

Disciplina

Química Medicinal

Prof. Dr. Andrei Leitão

Interações intermoleculares

Ligação química

✓ Ligação iônica

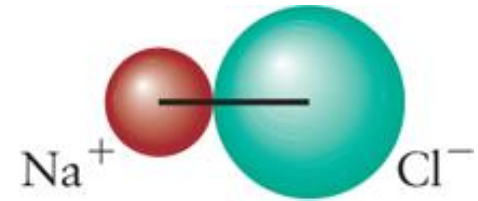
✓ Energia média*: 250 kJ mol⁻¹

$$E_p = q_1 q_2 / 4\pi\epsilon_0 r$$

q_1 e q_2 = cargas dos íons 1 e 2

r = distância entre os centros dos íons 1 e 2

ϵ_0 = Permissividade no vácuo = 8,854 10⁻¹² C² N⁻¹ m⁻²



✓ Ligação covalente

✓ Energia aproximada*: 100-400 kJ mol⁻¹

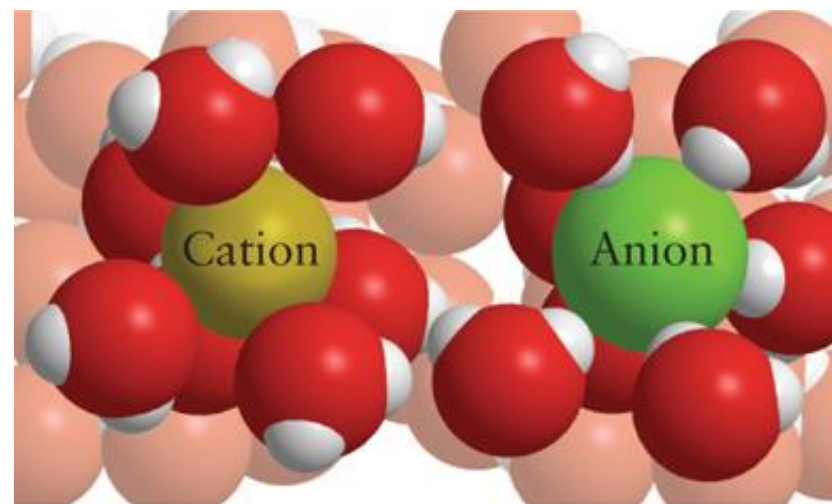
*Energia necessária para dissociar a ligação ou interação

Íon-dipolo

✓ Energia média: 15 kJ mol^{-1}

Exemplo: hidratação de íons

Sulfato de cálcio diidratado
 $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (gesso *in natura*)



$$E_p \propto -|q|\mu/r^2$$

q = número de carga do íon

μ = dipolo da molécula

r = distância entre o centro do íon e o dipolo

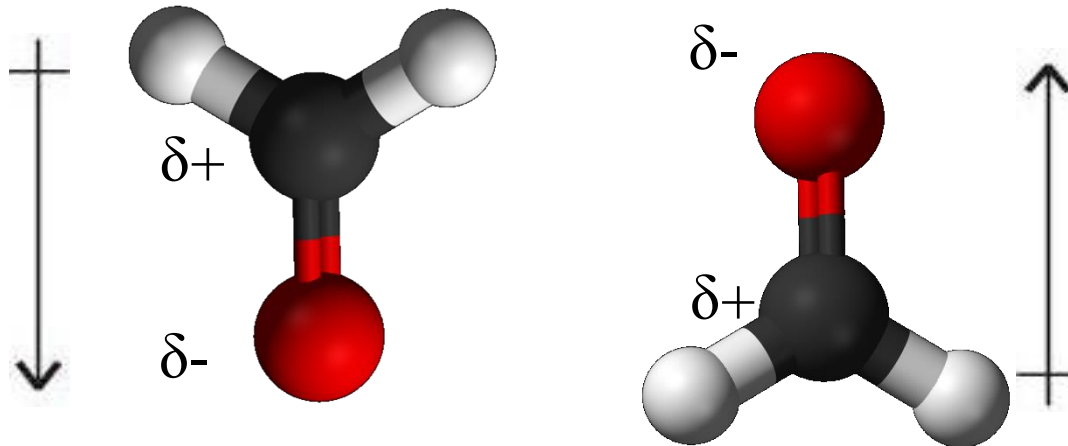
Íon-dipolo

✓ Raio iônico e carga

Composto	BaCl ₂	KCl	La(NO ₃) ₃	La ₂ (SO ₄) ₃
Raio do cátion (pm)	136	138	122	122
Carga do cátion	Ba ²⁺	K ⁺	La ³⁺	La ³⁺
Hidratação	2H ₂ O	anidro	6H ₂ O	9H ₂ O

Dipolo-dipolo

- ✓ Energia média: 2 kJ mol⁻¹ moléculas estacionárias (s)
0,3 kJ mol⁻¹ moléculas que rotacionam (l, g)

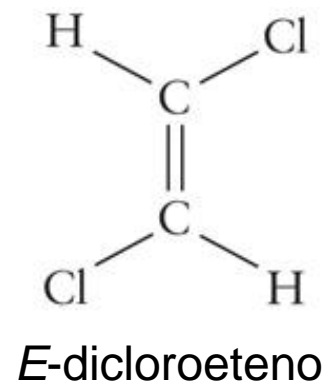
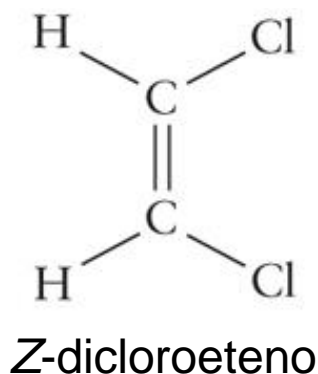


Dipolo-dipolo

$$E_p \propto -\mu_1\mu_2/r^3$$

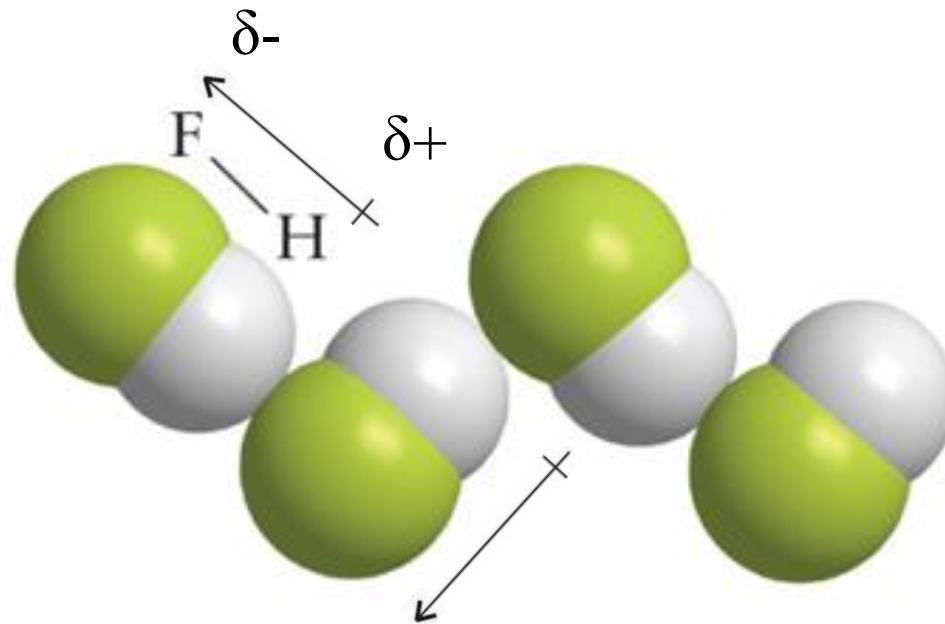
μ_1 e μ_2 = dipolos das moléculas 1 e 2 (em um sólido)
 r = distância entre os dipolos

- ✓ Exemplo: diferentes pontos de ebulição para compostos orgânicos
- ✓ Geometria da molécula



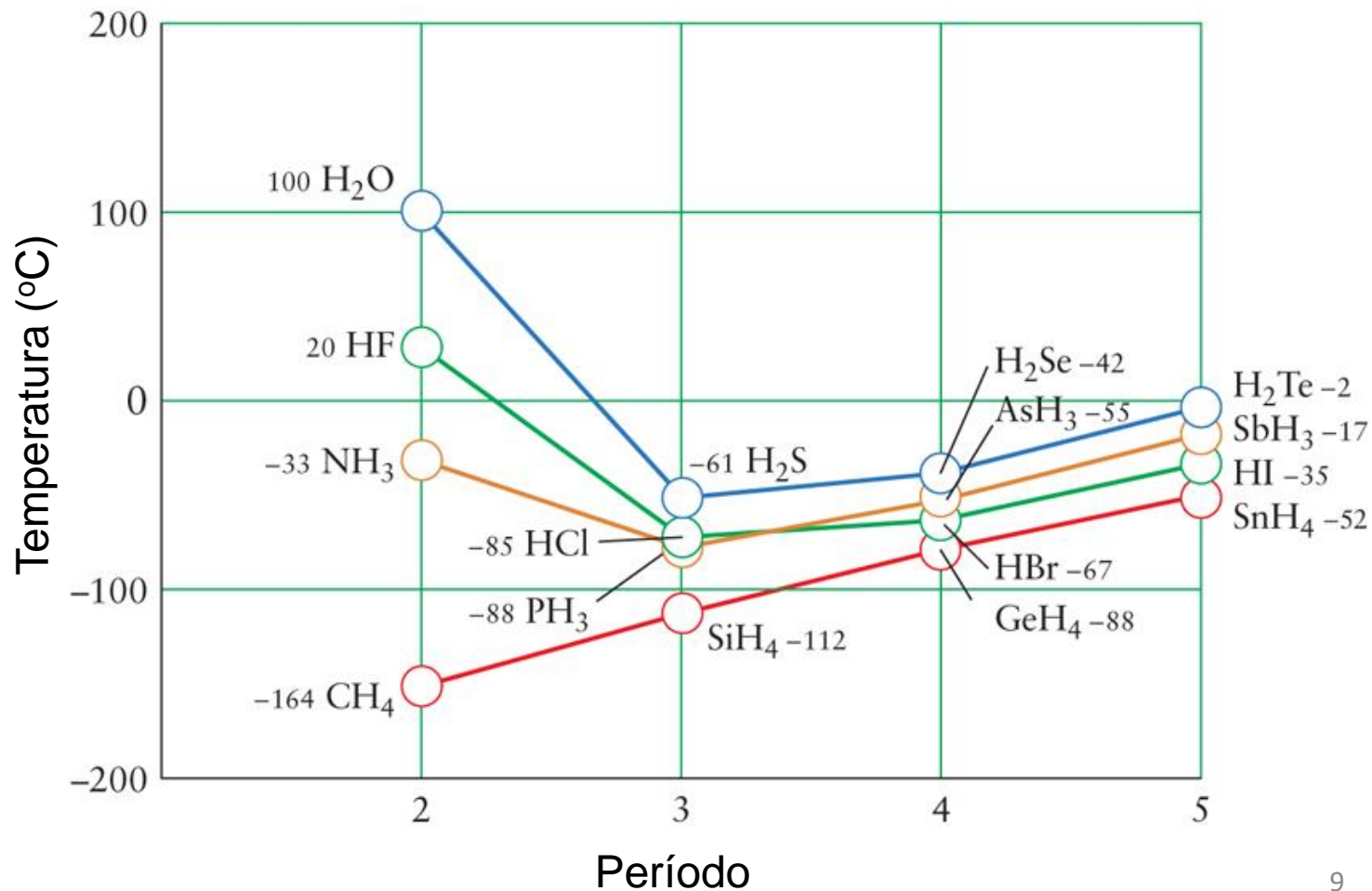
Ligação de hidrogênio

- ✓ Energia média de 20 kJ mol^{-1}
- ✓ Geometria da ligação



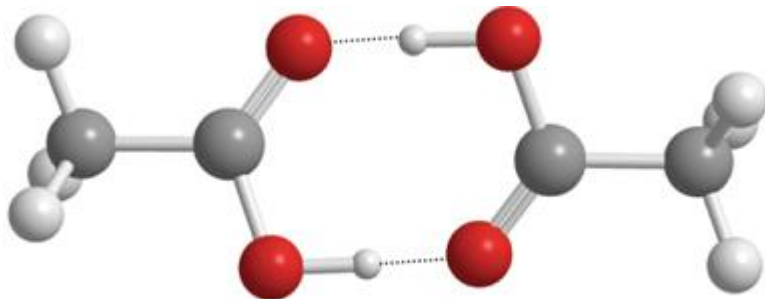
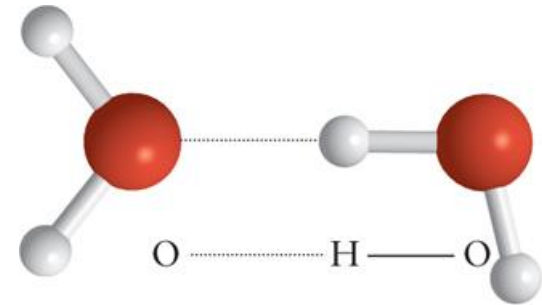
Ligação de hidrogênio

✓ Ponto de ebulição

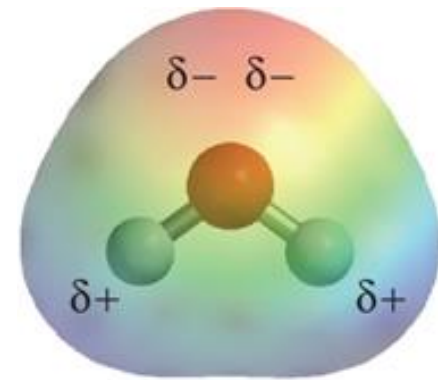


Ligação de hidrogênio

- ✓ Energia média de 20 kJ mol^{-1}
- ✓ Geometria da ligação



H_3CCOOH



H_2O

Dipolo-dipolo induzido

✓ Energia média: 2 kJ mol⁻¹

$$E_p \propto -\mu_1^2 \alpha_2 / r^6$$

μ_1 = dipolo da molécula 1

α_2 = dipolo induzido da molécula 2

r = distância

Exemplo: metanol e metano

Dipolo induzido-dipolo induzido

- ✓ Também conhecida por dispersão de London: 2 kJ mol^{-1}

$$E_p \propto -\alpha_1 \alpha_2 / r^6$$

α_1 e α_2 = dipolos induzidos das moléculas 1 e 2
 r = distância entre os dipolos

F-F vs. Br-Br



gás

líquido

Ponto de fusão (°C): -220

-7

Ponto de ebulição (°C): -188

59

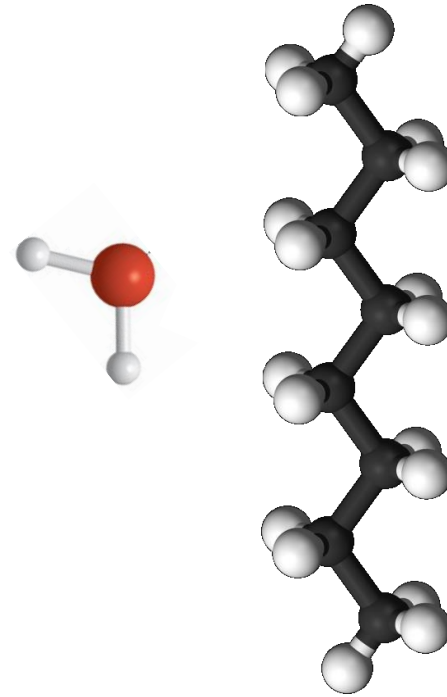
Dipolo induzido-dipolo induzido

	CF_4	CCl_4
Ponto de fusão ($^{\circ}\text{C}$):	-150	-23
Ponto de ebulição ($^{\circ}\text{C}$):	-129	77

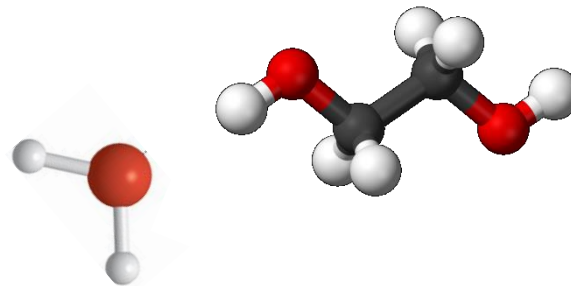
- ✓ Eletronegatividade: C (2,5), F (4,0), Cl (3,2)
- ✓ Forma da molécula
- ✓ Polarizabilidade

Solubilidade de moléculas

Baixa solubilidade da água em octano:



Elevada solubidade da água em etilenoglicol:



Múltiplas interações & ligações químicas

