As ligações químicas e o poço potencial associado a energia das ligações

Chemical bonds and the potential well associated with bond energy

Enlaces químicos y el pozo de potencial asociado a la energía de enlace.

Rick Allen de Lima Ferreira. Mestre em Física pela Universidade Federal do Piauí, UFPI, Teresina, PI. E-mail: rickallenphysics@gmail.com https://orcid.org/0009-0005-2000-3107

Daniel Barbosa Leal Serafim. Aluno do Curso de Engenharia Elétrica, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail:daniel.serafim@ee.ufcg.edu.br https://orcid.org/0009-0008-9538-556X

José Jefferson da Silva Nascimento. Professor Titular do curso de Engenharia de Processos, UFCG, Campina Grande, PB. E-mail: jose.jeferson@professor.ufcg.edu.br https://orcid.org/0000-0002-2620-6491

Anthony Ferreira Neri. Aluno do Curso de Engenharia de Produção, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: anthony.ferreira@estudante.ufcg.edu.br https://orcid.org/0009-0004-2503-4749

Bruna Thalita Alexandre Silva.. Mestre em Engenharia Mecânica pela UFCG.Email:engbrunathalita@gmail.com https://orcid.org/0009-0001-0615-2254

Rick Allen de Lima Ferreira: rickallenphysics@gmail.com

DOI: 10.61223/coopex.v17i01.7736

Submetido: 05/01/2026
Aprovado: 22/01/2026

ISSN 2177-5052

Resumo
Este artigo tem como objetivo realizar uma análise cientifica dos aspectos relacionados ao comportamento energético entre ligações químicas, associado a físico-químico, em ênfase na concepção de poço potencial. Este conceito refere-se a um modelo físico-matemático que descreve uma região do espaço onde a energia potencial de uma partícula exibe um mínimo local e um estado de estabilidade molecular. A partir desse estudo, serão abordados os potenciais de Morse, Lennard-Jones e Fukui, conforme suas percepções canônicas, com a finalidade de obter a relação entre os comportamentos energéticos envolvidos em ligações iônicas, covalentes e interações de Van der Waals. Os resultados visam subsidiar aplicações práticas em engenharia de materiais, como o desenho de compostos com propriedades mecânicas ou eletrônicas otimizadas.

Palavras-chave: Poço potencial; Ligações químicas; Energia de ligação; Modelos de interação.

Abstract
This article aims to conduct a scientific analysis of aspects related to the energy behavior of chemical bonds, associated with physical chemistry, with emphasis on the concept of potential wells. This concept refers to a physical-mathematical model that describes a region of space where the potential energy of a particle exhibits a local minimum and a state of molecular stability. Based on this study, Morse, Lennard-Jones, and Fukui potentials will be addressed, according to their canonical interpretations, in order to obtain the relationship between the energy behaviors involved in ionic, covalent, and Van der Waals interactions. The results aim to support practical applications in materials engineering, such as the design of compounds with optimized mechanical or electronic properties.

Keywords: Potential well; Chemical bonds; Bond energy; Interaction models.

Resumen
Este artículo tiene como objetivo realizar un análisis científico de aspectos relacionados con el comportamiento energético de los enlaces químicos, asociados con la fisicoquímica, con énfasis en el concepto de pozos de potencial. Este concepto se refiere a un modelo físico-matemático que describe una región del espacio donde la energía potencial de una partícula exhibe un mínimo local y un estado de estabilidad molecular. Con base en este estudio, se abordarán los potenciales de Morse, Lennard-Jones y Fukui, según sus interpretaciones canónicas, para obtener la relación entre los comportamientos energéticos involucrados en las interacciones iónicas, covalentes y de Van der Waals. Los resultados buscan respaldar aplicaciones prácticas en ingeniería de materiales, como el diseño de compuestos con propiedades mecánicas o electrónicas optimizadas.

Palabras clave: Pozo de potencial; Enlaces químicos; Energía de enlace; Modelos de interacción.

ISSN 2177-5052

Introdução

Durante muito tempo, o entendimento das ligações químicas se apoiou em modelos heurísticos como as ligações iônicas, covalentes e de Van der Waals, por serem didáticos, intuitivos e eficazes na explicação de propriedades químicas em contextos gerais. No entanto, como discutido por GERNOT FRENKING, ANDREAS KRAPP (2006), esses modelos — muitas vezes chamados metaforicamente de "unicórnios" — apresentam limitações quando aplicados a fenômenos complexos em ambientes de pesquisa e desenvolvimento. A própria natureza das interações químicas é mais profunda e multifacetada, exigindo abordagens que integrem conceitos da química quântica e da físico-química para que seja possível interpretar corretamente propriedades e comportamentos moleculares em escalas menores, como na engenharia de materiais e na modelagem molecular.

Diversos estudos apontam a importância de modelos matemáticos avançados para compreender a estabilidade de estruturas químicas. Modelos como o potencial de Morse e o de Lennard-Jones são fundamentais para descrever as forças envolvidas nas interações interatômicas, particularmente quando se busca compreender ligações em sistemas como complexos proteína-ligante ou nanomateriais. Além disso, o potencial de Fukui, permite avaliar a reatividade de espécies químicas durante processos de ligação e ruptura. Esses modelos são amplamente empregados na química computacional e na engenharia de materiais, contribuindo para simulações aplicadas ao desenvolvimento de novos compostos, à auto-organização de nanoestruturas e à análise da estabilidade de materiais em ambientes controlados.

Diante desse cenário, este trabalho tem como objetivo analisar a estrutura e os fundamentos dos modelos de interação química — Morse, Lennard-Jones e Fukui — a partir de uma abordagem físico-química, com foco no conceito de poço potencial. Também é apresentado o desenvolvimento de uma ferramenta computacional em Python para visualização gráfica dos potenciais, de forma a ilustrar o comportamento energético dos átomos durante as interações químicas e permitir uma análise comparativa entre os diferentes tipos de ligação. A proposta é contribuir com uma alternativa mais fundamentada aos modelos heurísticos tradicionais, promovendo um aprofundamento necessário na análise das ligações químicas.

O aprofundamento na análise das ligações químicas a partir de modelos matemáticos oferece uma base mais robusta para aplicações industriais e tecnológicas, principalmente em áreas como o design de fármacos e a engenharia de materiais. Compreender a fundo os mecanismos de estabilidade molecular é essencial para desenvolver materiais mais eficientes e estruturas auto-organizáveis com propriedades otimizadas. Ao utilizar modelos mais precisos, é possível prever melhor o comportamento de sistemas complexos, corrigindo falhas explicativas dos modelos tradicionais e abrindo caminhos para novas estratégias de simulação, fabricação e controle de materiais em escala atômica.

Este artigo está estruturado da seguinte forma: inicia-se com a apresentação da metodologia adotada, seguida de uma revisão bibliográfica voltada para as limitações e exceções observadas nos modelos tradicionais de ligações químicas. Em seguida, desenvolve-se a fundamentação teórica dos modelos de potencial de Morse, Lennard-Jones e Fukui, com base na literatura científica. Após essa etapa, aprofunda-se a análise do conceito de poço potencial. A modelagem computacional, desenvolvida em Python, é então descrita, com destaque para os resultados obtidos por meio das simulações e a análise comparativa entre diferentes moléculas. Por fim, apresenta-se a discussão dos achados e as considerações finais, destacando as contribuições do estudo para o aprofundamento na compreensão das ligações químicas e suas possíveis aplicações em áreas como engenharia de materiais, nanotecnologia e desenho molecular.

Método

Um levantamento integrativo de artigos e periódicos foi realizado utilizando a plataforma CAPES com o recurso ‘pesquisas avançadas’, possibilitando uma caracterização extensiva do tópico em questão. Paralelamente, foram realizadas simulações computacionais usando o programa Python através do modelo matemático apresentado na fundamentação teórica matematica, com o objetivo de obter a energia potencial das ligações químicas de acordo com a profundidade do poço potencial associado distancia interatômica.

Discussão

Limitações observadas nos modelos tradicionais de ligações e o poço potencial

GERNOT FRENKING, ANDREAS KRAPP (2006) Analisaram o desenvolvimento do estudo das ligações químicas, e como apesar dos avanços em química quântica, os químicos continuaram a usar os modelos heurísticos (chamados metaforicamente de "unicórnios") por serem intuitivos, fáceis de aplicar e muito eficientes para explicar e prever propriedades químicas. Ressaltando como as ligações químicas não devem ser entendidas apenas como uma questão de cargas elétricas clássicas, mas que a transição para teorias mais completas se demonstra um desafio, porque os problemas se tornam mais complexos e não tão intuitivos.

R. J. GILLESPIE, E. A. ROBINSON (2006) Complementam a discussão ao analisarem o legado de Gilbert N. Lewis, cuja obra de 1916 introduziu conceitos fundamentais sobre as ligações químicas. Apesar de toda a sua relevância, os autores destacam que alguns dos conceitos fundamentais introduzidos por Lewis, especialmente a regra do octeto, não são leis da natureza, mas sim regras empíricas sujeitas a exceções. Exemplos notórios incluem o PF_5, cuja estrutura de Lewis apresenta dez elétrons na camada de valência do fósforo, e o BCl_3, que possui apenas seis elétrons na camada de valência do boro.

ÁNGEL MARTÍN, DIOGO J. L, EVELIO FRANCISCO (2024) investigaram questões a respeito de como as ligações iônicas se apresentam fora de sólidos iônicos, analisando o caso da molécula de LiH, que gera controvérsias entre pesquisadores, pois ela é classificada como covalente por defensores de ligações de valência não ortogonais, mas que segundo o trabalho deles, pode ser enquadrada como iônica segundo uma série de métodos discutidos ao longo do estudo. Destacando uma dificuldade histórica e conceitual na análise de ligações iônicas em moléculas isoladas.

ALEXEI V FINKELSTEIN (2007) aborda as interações van der Waals entre múltiplos átomos, frequentemente ignoradas devido à cálculos mostrarem que efeitos de múltiplos corpos representam apenas uma fração da energia total. Contudo, o artigo aborda casos onde as interações van der Waals podem se tornar significativas devido a presença de ligações Covalentes, esses efeitos energéticos podem se tornar comparáveis aos causados por

substituição de átomos, revelando a importância de reconsiderar como essas interações são tratadas em modelos computacionais atuais.

DARIUSH HABIBOLLAH ZADEH (2021) Discute a importância de poços de potencial nuclear na modelagem molecular. A pesquisa enfatiza como a estrutura do núcleo atômico, representada por poços de potencial, é capaz de interferir na natureza das ligações químicas, questionando crenças tradicionais da química e propondo uma visão alternativa baseada na estrutura de poços de potencial nucleares. Além disso, apresenta uma metodologia para calcular comprimentos de ligações químicas com base nesses poços, acompanhada de um software que facilita a aplicação prática do método.

H. BERNHARD SCHLEGEL (2002) apresenta avanços em ferramentas para a exploração de superfícies de energia potencial, com ênfase no estudo de estruturas moleculares, considerando que muitos aspectos da química podem ser compreendidos a partir do comportamento dessas superfícies. O trabalho destaca como a estrutura, propriedades, reatividade e espectros moleculares podem ser analisados de forma integrada por meio das superfícies de energia potencial.

Fundamentação teórica dos modelos de interação

Em uma abordagem teórica, destaca-se a importância de compreender as características energéticas intrínsecas às ligações químicas. Tais comportamentos podem ser descritos matematicamente por modelos específicos: o potencial de Morse, adequado à modelagem de ligações diatômicas; o potencial de Lennard-Jones, aplicável a interações não covalentes. Esses modelos permitem descrever fenômenos como a estabilidade molecular, bem como os processos de absorção e liberação de energia associados à formação ou ruptura de ligações. Como complemento, discute-se o potencial de Fukui, que fornece uma representação simplificada do comportamento dos elementos, permitindo a visualização gráfica das tendências energéticas envolvidas nas interações moleculares.

Ao analisar a concepção do potencial de Morse, deve-se atribuir o entendimento matemático dado pela expressão relativa ao princípio fundamental da dinâmica clássica. Dessarte, é possível determinar a equação de movimento de uma partícula via parâmetros

ISSN 2177-5052

relevantes para a análise. Nesta equação a seguir, nomeada em homenagem ao físico Philip McCord Morse

$$V_M(x) = D\left(1 - e^{-a(x-x_0)}\right)^2 - D \therefore V_M(x) = D\left[\left(1 - e^{-a(x-x_0)}\right)^2 - 1\right]$$

$$V_M(x) = D\left(e^{-2a(x-x_0)} - 2e^{-a(x-x_0)}\right)$$

(1)

Via esta relação de movimento, pode-se extrair informações elementares acerca da força gerada por este movimento e o seu comportamento energético no sistema. Para obter tais resultados, é essencial a utilização de recursos de cálculo diferencial e integral para estimar as valências de força e energia interatômica. Aplicando a derivação do $V_M(x)$ em relação com o eixo das abscissas, obtemos a seguir equação:

$$F = -\frac{dV_M(x)}{dx} = -\frac{d}{dx}\left(D\left(1 - e^{-a(x-x_0)}\right)^2 - D\right) = -2Da\left(e^{\{-a(x-x_0)\}} - e^{\{-2a(x-x_0)\}}\right)$$

(2)

Aplicando o princípio fundamental da dinâmica, obtemos:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sum_{n=1}^{2} \frac{\alpha}{2}(-1)^n e^{-\alpha(3-n)(x-x_0)} = 0$$

(3)

A partir disso, obtemos a derivação de ordem superior e ao igualar a uma $constante$ (ϵ), intrinsecamente ligada a energia do sistema, para futuros tratamentos algébricos para a integração e obtenção do comportamento energético do sistema em consonância ao movimento realizado pelas partículas em relação ao tempo:

(i) $\left(E = \frac{m}{2}\epsilon \therefore \epsilon = \frac{2E}{m}\right)$

(ii) $\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \epsilon + \sum_{n=1}^{2} \frac{\alpha(-1)^n}{(3-n)a} e^{-a(3-n)(x-x_0)} = \epsilon - \frac{\alpha}{2a} e^{-2a(x-x_0)} + \frac{\alpha}{a} e^{-a(x-x_0)}.$

ISSN 2177-5052

(4)

Derivação de ordem superior em relação ao tempo, para o tratamento da liberação energética interatômica dos elementos em análise, atribuindo $(y = e^{a(x-x_0)})$, temos a integração dada por:

$$\frac{1}{a}\int_{y_i}^{y}\frac{dy}{\left(\epsilon y^2+\frac{\alpha}{a}y-\frac{\alpha}{2a}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

(5)

Ao realizar esta análise, deve-se estimar valor (ϵ) através das propriedades químicas dos elementos para que subsidie o raciocínio matemático intrinsecamente a relação de liberação ou absorção de energia gerada por ligações ou rupturas químicas, de modo a efetuar uma série de cálculos fundamentais para o entendimento de determinado elemento químico em um material. Com a finalidade de exemplificar a aplicação prática dos modelos discutidos, consideremos as moléculas diatômicas de hidrogênio (H_2) e oxigênio (O_2), cujas ligações covalentes são bem descritas pelo potencial de Morse. Os parâmetros característicos para essas moléculas, obtidos experimentalmente via espectroscopia, são:

$$-(H_2)\colon (D = 4.52\,\text{eV}), (a = 1.94\,\text{Å}^{-1}), (x_0 = 0.74\,\text{Å});$$

$$-(O_2)\colon (D = 5.21\,\text{eV}), (a = 2.67\,\text{Å}^{-1}), (x_0 = 1.21\,\text{Å}).$$

Estes dados foram obtidos via leitura no National Institute of Standards and Technology (NIST) Chemistry WebBook, substituindo esses valores na equação do potencial de Morse, obtemos as expressões específicas para cada molécula:

$$V_{\text{H}_2}(x) = 4.52\left(e^{-3.88(x-0.74)} - 2e^{-1.94(x-0.74)}\right)\text{eV},$$

$$V_{\text{O}_2}(x) = 5.21\left(e^{-5.34(x-1.21)} - 2e^{-2.67(x-1.21)}\right)\text{eV}.$$

A força interatômica, derivada do potencial, assume a forma:

ISSN 2177-5052

$$\text{Para } (H_2): F_{H_2} = -8.77\left(e^{-1.94(x-0.74)} - e^{-3.88(x-0.74)}\right) \text{eV/Å}$$

$$\text{Para } (O_2): F_{O_2} = -13.91\left(e^{-2.67(x-1.21)} - e^{-5.34(x-1.21)}\right) \text{eV/Å}$$

Aplicando o princípio fundamental da dinâmica, a equação de movimento para (H_2), por exemplo, torna-se:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 1.94\left(-e^{-1.94(x-0.74)} + e^{-3.88(x-0.74)}\right) = 0$$

Integrando numericamente com condições iniciais $(x(0) = x_0)$ e $(\frac{dx}{dt}(0) = 0)$, obtemos oscilações harmônicas próximas ao mínimo do poço de potencial, com frequências características de $(8.25 \times 10^{13}$ Hz) (H_2) e $(4.67 \times 10^{13}$ Hz) (O_2), consistentes com dados espectroscópicos.

A energia total do sistema é determinada pela constante (ϵ). Para (H_2) no estado fundamental $(E = -D)$:

$$\epsilon = \frac{2(-4.52)}{m_p} = -5.40 \times 10^{28}\ \text{m}^2/\text{s}^2 \quad \left(m_p = 1.67 \times 10^{-27}\ \text{kg}\right).$$

Em contrapartida, o modelo proposto por Lennard-Jones é disposto para interações não ligantes entre átomos ou moléculas neutras, no qual é amplamente usado em contexto de análise de comportamento energético entre gases nobres, líquido moleculares e coloides, por consequência, há correlação com a força de Van der Waals. A expressão é dada por um conjunto de variáveis, que atribuem valores distintos de acordo com o elemento em análise.

$$V_{\text{LJ}}(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \tag{6}$$

Para fins de exemplificação, optamos pela adoção de dois elementos com propriedades compatíveis com este modelo, He (Hélio) e Ar (Argônio). Os parâmetros característicos para

ISSN 2177-5052

esses elementos, obtidos experimentalmente via estudos de espalhamento e propriedades termodinâmicas, são:

$$-He\text{: } (\epsilon = 10.22\,\text{K})(equivalentea(0.88\,\text{meV})), (\sigma = 2.56\,\text{Å});$$

$$-Ar\text{: } (\epsilon = 124\,\text{K})(equivalentea(10.7\,\text{meV})), (\sigma = 3.40\,\text{Å}).$$

Substituindo esses valores na equação do potencial de Lennard-Jones, obtemos as expressões específicas para cada elemento:

Para He:

$$V_{\text{He}}(r) = 4 \times 0.88\left[\left(\frac{2.56}{r}\right)^{12} - \left(\frac{2.56}{r}\right)^{6}\right]\text{meV}$$

$$V_{\text{He}}(r) = 3.52\left(\frac{6.55 \times 10^{4}}{r^{12}} - \frac{2.56 \times 10^{2}}{r^{6}}\right)\text{meV}.$$

Para Ar:

$$V_{\text{Ar}}(r) = 4 \times 10.7\left[\left(\frac{3.40}{r}\right)^{12} - \left(\frac{3.40}{r}\right)^{6}\right]\text{meV}$$

$$V_{\text{Ar}}(r) = 42.8\left(\frac{1.50 \times 10^{6}}{r^{12}} - \frac{1.16 \times 10^{3}}{r^{6}}\right)\text{meV}$$

A força interatômica, derivada do potencial ($V_{\text{LJ}}(r)$), é dada por:

$$F_{\text{LJ}}(r) = -\frac{dV_{\text{LJ}}(r)}{dr} = 48\epsilon\left(\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{\sigma^{6}}{2r^{7}}\right) \tag{7}$$

Para He:

$$F_{\text{He}}(r) = 48 \times 0.88\left(\frac{2.56^{12}}{r^{13}} - \frac{2.56^{6}}{2r^{7}}\right)$$

ISSN 2177-5052

$$F_{\mathrm{He}}(r) = 42.24\left(\frac{2.81\times10^{5}}{r^{13}} - \frac{4.10\times10^{2}}{r^{7}}\right)\ \mathrm{meV/Å}$$

Para Ar:

$$F_{\mathrm{Ar}}(r) = 48\times10.7\left(\frac{3.40^{12}}{r^{13}} - \frac{3.40^{6}}{2r^{7}}\right)$$

$$F_{\mathrm{Ar}}(r) = 513.6\left(\frac{1.53\times10^{6}}{r^{13}} - \frac{8.35\times10^{2}}{r^{7}}\right)\ \mathrm{meV/Å}$$

A distância de equilíbrio (r_0), onde a força é nula, é obtida resolvendo ($F_{\mathrm{LJ}}(r_0) = 0$):

$$r_0 = 2^{1/6}$$

(8)

Para He: ($r_0 = 2.87\,$Å); para ** Ar **: ($r_0 = 3.82\,$Å). A profundidade do poço de potencial nesses pontos é ($V_{\mathrm{LJ}}(r_0) = -\epsilon$), resultando em ($-0.88\,$meV) (He) e ($-10.7\,$meV) (Ar), refletindo a maior estabilidade das interações em Argônio devido a sua maior polarizabilidade.

Estes experimentos demonstram a adequação do potencial de Lennard-Jones para descrever interações fracas, como as forças de Van der Waals, e sua dependência crítica dos parâmetros (ϵ) (energia de profundidade do poço) e (σ) (distância de equilíbrio).

De forma a complementar o conhecimento, a função de Fukui entra como um dos descritores de reatividade mais utilizados e é principalmente empregada para entender a reatividade molecular nucleofílica e eletrofílica. A energia de uma molécula pode ser escrita como um funcional do número de elétrons N e do potencial externo v(r). Durante reações químicas, tanto o número de elétrons quanto o potencial externo mudam para cada parceiro da reação, pois a aproximação de outro reagente altera v(r) e pode induzir transferência de carga. Assim, a energia de uma molécula é expressa como:

ISSN 2177-5052

$$E[v(r),N] = E[v°(r),N°] + \left(\frac{\partial E[v(r),N]}{\partial N}\right)_{\substack{v^0(r)=v(r)\\N=N°}} (N - N°) +$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 E[v(r),N]}{\partial N^2}\right)_{\substack{v^0(r)=v(r)\\N=N°}} (N - N°)^2 + \int \left(\frac{\delta E[v(r),N]}{\delta v(r)}\right)_{\substack{v^0(r)=v(r)\\N=N°}} \delta v(r)\, dr +$$

$$+ \frac{1}{2}\int \left(\frac{\partial \delta E[v(r),N]}{\partial N \delta v(r)}\right)_{\substack{v^0(r)=v(r)\\N=N°}} dN\delta v(r)\, dr + \cdots$$

(9)

Essa equação permite calcular a energia em termos dessas duas variáveis, com notação autoexplicativa. Usando o teorema de Hellmann-Feynman, pode ser expressa como:

$$\left(\frac{\partial \delta E[v(r),N]}{\partial N \delta v(r)}\right)_{\substack{v^0(r)=v(r)\\N=N°}} = \left(\frac{\partial \rho[r]}{\partial N}\right) = f(r)$$

(10)

ρ(r) é a densidade da molécula e f(r) é a chamada função de Fukui, que depende da coordenada de posição e do número de elétrons no sistema. Devido à descontinuidade na energia em função do número de elétrons, não se pode realmente tomar a derivada e é necessário distinguir um limite à direita ou superior e um limite à esquerda ou inferior, dando origem a duas funções de Fukui diferentes:

$$f^+(r) = [\rho_{N+1}(r) - \rho_N(r)]_{v^0(r)=v(r)}$$

$$f^-(r) = [\rho_N(r) - \rho_{N-1}(r)]_{v^0(r)=v(r)}$$

(11)

ISSN 2177-5052

Pondo em prática a teoria proposta, para o átomo de carbono com dados obtidos através do estudo de MAHMOUD A. S, FARAG F, ABD-ALLAH SH (2022) e com base na estrutura da molécula BTC — especificamente o átomo 1(C) — observa-se que este se encontra em um ambiente levemente eletrofílico.

$$f^{+}(r) = \rho_N(r) - \rho_{N+1}(r) = -0.046 - (-0.112) = 0.066$$

$$f^{-}(r) = \rho_N(r) - \rho_{N-1}(r) \; -0.046 - (-0.056) = \; 0.01$$

Nota-se que esse átomo é mais propenso a reagir com substâncias que doam elétrons (como as que aparecem em um ataque nucleofílico), o que é indicado pelo valor de $f^{+}(r) = 0.066$. Por outro lado, ele tem pouca tendência a reagir com substâncias que puxam elétrons, o que é chamado de ataque eletrofílico, como mostra o valor menor de $f^{-}(r) = 0.01$. Lembrando que nesse caso, para f+ a formula foi ajustada para o valor ficar positivo, facilitando a comparação entre diferentes partes da molécula, mesmo que o sentido do movimento dos elétrons seja diferente.

Os resultados obtidos pelo potencial de Morse durante a experimentação realizada permitem prever respostas mecânicas sob deformação. A maior profundidade do poço de O_2 $\left(D_{O_2} > D_{H_2}\right)$ explica sua maior rigidez, característica útil no projeto de materiais poliméricos com cadeias oxigenadas. Além disso, a modelagem da liberação energética durante rupturas, como em processos de combustão, é diretamente derivável das equações apresentadas, facilitando a otimização de compostos para armazenamento de energia. Esses modelos de interação baseados no potencial de Morse são fundamentais para compreender o comportamento molecular sob diferentes condições mecânicas e térmicas.

Em conformidade com os modelos de interação propostos por Lennard-Jones, parametrizados para gases nobres como He e Ar, é possível obter um quadro quantitativo para prever desde propriedades termodinâmicas até o comportamento de nanoestruturas. Sua simplicidade o torna indispensável em modelagens computacionais, embora suas limitações estimulem a adoção de potenciais híbridos em sistemas mais complexos. A escolha dos parâmetros (ϵ) e (σ) deve sempre considerar dados experimentais, como os obtidos por espalhamento de nêutrons, para garantir precisão. Complementando esses modelos, o potencial

ISSN 2177-5052

de Fukui se destaca como um importante descritor de reatividade química, auxiliando na previsão de locais preferenciais para ataques nucleofílicos e eletrofílicos, enriquecendo a análise das interações moleculares nos sistemas estudados.

Aprofundamento de ideias introduzidas a respeito do poço potencial

Durante a análise do poço de potencial, com o objetivo de aprofundar a compreensão sobre a natureza das ligações químicas, utilizou-se a equação (6) como ferramenta de modelagem das interações intermoleculares. Essa abordagem também foi empregada por THALES LUÍS, JOÃO PAULO E COLABORADORES (2009) em estudos voltados à representação e compreensão de ligações químicas por meio de métodos computacionais.

Tabela 1: Energia de rede obtida teoricamente e pelo ciclo de Born-Haber.

Composto Iônico	Er* (kJ/mol)	ΔErede** (kJ/mol)
NaCl	-764,6	-787,0
CaCl2	-2520,0	-2635,0
CsF	-730,0	740,8
CsCl	-636,4	-655,0
CsBr	-613,0	-629,6
MgO	-3970,0	-4050,0
NaF	-907,5	-926
LiF	-1003,2	-1023,7
LiCl	-835,0	-852

Fonte: Eliana Midori e Danilo Olivier: Estrutura de Sólidos Iônicos**.**
Acesso em: 22 jul. 2025.

Na Tabela 1, são apresentadas as energias de rede de diversos compostos iônicos, obtidas tanto por cálculos teóricos quanto por um método termodinâmico conhecido como ciclo de Born-Haber. Esse ciclo relaciona diferentes etapas termoquímicas (ΔH) envolvidas na formação do composto iônico a partir de seus elementos constituintes no estado gasoso, permitindo a estimativa indireta da energia de ligação.

ISSN 2177-5052

Esses e outros dados apresentados ao longo do trabalho são fundamentais para a análise da estrutura do poço de potencial, bem como da natureza das interações químicas envolvidas, permitindo distinguir entre diferentes tipos de ligações com base em sua estabilidade e profundidade energética.

Figura 1: Energia de Ligação (kJ/mol)

	H	C	N	O	S	F	Cl	Br	I
H	432								
C	411	346							
N	386	305	167						
O	459	358	201	142					
S	363	272	—	—	226				
F	565	485	283	190	284	155			
Cl	428	327	313	218	255	249	240		
Br	362	285	—	201	217	249	216	190	
I	295	213	—	201	—	278	208	175	149

Fonte: CHANG, Raymond. *General Chemistry: Media Enhanced Edition.* 8 (2008).

O livro General Chemistry aborda uma ampla variedade de temas da química, dedicando inclusive um capítulo específico à explicação do comportamento das energias associadas às ligações iônicas e covalentes. A obra apresenta uma tabela detalhada com os valores de energia de ligação entre diferentes átomos, além de fornecer dados importantes sobre distâncias interatômicas, como a do H_2. Essas informações foram fundamentais para embasar a modelagem implementada no software desenvolvido neste estudo.

ISSN 2177-5052

Tabela 2: Energia de Ligação em (meV) e distância intermolecular em angstrom

Sistema	ε(meV)	R_e(Å)
D_2O-D_2	8.2	3.45
D_2O-N_2	13.4	3.72
D_2O-O_2	13.7	3.73
D_2O-CH_4	17.5	3.80
ND_3-D_2	7.0	3.73
ND_3-O_2	13.5	3.88
ND_3-CH_4	19.0	39.2

Fonte: RHUIAGO MENDES, SALVINO COIMBRA, E COLABORADORES (2020).

Por fim, foram necessários dados específicos sobre ligações do tipo Van der Waals, os quais foram obtidos a partir do trabalho de RHUIAGO MENDES, SALVINO COIMBRA, E COLABORADORES (2020), que apresenta cálculos de energia e raios intermoleculares para moléculas como ND_3–O_2 e ND_3–CH_4.

$$13.5\ \varepsilon(meV) = 13.5 \times 0.096485\ \text{kj/mol} = 1.3025\ \text{kj/mol}$$

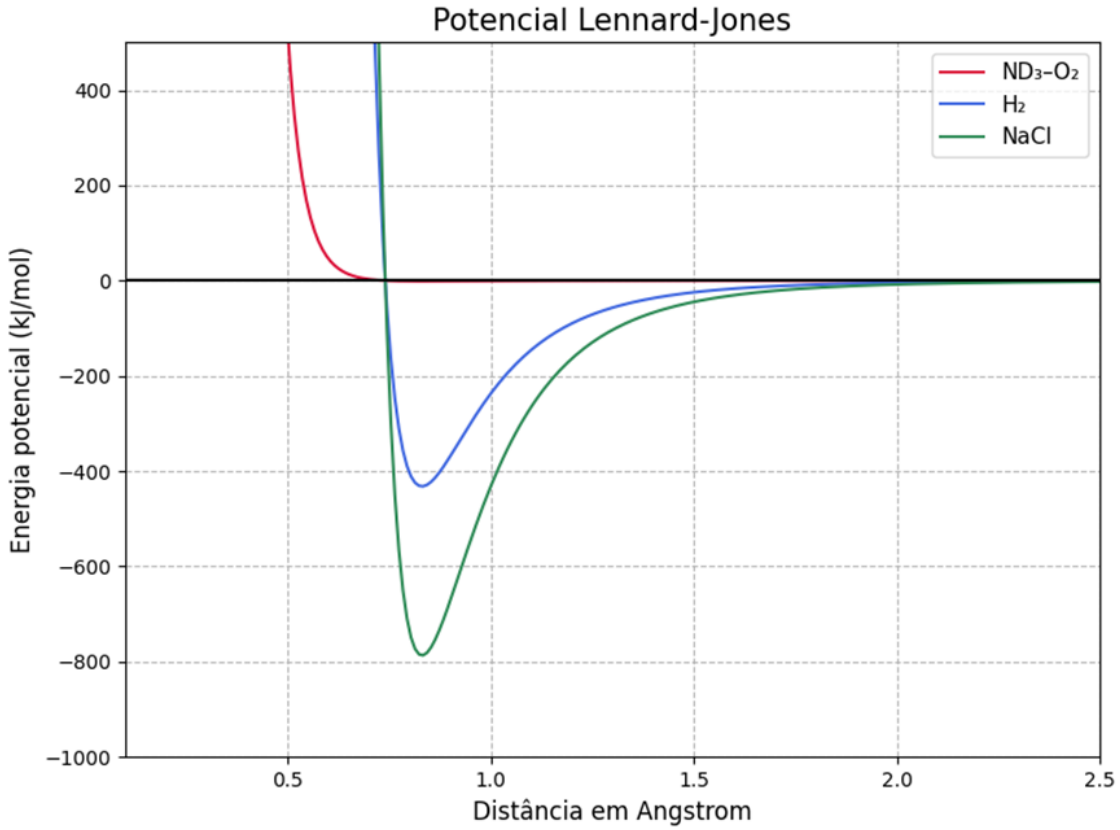
Com as informações reunidas, e a fim de complementar os argumentos desenvolvidos ao longo do artigo, foi elaborado um gráfico do poço de potencial para os sistemas NaCl, H_2 e ND_3–O_2. Utilizou-se o potencial de Lennard-Jones para modelar as interações, com o objetivo de simplificar a análise comparativa entre os sistemas. Para uniformizar a visualização e destacar a curvatura do potencial, a distância intermolecular "r" foi intencionalmente fixada em 0,74 Å em todos os casos.

Resultados

A figura 2 apresenta a interação molecular entre três espécies químicas — ND_3-O_2, H_2 e NaCl — em função da distância intermolecular (em ångströms), variando de 0,1 a 2,5 Å. O eixo vertical representa a energia potencial (em kJ/mol), no intervalo de -1000 a 500 kJ/mol.

ISSN 2177-5052

Figura 2: Gráfico do poço potencial de Lennard-Jones (LIGAÇÃO VAN DER WAALS – ND3-02, LIGAÇÃO COVALENTE – H2, LIGAÇÃO IÔNICA - NaCl)



Fonte: Próprio autor.

A modelagem computacional foi realizada com o objetivo de comparar as energias de ligação dessas espécies, adotando-se a distância intermolecular do H_2 como referência para facilitar a visualização comparativa da profundidade dos poços de potencial.

Os resultados evidenciam que a interação Van der Waals, representada pelo sistema ND_3-O_2, apresenta os menores valores de energia, refletindo a fraca intensidade dessa ligação. Em seguida, observa-se a ligação covalente do H_2, com profundidade de poço intermediária. Por fim, a ligação iônica do NaCl destaca-se por apresentar a maior profundidade do poço de potencial, indicando ser a ligação mais forte e estável entre os sistemas analisados. Afirmando os dados coletados das fontes fornecidas.

Considerações Finais

Os resultados deste estudo evidenciam a relevância do poço potencial como ferramenta fundamental para a compreensão da estabilidade e das características das ligações químicas, mostrando que diferentes tipos de ligação geram perfis energéticos distintos. A análise dos modelos de Morse, Lennard-Jones e Fukui demonstrou que abordagens teóricas mais robustas permitem investigar, com maior precisão, a natureza das interações atômicas, revelando limitações dos modelos tradicionais. Combinados à simulação computacional e ao suporte bibliográfico, esses modelos se mostram eficazes para aplicações como o design de fármacos, a engenharia de materiais e o estudo de nanoestruturas, reforçando a importância da modelagem físico-química na previsão de estabilidade molecular e no desenvolvimento de tecnologias mais eficientes.

Referências

FRENKING, Gernot; KRAPP, Andreas. Unicorns in the World of Chemical Bonding Models. Journal of Computational Chemistry, v. 27, n. 15, p. 1547–1557, 2006. DOI: 10.1002/jcc.20543.

GILLESPIE, R. J.; ROBINSON, E. A. Gilbert N. Lewis and the Chemical Bond: The Electron Pair and the Octet Rule from 1916 to the Present Day. Journal of Computational Chemistry, v. 27, n. 15, p. 1563–1571, 2006. DOI: 10.1002/jcc.20545.

PENDÁS, Ángel Martín; RODRIGES, Diogo J. L.; FRANCISCO, Evelio. Can we talk about ionic bonds in molecules? Yes, just as we do for covalent bonds. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 27, p. 1789, 2025. DOI: 10.1039/d4cp04353g.

FINKELSTEIN, Alexei V. Average and extreme multi-atom Van der Waals interactions: Strong coupling of multi-atom Van der Waals interactions with covalent bonding. Chemistry Central Journal, v. 1, p. 21, 2007. DOI: 10.1186/1752-153X-1-21. Disponível em: http://journal.chemistrycentral.com/content/1/1/21. Acesso em: 22 jul. 2025.

ZADEH, Dariush Habibollah. Molecular Theory Considering Nuclear Potential Wells. Research Square, 12 abr. 2021. DOI: https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-390655/v1. Disponível em: https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-390655/v1. Acesso em: 22 jul. 2025.

SCHLEGEL, H. B. Exploring Potential Energy Surfaces for Chemical Reactions: An Overview of Some Practical Methods. Journal of Computational Chemistry, v. 24, n. 12, p. 1514–1527, 2003.

BULTINCK, Patrick; CLARISSE, Dorien; AYERS, Paul; CARBÓ-DORCA, Ramon. The Fukui matrix: A simple approach to the analysis of the Fukui function and its positive character. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 13, p. 5029–5035, fev. 2011. DOI: 10.1039/c0cp02268c.

SAKR, Mahmoud A. S.; SHERBINY, Farag F.; EL-ETRAWY, Abd-Allah Sh. Hydrazone-based Materials; DFT, TD-DFT, NBO Analysis, Fukui Function, MESP Analysis, and Solar Cell Applications. Journal of Fluorescence, v. 32, p. 1857–1871, 2022. DOI: 10.1007/s10895-022-03000-6.

SABINO, Thales Luis Rodrigues et al. Simulação de dinâmica molecular usando o potencial de Lennard-Jones. Universidade Federal de Juiz de Fora, Departamento de Ciência da Computação e Departamento de Física; Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin. Juiz de Fora, MG e Campinas, SP, Brasil, 2009.

OLIVEIRA, Rhuiago Mendes de et al. Dinâmica e Espectroscopia dos Complexos de van der Waals D2O-D2, D2O-N2, D2O-9O2, D2O-CH4, ND3-D2,ND3-O2 e ND3-CH4. Brazilian Journal of Development, Curitiba, v. 6, n. 12, p. 94455–94464, dez. 2020. DOI: 10.34117/bjdv6n12-057.

LINSTROM, P. J.; MALLARD, W. G. (Ed.). NIST Livro de Química na Web – Base de dados de Referência padrão do NIST nº 69. Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 2001. Disponível em: https://webbook.nist.gov/chemistry/. DOI: https://doi.org/10.18434/T4D303. Acesso em: 16 jul. 2025.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL. Grupo - Lennard-Jones. Disponível em: https://fiscomp.if.ufrgs.br/index.php/Grupo_-_Lennard_Jones. Acesso em: 16 jul. 2025.

LIBRETEXTS CHEMISTRY. Lennard-Jones potential. Disponível em: https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/Atomic_and_Molecular_Properties/Intermolecular_Forces/Specific_Interactions/Lennard-Jones_Potential. Acesso em: 18 jul. 2025.

PINHEIRO, R. F.; PEREIRA, M. A.; GOMES, M. A. Solução analítica do potencial de Morse em mecânica clássica. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 29, n. 4, p. 5606, 2007. DOI: 10.1590/S1806-11172007000400012. Disponível em: https://www.scielo.br/j/rbef/a/jLCKzgvbHSg96RM9Twc3PDm/. Acesso em: 18 jul. 2025.

BARBOZA, F. L. Moraes; COSTA, A. J.; RIBEIRO, N. F.; DRIGO FILHO, E. Solução analítica do potencial de Morse em mecânica clássica. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 29, n. 4, 2007. DOI: 10.1590/S1806-11172007000400012. Disponível em: https://www.scielo.br/j/rbef/a/jLCKzgvbHSg96RM9Twc3PDm/. Acesso em: 18 jul. 2025.