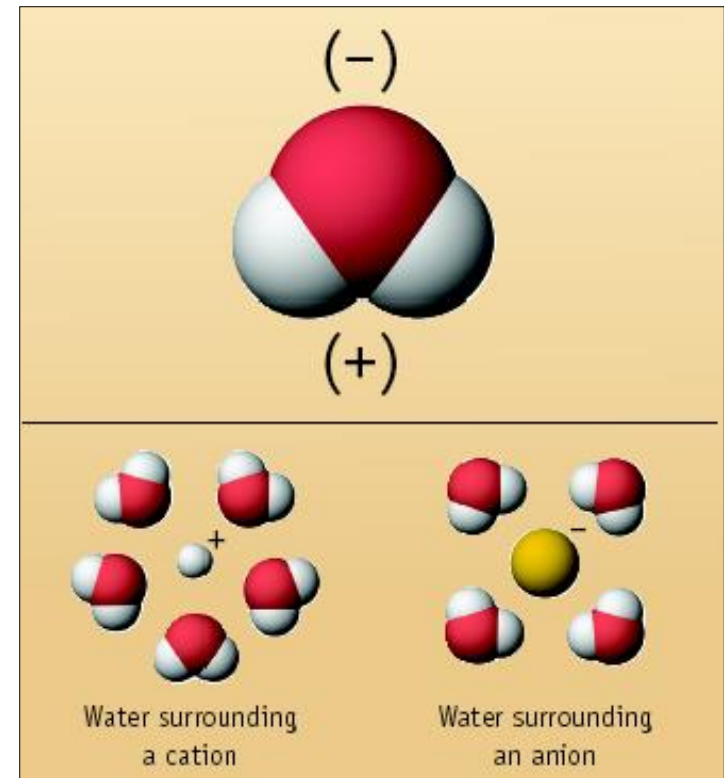
MgO , pf = $2800\text{ }^\circ\text{C}$



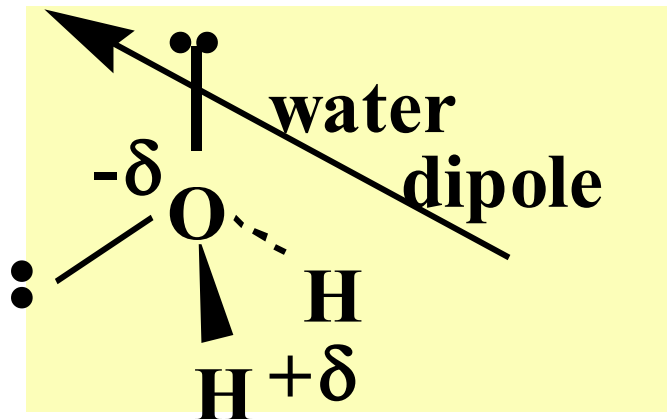
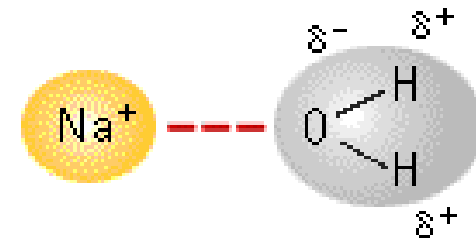
Atração entre Íons e Dipolos Permanentes



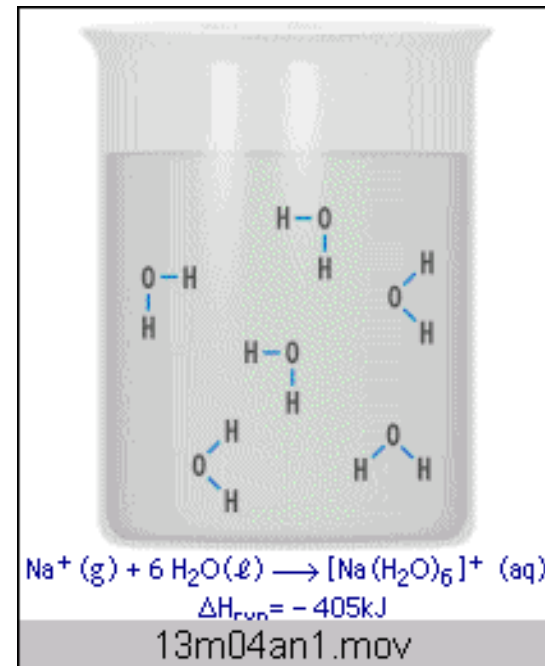
A água é altamente polar e pode interagir com íons positivos dando lugar a íons **hidratados**.



Atração entre Íons e Dipolos Permanentes

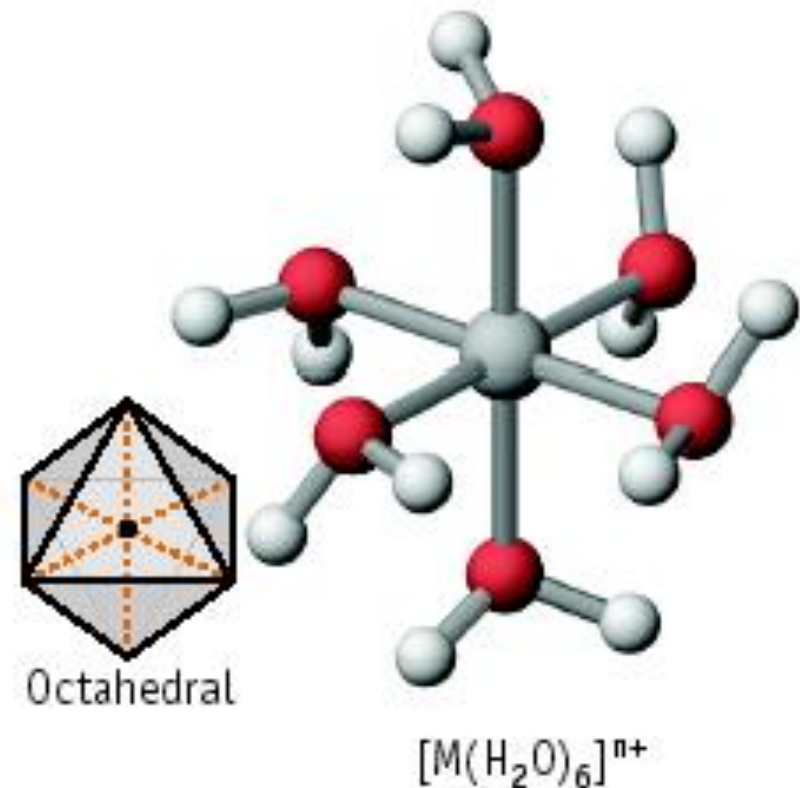
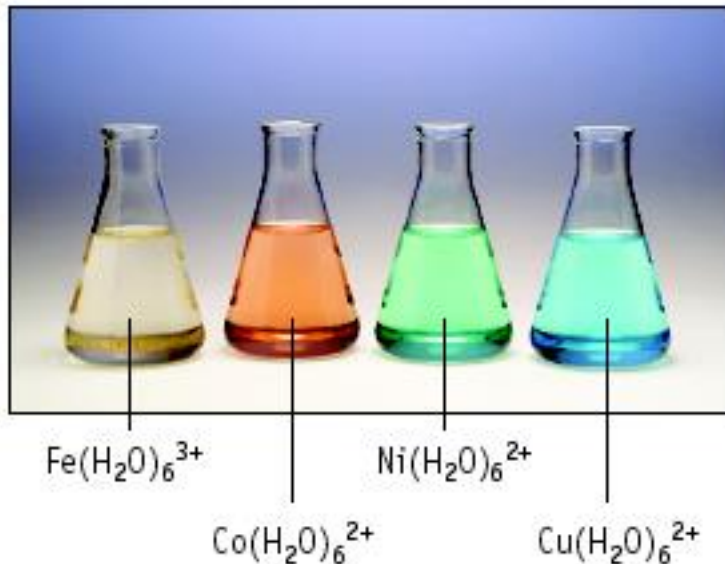
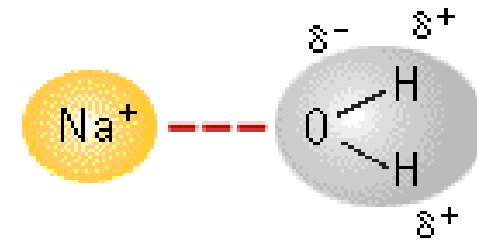


A água é altamente polar e pode interagir com íons positivos dando lugar a íons **hidratados**.

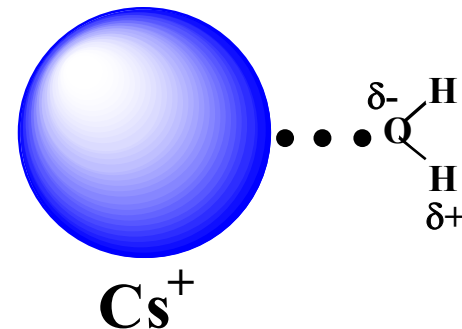
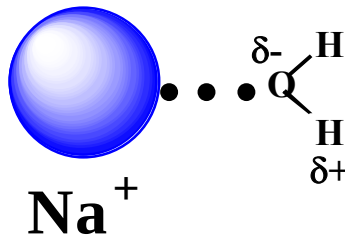
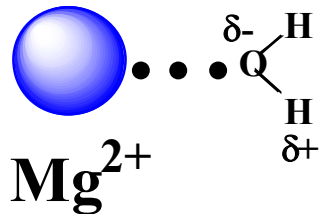
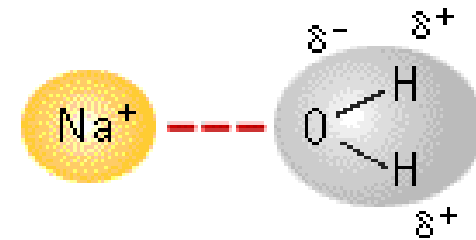


Atração entre Íons e Dipolos Permanentes

- Muitos íons metálicos são hidratados. Essa é a razão porque se dissolvem em água.



Atração entre Íons e Dipolos Permanentes



–1922 kJ/mol – 405 kJ/mol – 263 kJ/mol

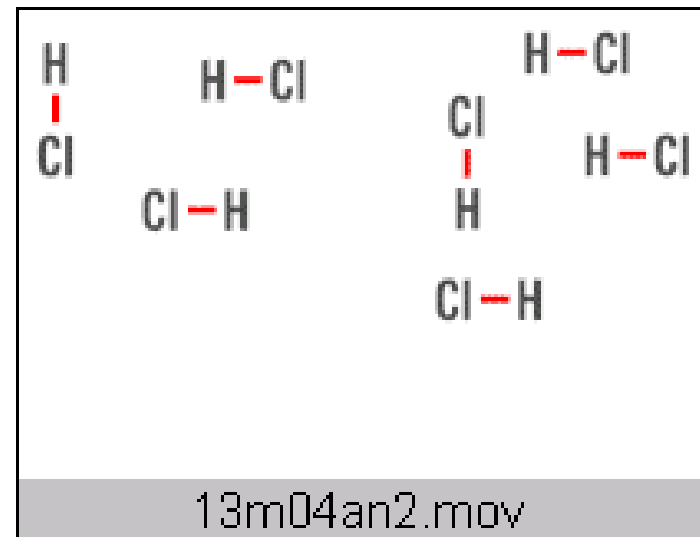
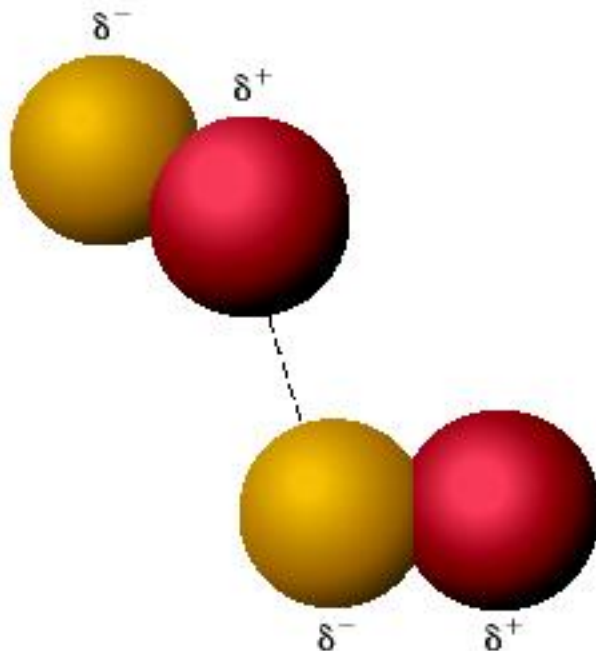
A atração entre íons e dipolo depende da **carga do íon e da distância íon-dipolo**.

É medida pelo ΔH para $\text{M}^{n+} + x \text{H}_2\text{O} \rightarrow [\text{M}(\text{H}_2\text{O})_x]^{n+}$



Forças Dipolo-Dipolo

Tais forças atraem entre si moléculas tendo dipolos permanentes.





Forças Dipolo-Dipolo

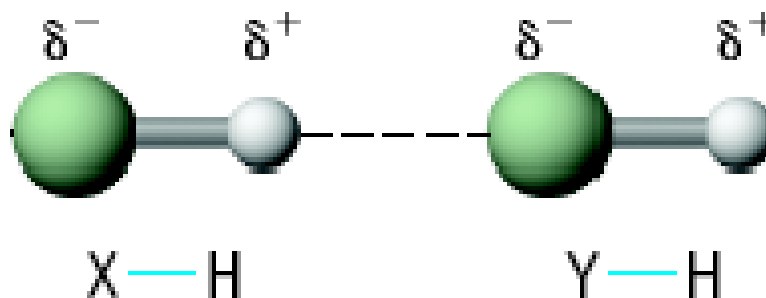
A influência das forças dipolo-dipolo pode ser vista nos pontos de ebulição de moléculas simples.

<u>Composto</u>	<u>Peso Mol.</u>	<u>Ponto de Ebulição</u>
N₂	28	-196 °C
CO	28	-192 °C
Br₂	160	59 °C
ICI	162	97 °C

Ligação (Ponte) de Hidrogênio

11

Uma forma especial de atração dipolo-dipolo, que intensifica essa atração.

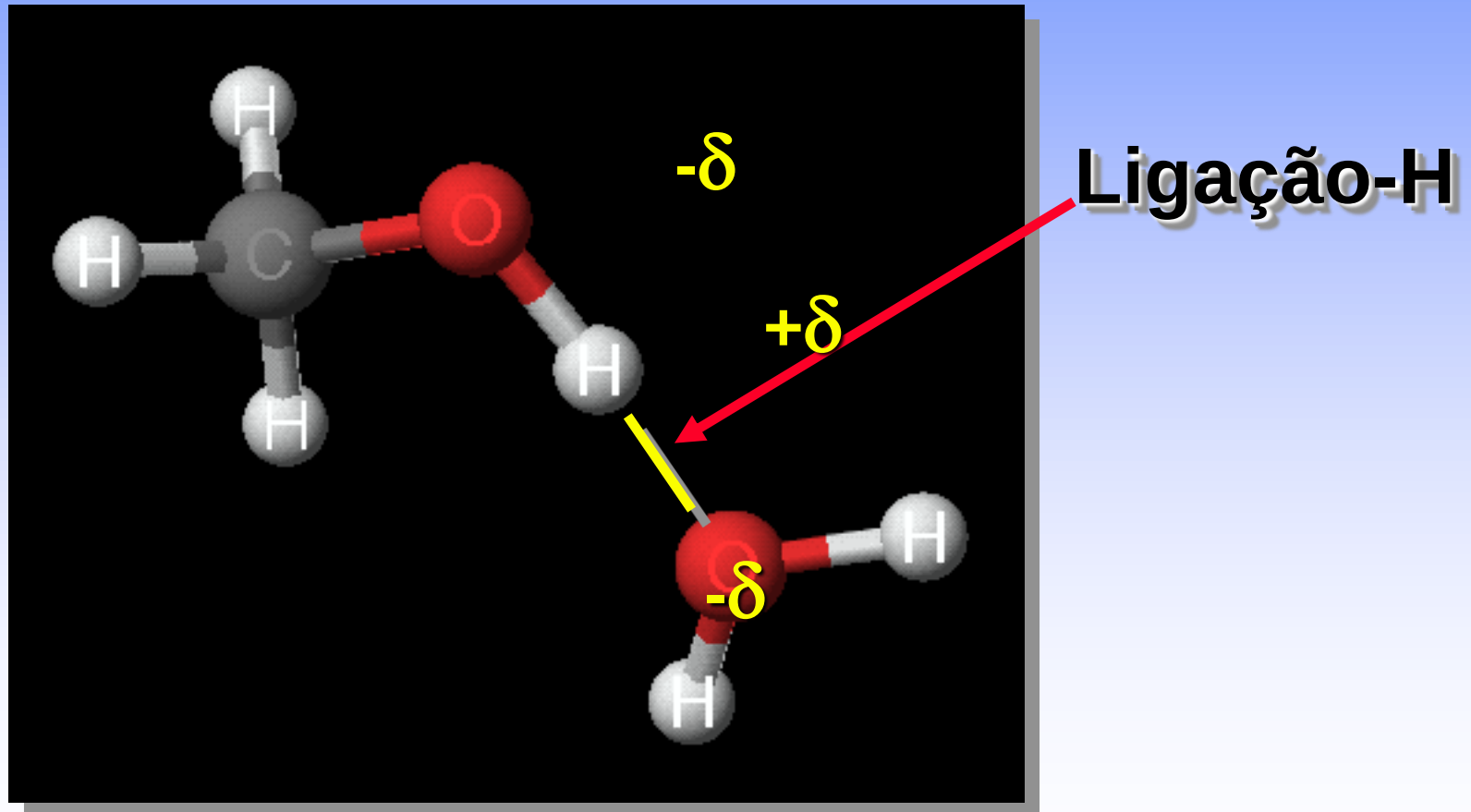


A ligação-H é mais forte quando X e Y são N, O ou F

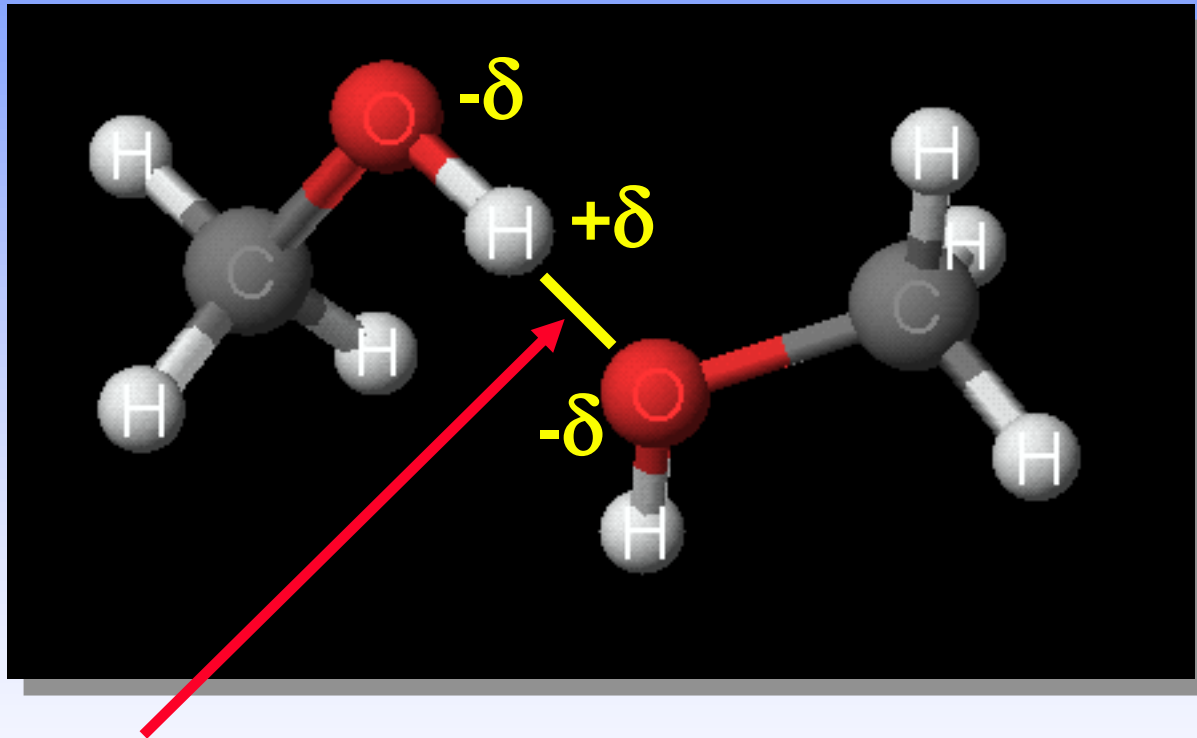
Types of Hydrogen Bonds [X—H $\cdots$:Y]

N—H $\cdots$:N—	O—H $\cdots$:N—	F—H $\cdots$:N—
N—H $\cdots$:O—	O—H $\cdots$:O—	F—H $\cdots$:O—
N—H $\cdots$:F—	O—H $\cdots$:F—	F—H $\cdots$:F—

Ligação-H entre Metanol e Água

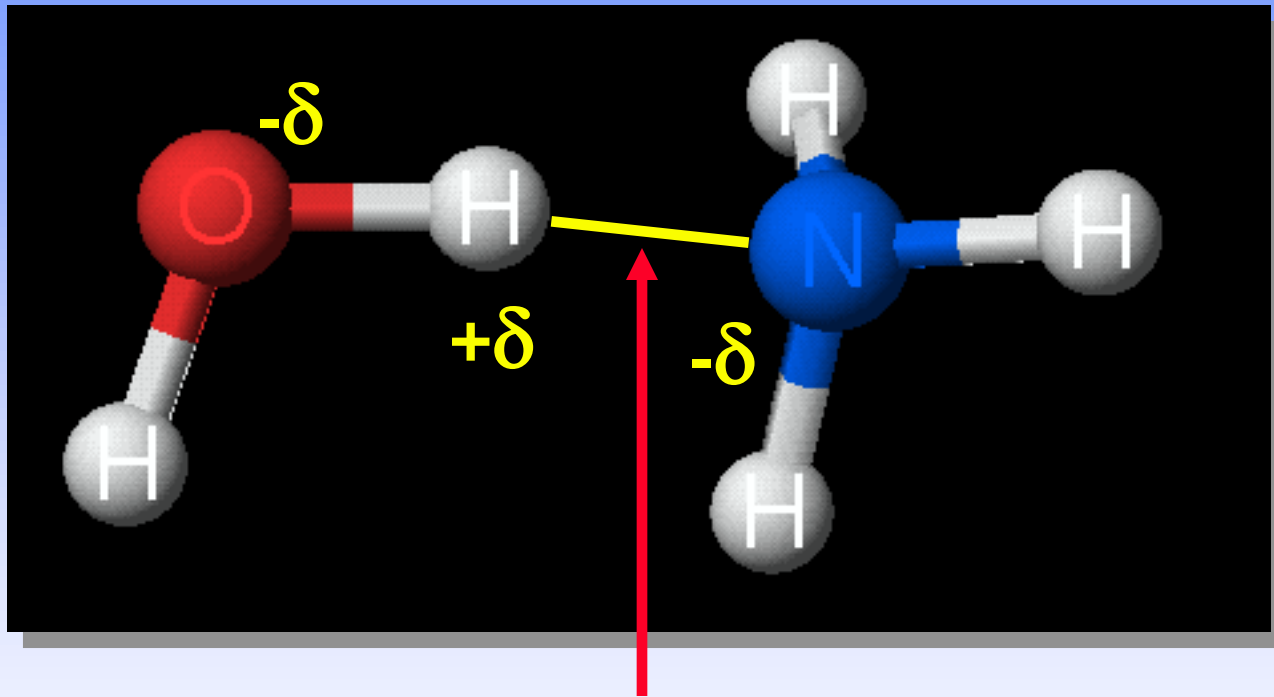


Ligação-H entre Duas Moléculas de Etanol



Ligação-H

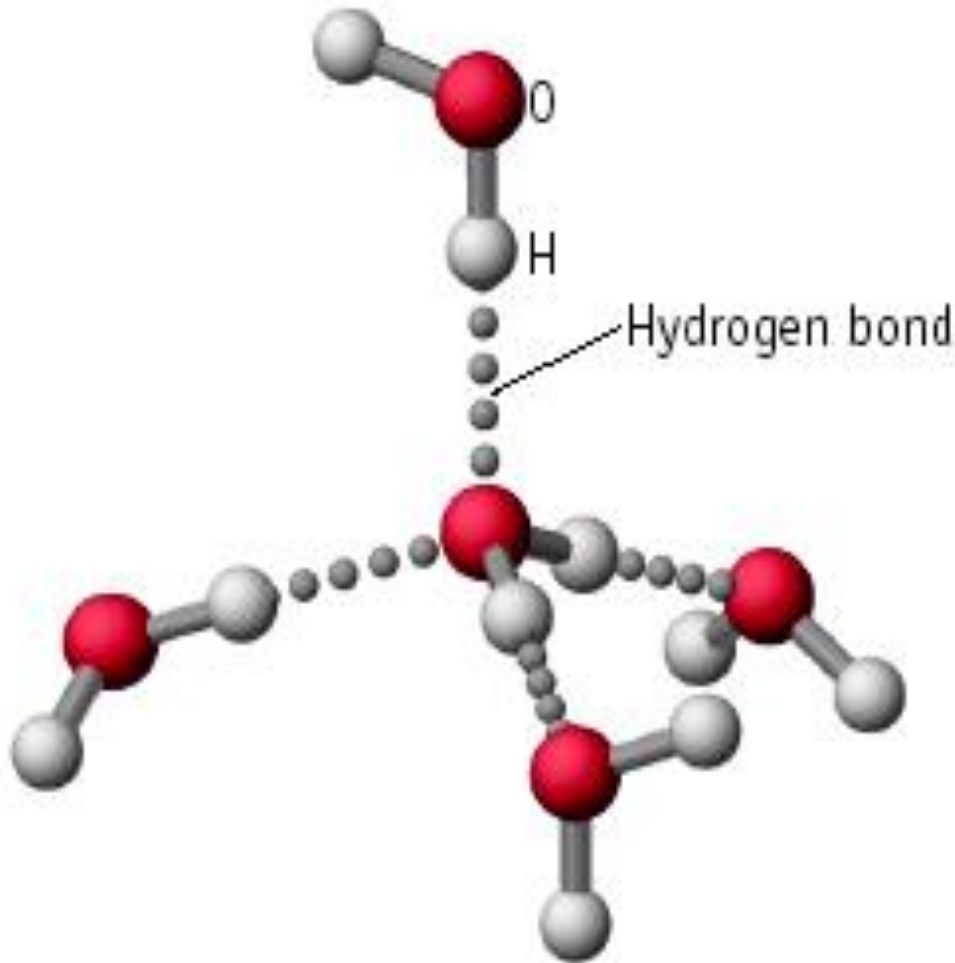
Ligação-H entre Amônia e Água



Ligação-H

Esta ligação leva à formação de íons NH_4^+ e OH^-

Ligação-H na H_2O

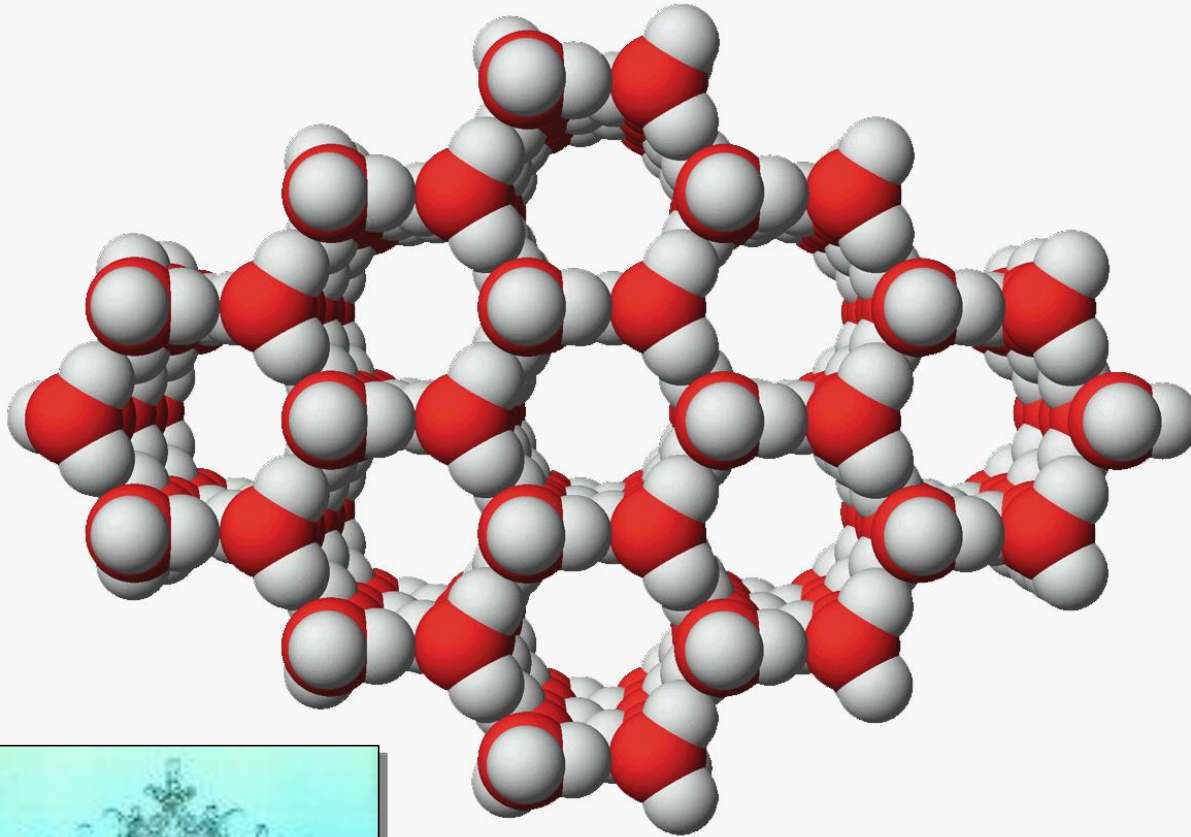


É especialmente forte na água. Por que?

- **A ligação O—H é muito polar;**
- **Há 2 pares isolados no átomo de O**

Responsável pelas propriedades únicas da água.

Ligação de Hidrogênio na H_2O



Gelo tem uma estrutura cristalina do tipo aberta.

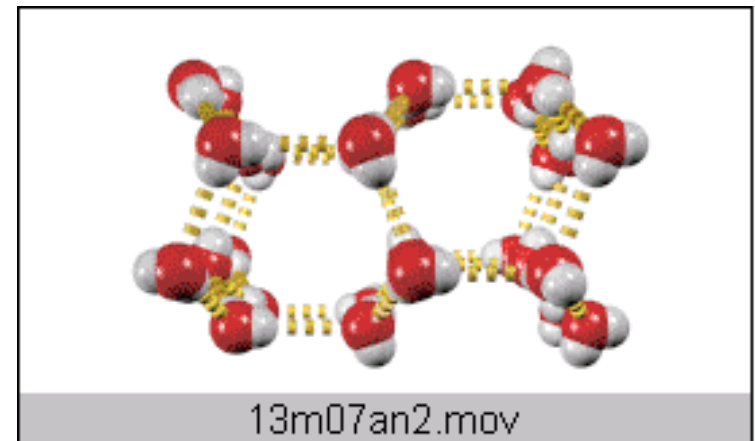
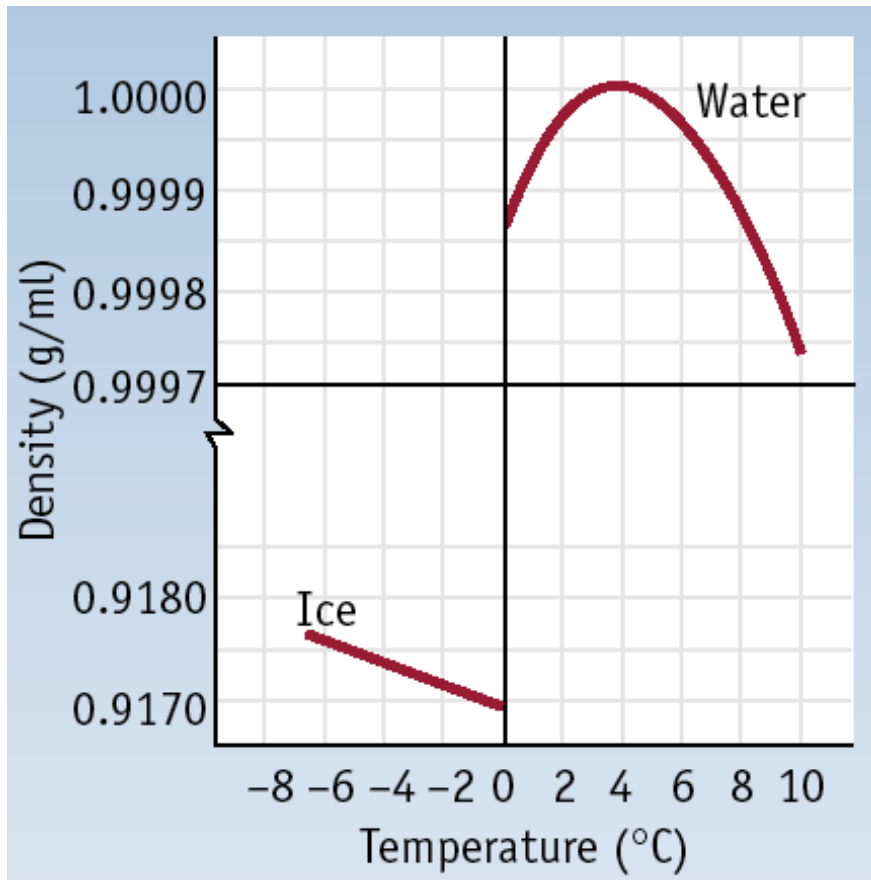
Densidade do gelo é $<$ que a do líquido.



Portanto, o gelo flutua na água.

Ligação Hidrogênio na H_2O

O gelo tem uma estrutura cristalina do tipo aberta.
Densid. gelo < que a do líquido: gelo flutua na água.



Ligação Hidrogênio na H_2O

Capacidade calorífica excepcionalmente alta: $4,184 \text{ g / K mol}$

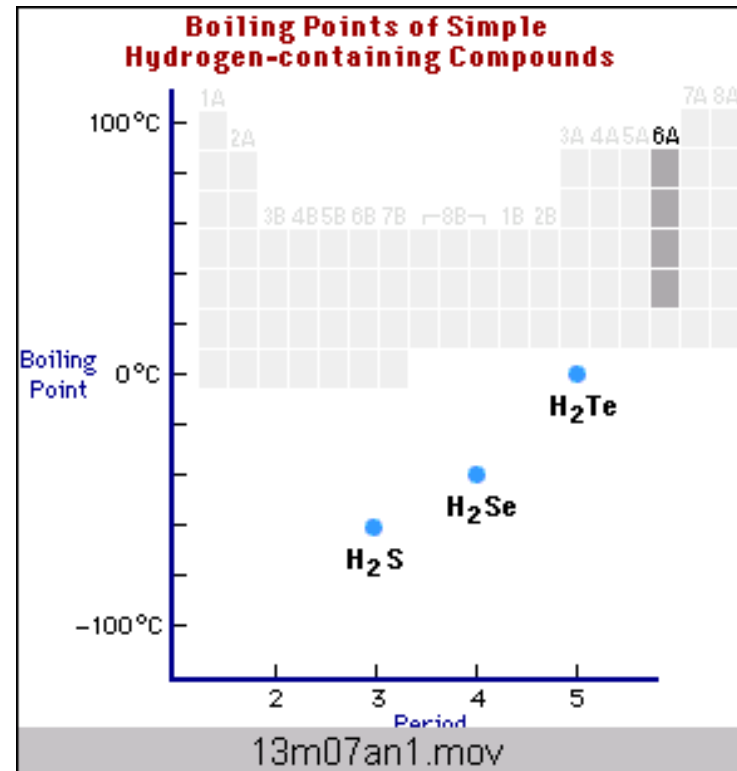
Usada para apagar incêndios;

Papel de lagos e oceanos no controle do clima;

Liberação de grandes quantidades de energia nas trovoadas

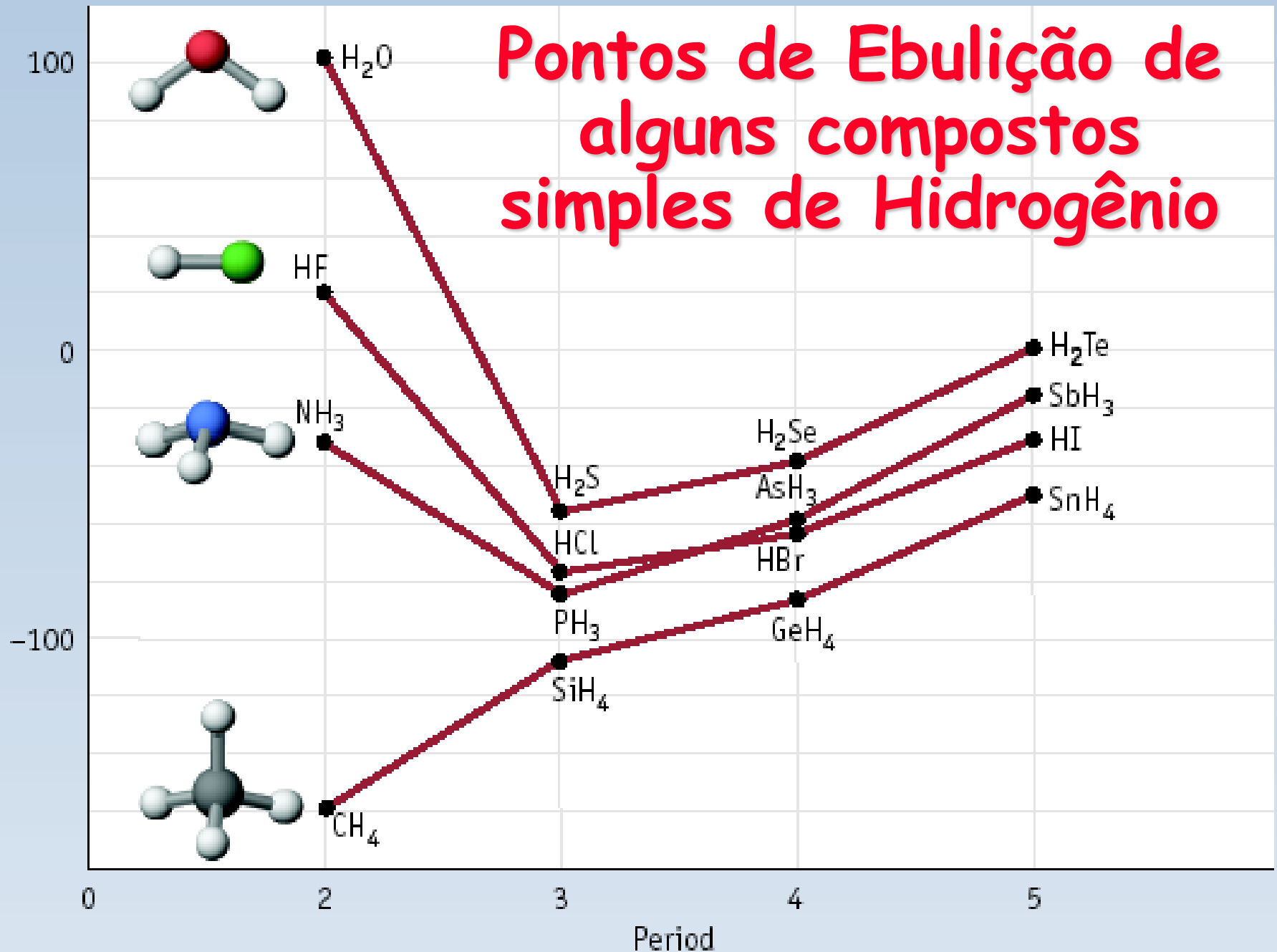


Ligação-H faz com que a água tenha um ponto de ebulição excepcionalmente alto.



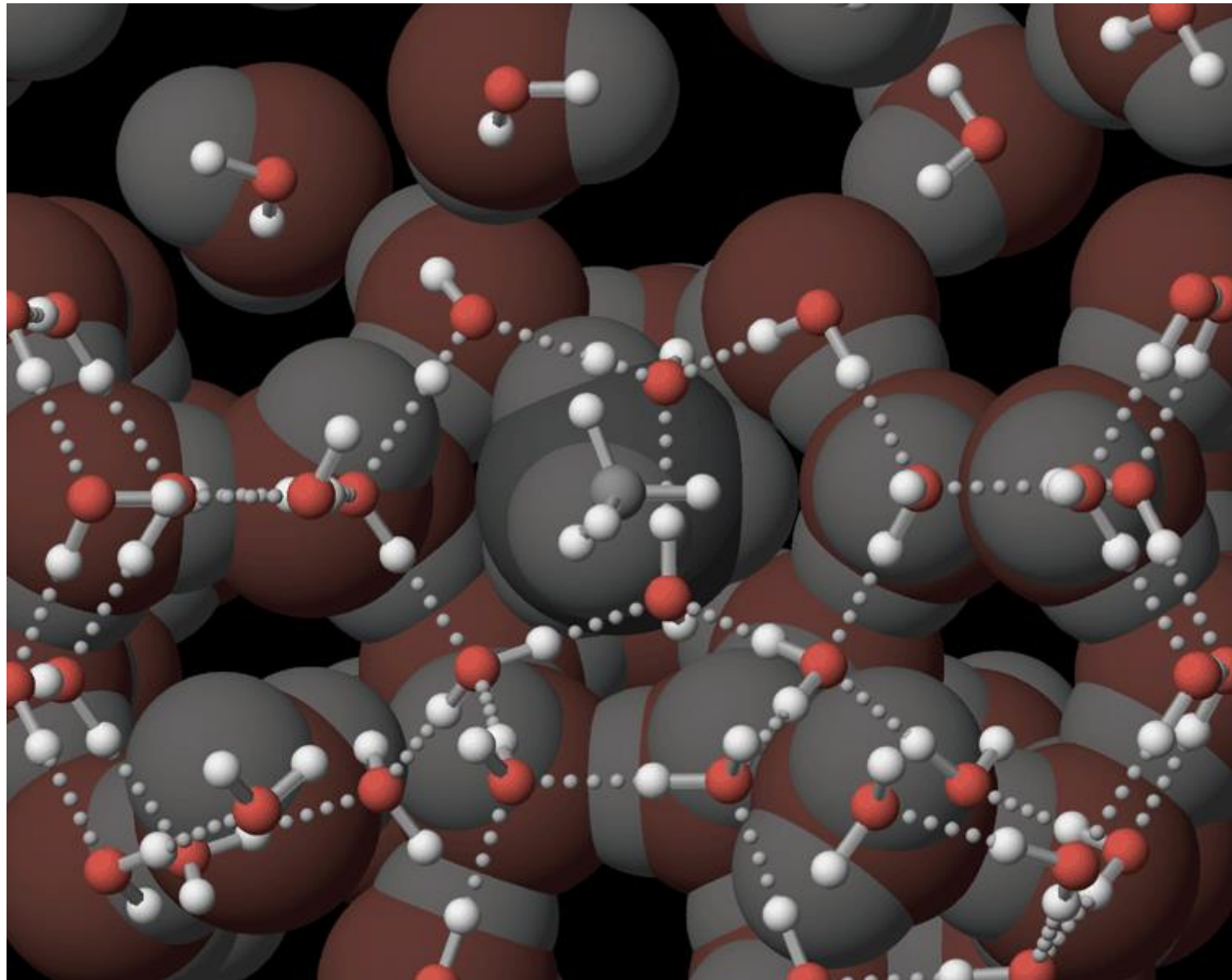
Pontos de Ebulição de alguns compostos simples de Hidrogênio

Temperature (°C)



Clatrato de Metano

21



Ligação de Hidrogênio na Biologia

A ligação-H é especialmente forte em sistemas biológicos — como o DNA.

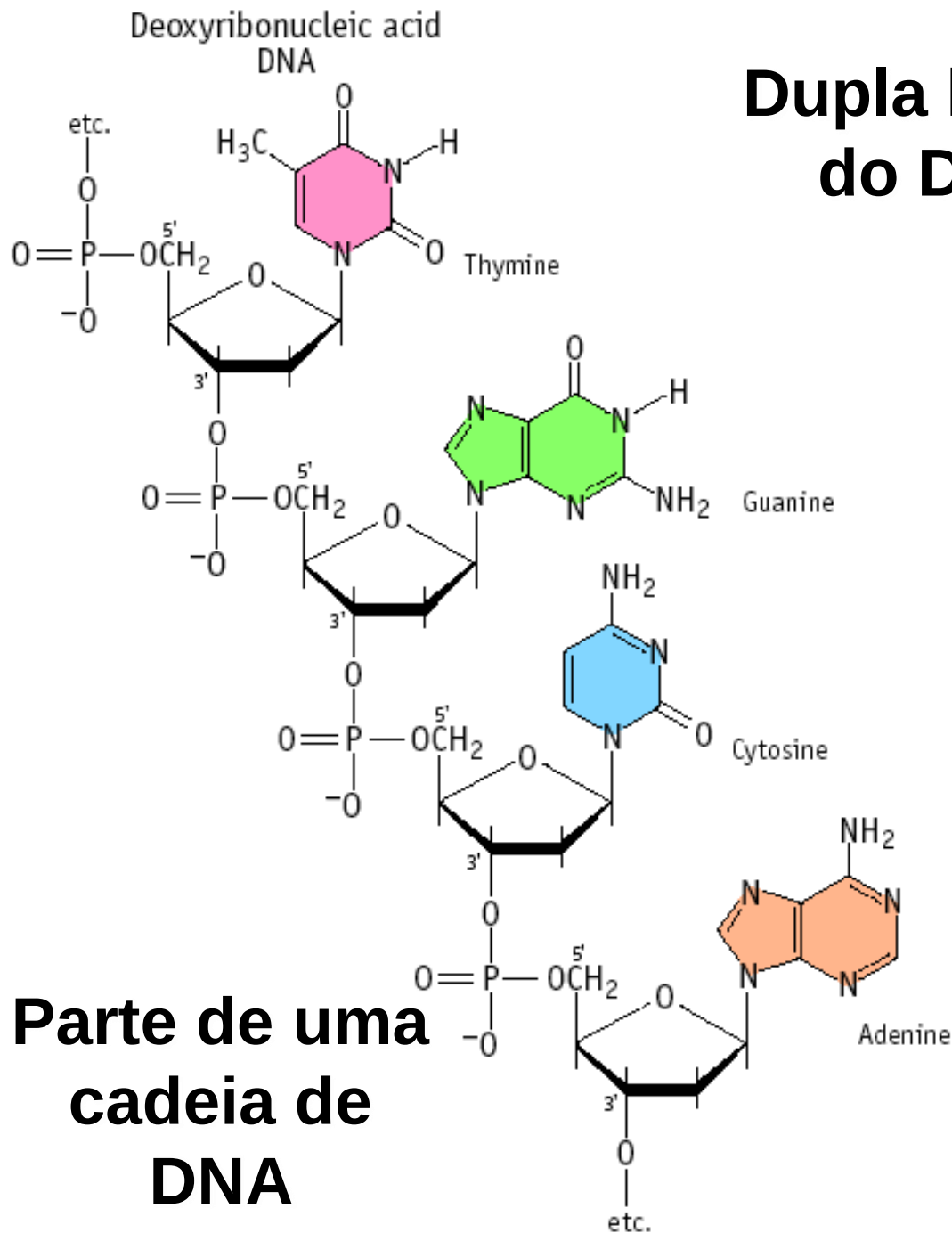
DNA — cadeias em hélice de grupos fosfatos e moléculas de açúcares. Cadeias são helicoidais por causa da geometria na forma de tetraedros associados aos átomos de P, C e O.

As cadeias se ligam umas às outras por ligações de hidrogênios específicas entre pares de bases de Lewis.

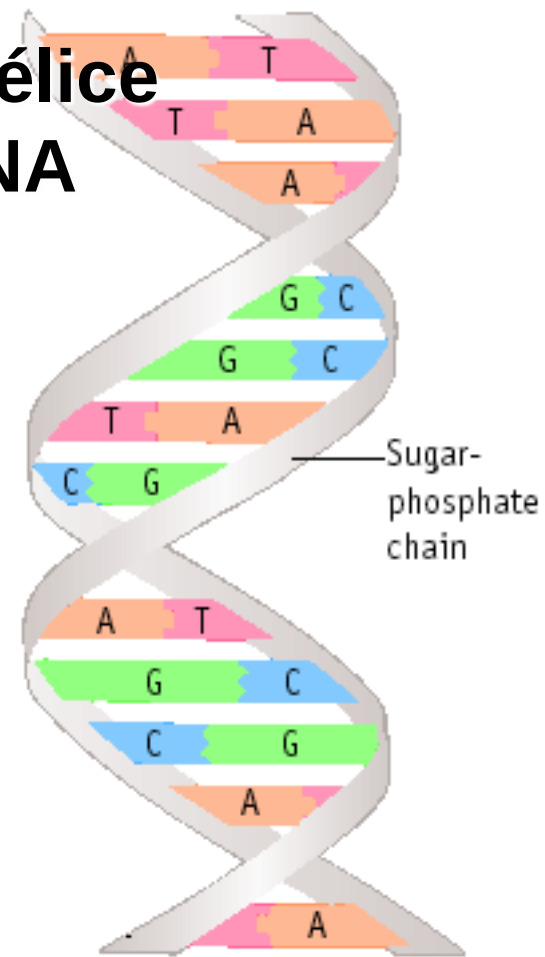
—adenina com timina

—guanina com citosina

Dupla hélice do DNA



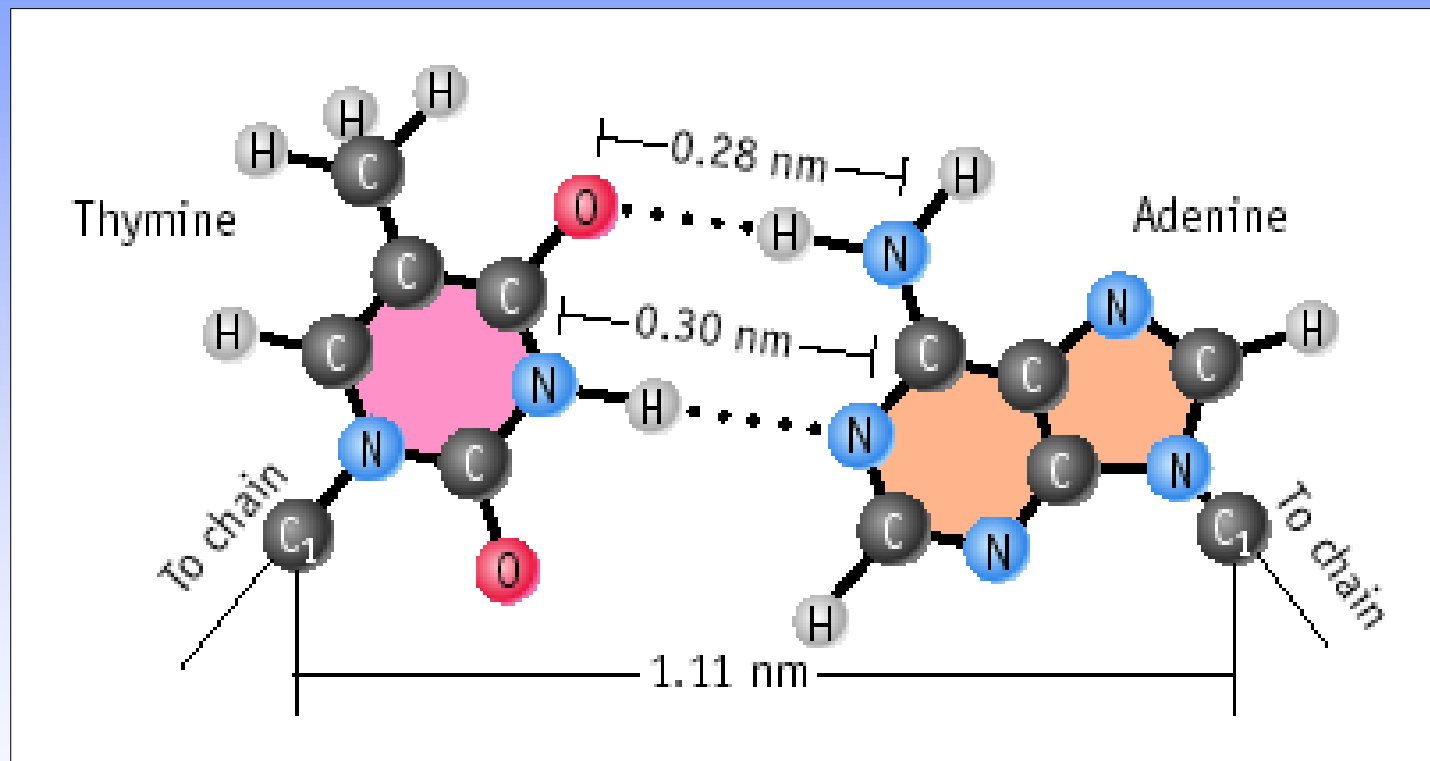
Parte de uma
cadeia de
DNA

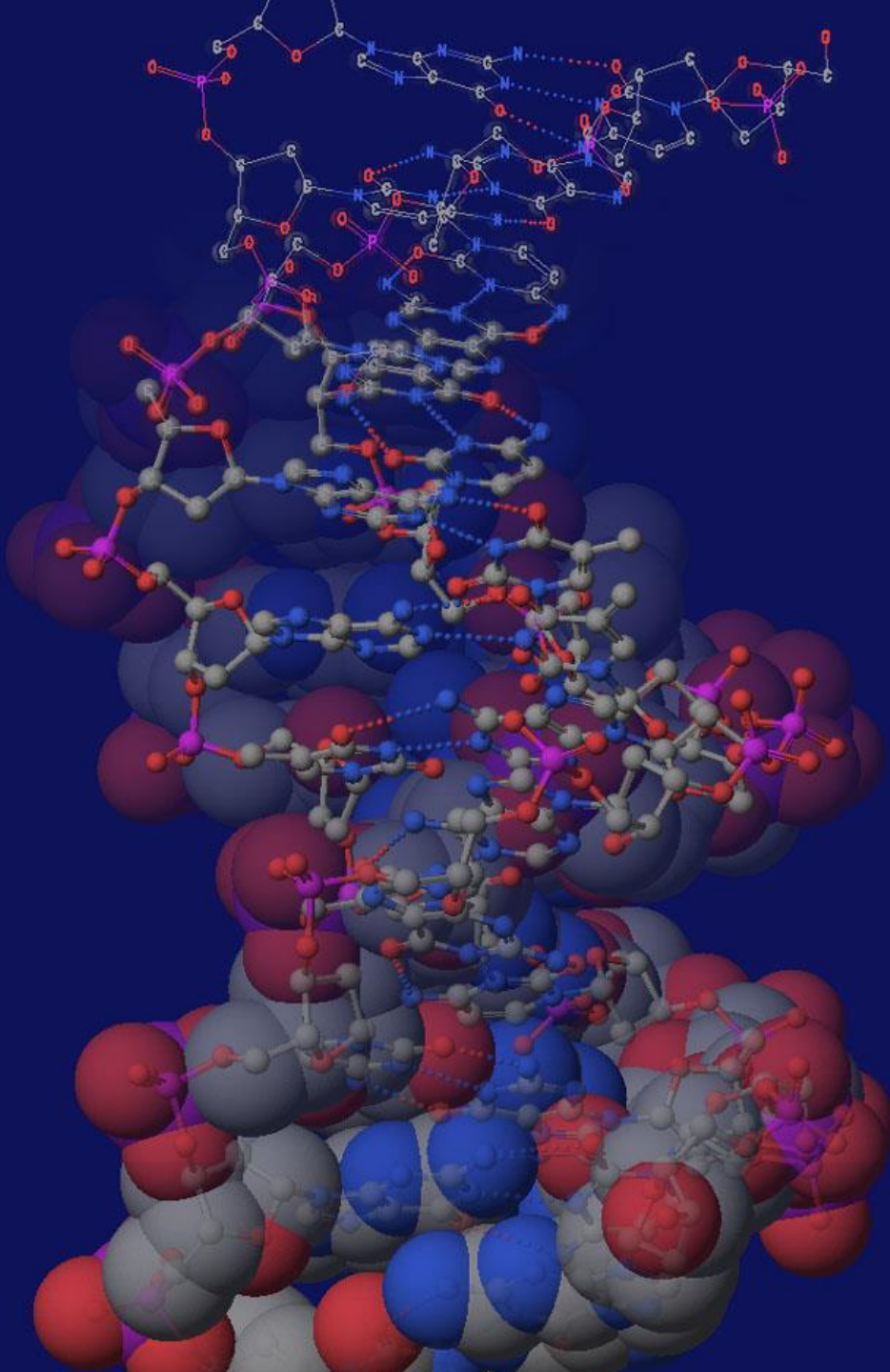


Pairing between bases on two chains leads to the *double helix* of DNA.

In humans, there are about 3 billion base pairs in all of our DNA.

Formação de Pares de Bases através de Ligações-H

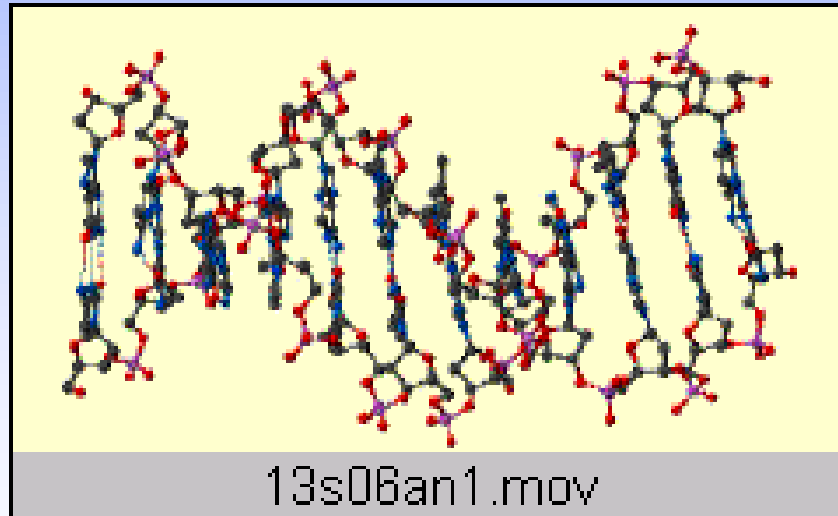




Hélice Dupla do DNA

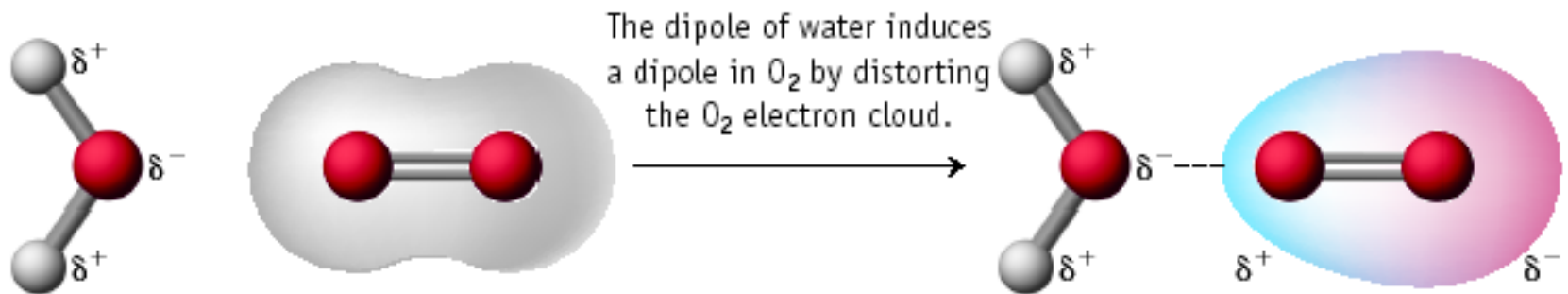
Ligação de Hidrogênio na Biologia

Ligação de hidrogênio e emparelhamento de bases no DNA.

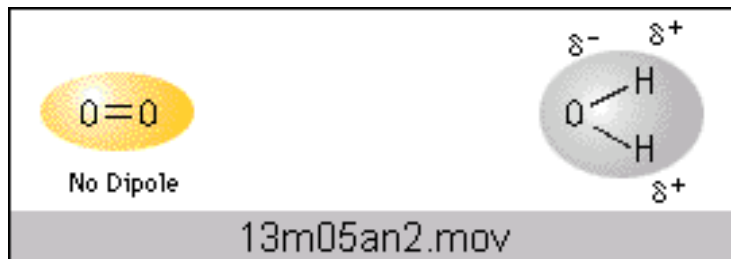


FORÇAS ENVOLVENDO DIPOLos INDUZIDOS

Como pode uma molécula não-polar como o O_2 e o I_2 se dissolverem na água?



O dipolo da água **INDUZ** um dipolo na “nuvem” eletrônica do O_2 .



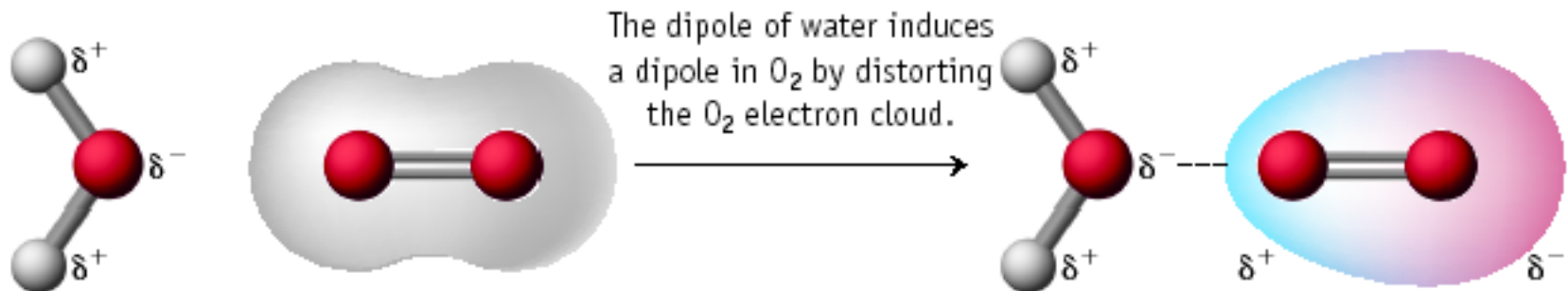
**Dipolo-dipolo
induzido**

FORÇAS ENVOLVENDO DIPOLOS INDUZIDOS

A solubilidade aumenta com a massa do gás.

Table 13.2 • The Solubility of Some Gases in Water*

Gas	Molar Mass (g/mol)	Solubility at 20 °C (g gas/100 g water)†
H ₂	2.01	0.000160
N ₂	28.0	0.000190
O ₂	32.0	0.000434



FORÇAS ENVOLVENDO DIPOLOS INDUZIDOS

- Considere o I_2 se dissolvendo em álcool, CH_3CH_2OH .

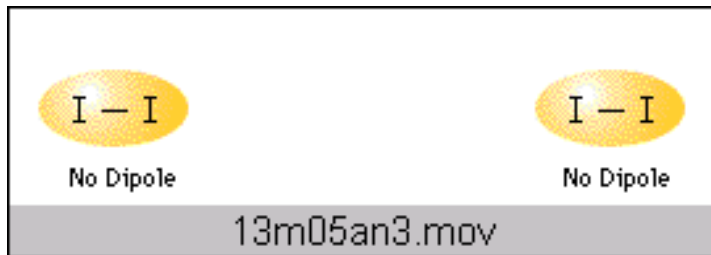


I_2
dissolves
in
ethanol

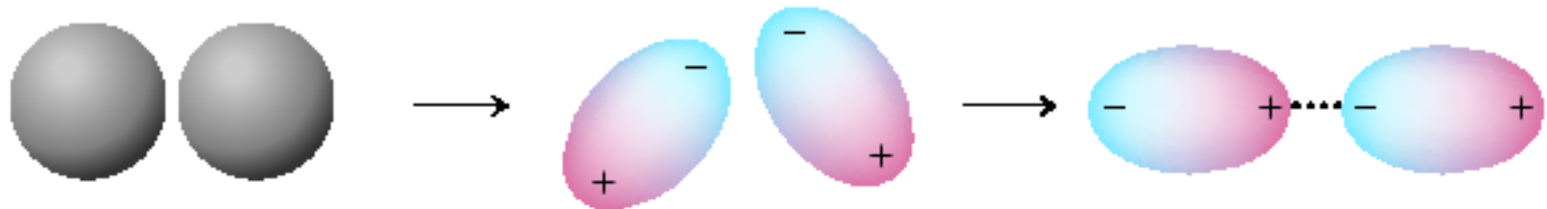


FORÇAS ENVOLVENDO DIPOLOS INDUZIDOS

Formação de um dipolo em duas moléculas de I_2 não-polares.



dipolo-induzido
dipole-induced



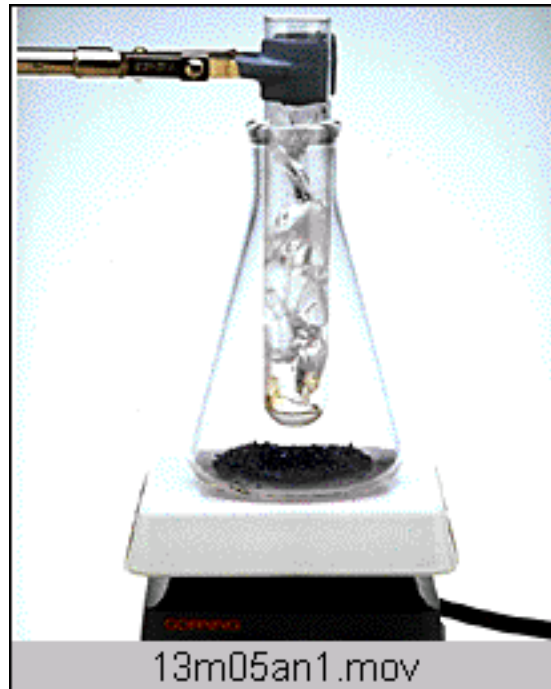
Two nonpolar atoms or molecules
(Time-averaged shape is spherical)

Momentary attractions and
repulsions between nuclei and
electrons in neighboring
molecules lead to induced dipoles.

Correlation of the electron
motions between the two
atoms or molecules (which are
now dipolar) leads to a lower
energy and stabilizes the system.

FORÇAS ENVOLVENDO DIPOLos INDUZIDOS

As forças induzidas entre duas moléculas de I_2 são muito fracas, portanto o sólido I_2 sublima (passa do estado sólido para a forma de vapor).



FORÇAS ENVOLVENDO DIPOLOS INDUZIDOS

A magnitude do dipolo induzido depende da tendência à distorção do sistema.

Pesos Molec. Mais Altos → Dipolos induzidos maiores.

<u>Molécula</u>	<u>Ponto de Ebulição(°C)</u>
-----------------	------------------------------

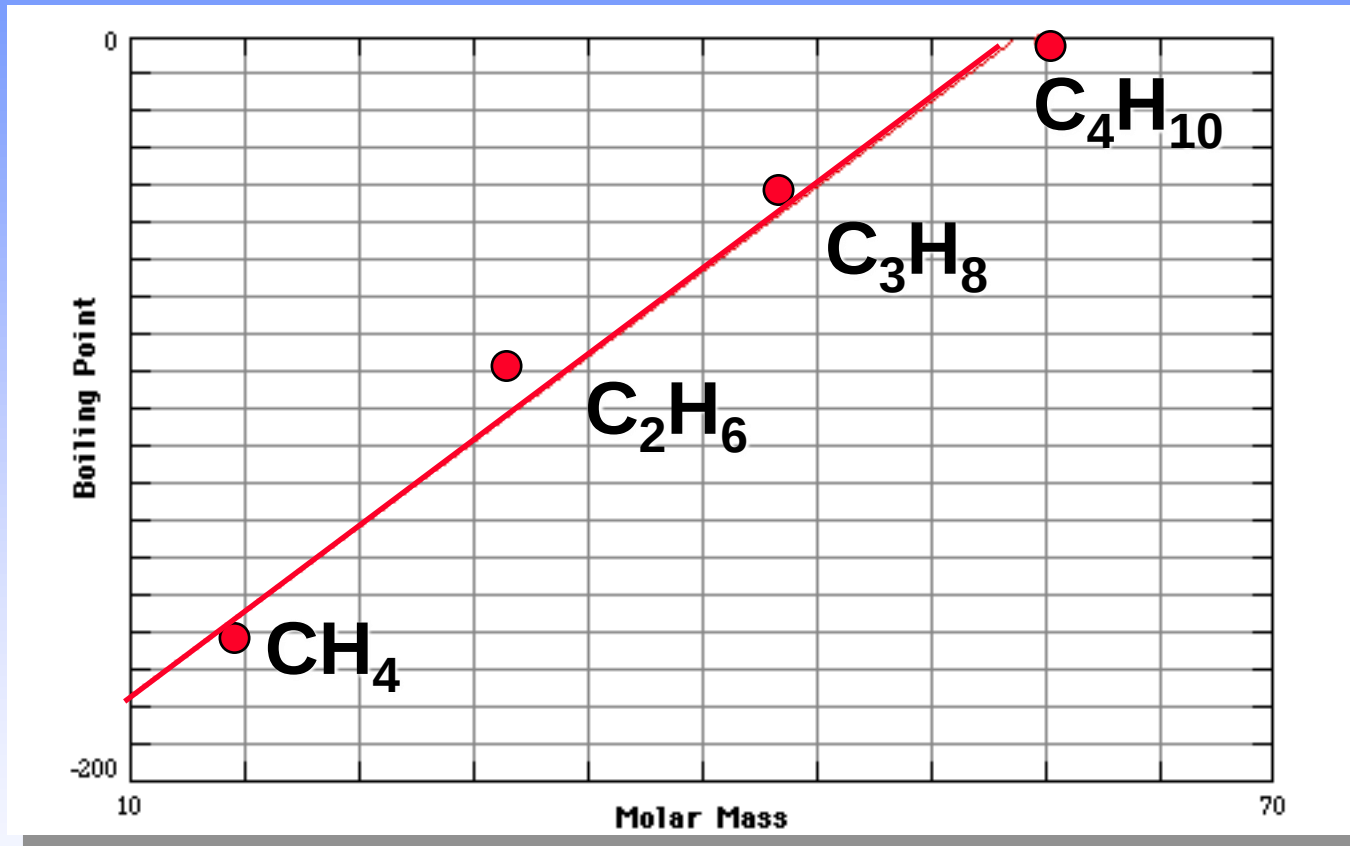
CH ₄ (metano)	–161,5
--------------------------	--------

C ₂ H ₆ (etano)	–88,6
---------------------------------------	-------

C ₃ H ₈ (propano)	–42,1
---	-------

C ₄ H ₁₀ (butano)	–0,5
---	------

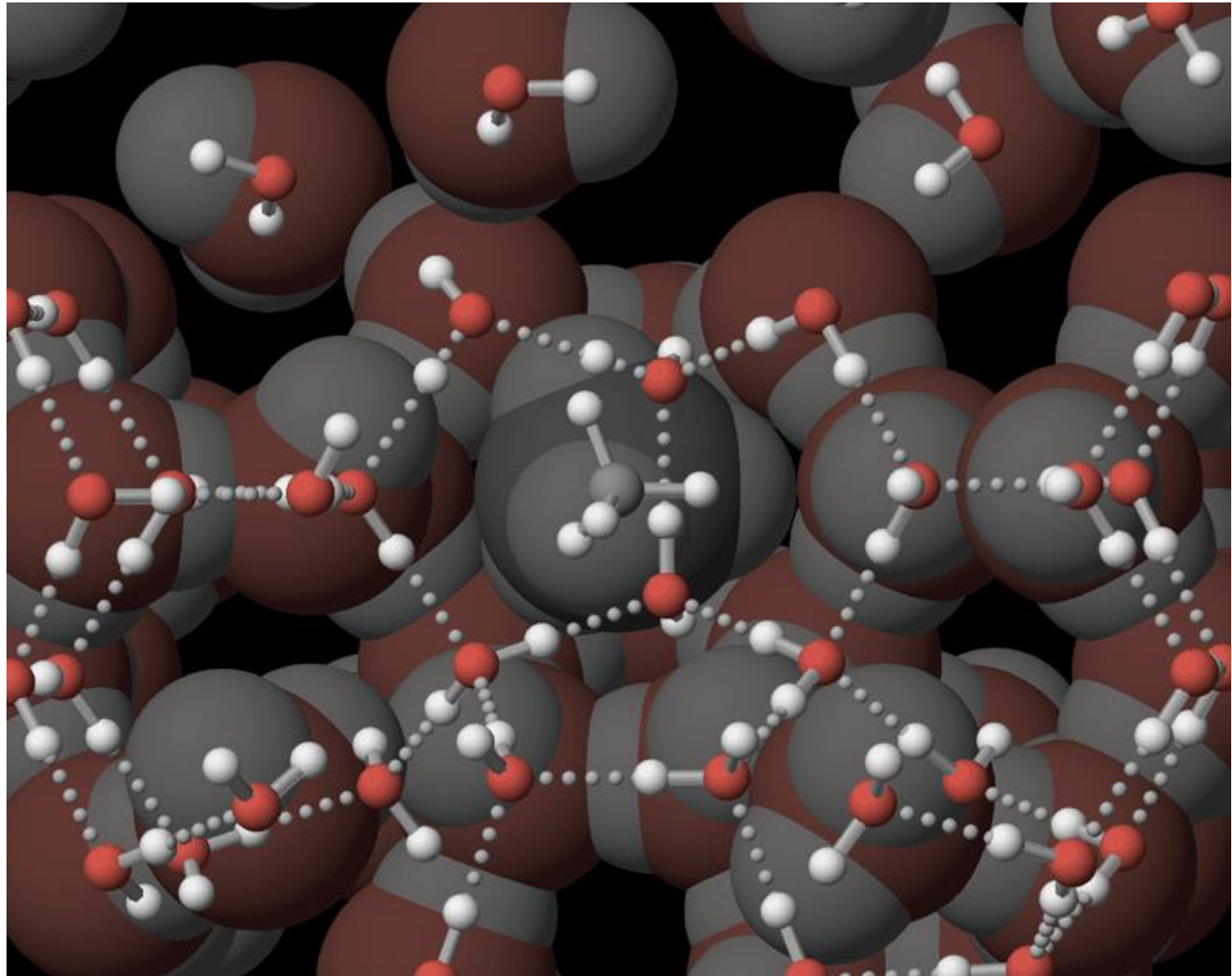
Pontos de Ebulição de Hidrocarbonetos



Note a relação linear entre PE e massa molar.

Clatrato de Metano

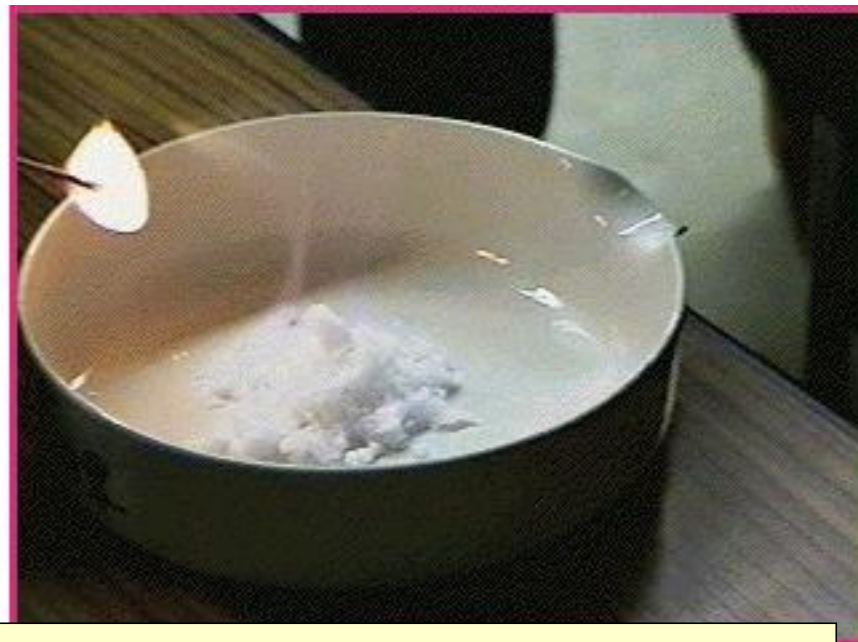
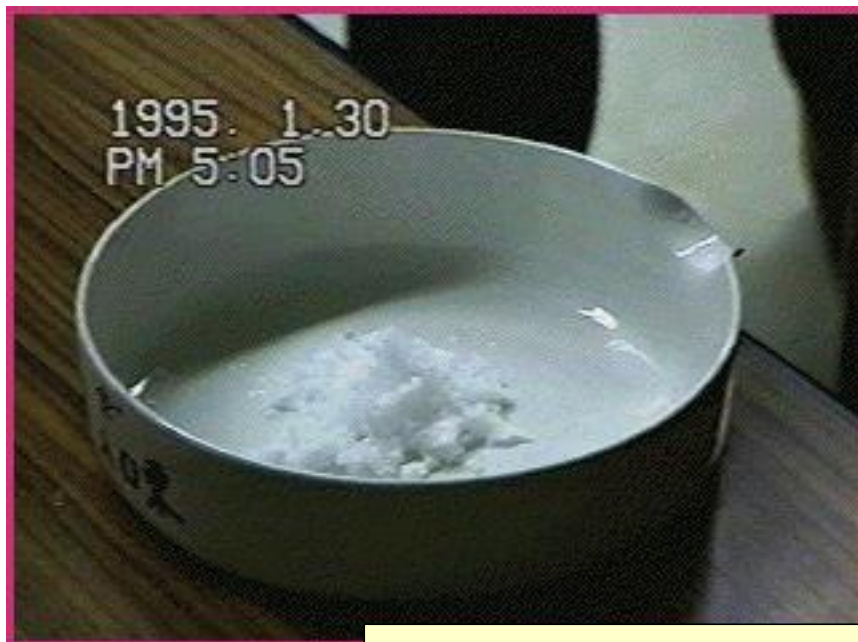
34



Resumo das Forças Intermoleculares

Table 13.3 • Summary of Intermolecular Forces

Type of Interaction	Factors Responsible for Interaction	Example
Dipole–dipole	Dipole moment (depends on atom electronegativities and molecular structure)	H ₂ O, HCl
Hydrogen bonding, X—H ⋯ :Y	Very polar X—H bond (where X = F, N, O) and atom Y with lone pair of electrons An extreme form of dipole–dipole interaction	H ₂ O ⋯ H ₂ O
Dipole/induced dipole	Dipole moment of polar molecule and polarizability of nonpolar molecule	H ₂ O ⋯ I ₂
Induced dipole/induced dipole (London dispersion forces)	Polarizability	I ₂ ⋯ I ₂



<http://www.gsj.go.jp/dMG/hydrate/MH.burn.gif>

