

Estudo do poço potencial associado as ligações químicas com modelagem e simulação numérica

Study of the potential well associated with chemical bonds with modeling and numerical simulation

José Sávyo Soares Lira¹

Flávio Franklin Ferreira de Almeida²

Bruna Thalita Alexandre Silva³

Patrícia Michelle Costa Gomes⁴

José Jefferson da Silva Nascimento⁵

Resumo: Este estudo tem o objetivo de analisar a ciência das ligações químicas, enfatizando a energia potencial associada ao poço potencial que governa as forças de atração e repulsão entre átomos. A questão central para a investigação é a profundidade do poço potencial, um indicador da força da ligação química, cuja variação influencia diretamente a estabilidade molecular. A metodologia aplicada foi o levantamento de vários artigos sobre o tema bem como a utilização de simulações numéricas a robustez dessas ligações. Esta abordagem permite um exame minucioso das interações atômicas e moleculares, superando limitações dos métodos experimentais convencionais. As simulações revelam o equilíbrio entre as forças de atração, responsáveis pela formação de ligações, e as forças de repulsão, que limitam a proximidade dos átomos. Esse equilíbrio é crucial para a compreensão da formação e ruptura de ligações químicas. Além disso, as implicações desses achados são discutidas em relação ao desenvolvimento de materiais avançados e catalisadores, destacando o potencial de manipulação da profundidade do poço potencial para inovação em química e engenharia de materiais. Em síntese, o presente estudo ilumina a importância da profundidade do poço potencial nas ligações químicas e exemplifica o valor das simulações numéricas na análise de interações atômicas. Os insights obtidos prometem avanços significativos na química de materiais e na catálise, oferecendo novas perspectivas para o design de materiais com propriedades específicas e catalisadores mais eficientes. Este trabalho não só aprofunda nosso entendimento das forças fundamentais que moldam as interações químicas, mas também abre caminho para futuras inovações na área.

Palavra- chaves: Poço potencial; Ligações químicas; Quebra de ligações; Energia.

Abstract: This study aims to analyze the study of chemical bonds, emphasizing the potential energy associated with the potential well that governs the forces of attraction and repulsion between atoms. The central issue for investigation is the depth of the potential well, an indicator of the strength of the chemical bond, whose variation directly influences molecular stability. The methodology applied was the survey of several articles on the topic as well as the use of robust numerical simulations of these bonds. This approach allows a meticulous examination of atomic and molecular interactions, overcoming limitations of conventional experimental methods. The simulations reveal the balance between the forces of attraction, responsible for the formation of bonds, and the forces of repulsion, which limit the proximity of the atoms. This balance is crucial for understanding the formation and breaking of chemical bonds. Furthermore, the implications of these findings are discussed in relation to the development of advanced materials and catalysts, highlighting the potential of manipulating the depth of the potential well for innovation in chemistry and materials engineering. In summary, the present study illuminates the importance of the depth of the potential well in chemical bonds and exemplifies the value of numerical simulations in the analysis of atomic interactions. The insights gained promise significant advances in materials chemistry and catalysis, offering new perspectives for the design of materials with specific properties and more efficient catalysts. This work not only deepens our understanding of the fundamental forces that shape chemical interactions but also paves the way for future innovations in the field.

Keywords: Potential well; Chemical bonds; Bond breaking; Energy;

DOI: 10.61223/coopex.v15i01.792

¹ Aluno do Curso de Engenharia de Elétrica, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: josesavyo.lira@ee.ufcg.edu.br

² Aluno especial do Doutorado no Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos. E-mail: flavioalmeida@fiponline.edu.br

³ Mestranda em Engenharia de Mecânica, Programa de Pós Graduação em Engenharia de Mecânica, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: engbrunathalita@gmail.com

⁴ Diplomada em Ciências Contábeis. E-mail: patriciamicheleh@gmail.com

Professor Titular do curso de Engenharia de Materiais, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: npesquisador@gmail.com

⁵ Prof Titular do curso de Engenharia de Materiais, UFCG, Campina Grande, PB. E-mail: jose.jeferson@professor.ufcg.edu.br

INTRODUÇÃO

Em termos científicos e tecnológicos existe uma importância fundamental no estudo das ligações químicas, pois, todos os átomos exceto os gases nobres doam, recebem ou compartilham elétrons assim esse conhecimento é aplicado na produção de produtos industriais, pois a natureza da união dos átomos evidencia a produção de aços, polímeros, cerâmicos, materiais com memória de forma etc.

A compreensão das ligações químicas transcende o ensino tradicional, fundamentando-se na complexidade e na relevância energética das interações atômicas. Este estudo propõe um modelo educacional inovador, integrando simulações numéricas através de software em Python, para elucidar o impacto das diferentes energias de ligação na profundidade do poço potencial. Esta abordagem pedagógica visa superar as simplificações didáticas prevalentes, como a "regra do octeto", promovendo uma análise mais crítica e contextualizada dos processos químicos. Através de visualizações interativas e modelagem numérica, este trabalho se alinha às exigências contemporâneas da educação científica, oferecendo uma perspectiva mais integrada e engajadora no estudo das ligações químicas.

Historicamente, o ensino de química no nível médio tem se apoiado em conceitos simplificados, distanciando os alunos do conhecimento científico atual e limitando sua capacidade de compreender a complexidade das interações atômicas. Este paradigma educacional enfatiza regras e classificações, como a regra do octeto, sem oferecer aos estudantes uma compreensão profunda das variações energéticas envolvidas na formação das ligações químicas (CRISTINA *et al.*, 2013). Tal abordagem não apenas restringe o entendimento dos alunos, mas também diminui sua habilidade de aplicar o conhecimento em contextos mais amplos e conectados da química, como as propriedades dos compostos orgânicos e a termodinâmica (COLL; TREAGUST, 2003).

A integração de simulações numéricas no ensino de ligações químicas representa um avanço significativo, permitindo a visualização das forças de atração e repulsão e a influência das energias de ligação na profundidade do poço potencial (BARTH; SCHNEIDER; VON KÄNEL, 2010). O uso de software em Python facilita a representação gráfica destas variações, tornando conceitos abstratos mais acessíveis e compreensíveis para os alunos. Este método inovador não só enriquece a experiência de aprendizagem, mas também promove o desenvolvimento de habilidades analíticas e críticas.

Este trabalho busca, portanto, explorar novas vias de ensino que enriqueçam o aprendizado de química, tornando-o mais relevante e contextualizado. Propõe-se um modelo didático que não apenas aborde os aspectos procedimentais das ligações químicas, mas também suas implicações

teóricas e práticas. Por meio desta abordagem, visa-se proporcionar aos alunos uma compreensão mais abrangente e significativa dos processos químicos, incentivando um aprendizado engajado e fundamentado na análise crítica e na exploração interativa.

Em suma, o objetivo deste estudo é transcender os métodos tradicionais de ensino de química, introduzindo uma abordagem pedagógica inovadora que integra simulações numéricas para uma compreensão mais profunda das ligações químicas utilizando a revisão bibliográfica.

METODOLOGIA

Fonte de informação

Um levantamento sistemático de artigos e periódicos foi realizado utilizando a plataforma CAPES com o recurso 'pesquisas avançadas', possibilitando uma caracterização extensiva do tópico em questão. Paralelamente, conduziu-se um estudo computacional utilizando Python, com o objetivo de ilustrar as características distintas das ligações químicas em termos de energia potencial. O poço potencial foi analisado, revelando que sua profundidade indica a força das ligações. O código Python desenvolvido durante a pesquisa é apresentado em anexo, demonstrando a aplicação prática das simulações numéricas no contexto da química teórica.

DISCUSSÃO

Ligações químicas e poço potencial

PEREIRA SILVA (2016) investigou o ensino de ligações químicas, apontando que muitos estudantes encontram dificuldades em compreender este conceito devido à sua natureza abstrata e à tendência de simplificá-lo através da "regra do octeto". Essa simplificação, embora busque facilitar o aprendizado, paradoxalmente pode limitar a compreensão dos alunos e promover concepções alternativas que distorcem os princípios científicos. Silva sugere que é crucial repensar as metodologias de ensino em química para oferecer aos estudantes um entendimento mais completo e cientificamente embasado das ligações químicas.

JOKI & AKSELA (2018), também exploraram o ensino de ligações químicas, questionando o uso tradicional da regra do octeto e sugerindo uma abordagem baseada em interações eletrostáticas. Investigou-se como a compreensão dos alunos sobre ligações químicas evolui do ensino fundamental ao médio usando o modelo eletrostático e como o ensino subsequente de octetos/camadas completas afeta essa compreensão.

O trabalho de VAN DULMEN *et al.* (2022), aborda o ensino de ligações químicas, focando

no desenvolvimento de um quadro para educadores de professores pré-serviço, visando entender e abordar a complexidade do ensino de ligações químicas. Utiliza o conhecimento pedagógico do conteúdo (PCK) como lente teórica, baseado em uma revisão sistemática da literatura e nas representações de conteúdo de educadores de química, revelando diferenças entre o PCK coletivo derivado da literatura e o PCK pessoal dos educadores de química holandeses. Propõe um quadro para ajudar os educadores de professores de química, discutindo seus usos e sugerindo aplicações práticas para o design de atividades em sala de aula.

MENNANI, RAOUF & KHYATI (2023), investigaram as dificuldades didáticas e epistemológicas enfrentadas por professores no ensino de química em escolas secundárias marroquinas, com ênfase nos conceitos de oxidação-redução e ácido-base. Utilizando questionários para analisar as concepções de professores em formação e em exercício, o estudo revela deficiências epistemológicas significativas na aplicação dos conceitos químicos em situações cotidianas e na resolução de problemas. Destaca-se a necessidade de melhorar o conhecimento pedagógico dos professores para facilitar o aprendizado efetivo da química, especialmente na aplicação prática dos conceitos químicos em contextos autênticos.

TABER (2024), abordou o ensino de ligações químicas, destacando a prevalência e as limitações do uso da regra do octeto na educação em química. Critica a simplificação excessiva do ensino dessa regra, apontando como ela pode levar a concepções errôneas sobre as forças que impulsionam as reações químicas. Sugere a necessidade de abordagens mais complexas e matizadas no ensino das ligações químicas, para evitar reforçar interpretações simplistas e incorretas entre os estudantes.

GARBACZEWSKI & STEPHANOVICH (2021), abordam o poço potencial superharmônico de duplo poço e sua aproximação por um poço potencial retangular de duplo poço. Foca-se na geração do potencial $V(x)$ a partir de uma função potencial confinante $U(x)$ e explora como as propriedades espectrais podem ser quantificadas para processos de difusão Smoluchowski em tais potenciais. A pesquisa visa superar desafios na solução espectral de sistemas quase-exatamente solúveis do tipo Schrödinger, apresentando um procedimento assistido por computador para obter uma solução espectral aproximada.

JIANG & ZHOU (2011), exploram a análise de sistemas quânticos que apresentam poços de potencial profundos. Centra-se em entender como tais configurações afetam as propriedades dos sistemas, especialmente em termos de estados fundamentais e soluções de onda. A pesquisa visa elucidar o comportamento desses sistemas sob diferentes condições, oferecendo insights sobre as interações e dinâmicas quânticas subjacentes. Essa abordagem ajuda a avançar o conhecimento sobre potenciais complexos e suas implicações para a física quântica.

HABIBOLLAH ZADEH (2021) apresenta um método novo para estimar comprimentos de ligação química, utilizando o modelo atômico de Bohr de um elétron, complementado por conceitos

de Carga Nuclear Aparente (ANC) e Efeito de Blindagem Eletrônica (ESE). Ao aplicar essas teorias para converter átomos multielétrons em átomos de um elétron, o estudo explora poços de potencial nuclear e suas contribuições para o comprimento das ligações químicas. Resultados calculados para aproximadamente 90 ligações diferentes mostraram um erro médio de menos de 5% em comparação com dados experimentais, indicando a eficácia do método proposto.

PADMAVATHI (2011), discute a correlação entre as curvas de energia potencial e as propriedades dos materiais. Destaca-se que a profundidade e a forma da curva de energia potencial de um material indicam a energia de ligação e influenciam propriedades como a temperatura de fusão, a rigidez elástica e o coeficiente de expansão térmica. O artigo aponta para a importância dessas curvas na previsão de várias propriedades físicas e na seleção de materiais para aplicações específicas. As análises são feitas com base em diferentes tipos de ligações químicas, como iônica, covalente e metálica, e em como essas ligações contribuem para as propriedades observadas em diferentes materiais.

Uso de simulação computacional aplicado no estudo ligações químicas

SILVA *et al.* (2020), exploram o uso do software Avogadro® como ferramenta didática no ensino de ligações químicas para estudantes de Química. Destaca-se a experimentação computacional para facilitar o entendimento de conceitos químicos complexos, oferecendo uma experiência educativa interativa. Os resultados mostram avanços cognitivos significativos nos estudantes, indicando que a simulação computacional pode corrigir deficiências remanescentes das práticas docentes tradicionais, promovendo uma aprendizagem mais eficaz e engajadora.

CRISTINA *et al.* (2007), discutem uma estratégia de ensino que incorpora a modelagem para explicar a ligação iônica e as energias envolvidas na formação de uma rede iônica. A abordagem é baseada na criação e aplicação de modelos pelos alunos para entender o equilíbrio entre forças atrativas e repulsivas e o conceito de estabilidade química. O estudo apresenta resultados positivos, sugerindo que essa metodologia pode ajudar os alunos a compreenderem melhor a ligação iônica e os processos energéticos associados.

SILVA & VASCONCELOS (2021), exploram a integração de aplicativos móveis no ensino de química, particularmente aqueles que oferecem softwares de simulação. O estudo aborda como esses aplicativos podem ser empregados para melhorar o entendimento dos estudantes sobre conceitos abstratos em química, fornecendo uma maneira mais interativa e acessível de aprendizado. Ele ressalta o potencial dos smartphones como ferramentas educacionais que podem complementar as aulas de química, especialmente em situações onde os recursos tradicionais de laboratório podem não estar disponíveis.

Desenvolvimento e aplicação dos conceitos pesquisados na simulação numérica

O python foi utilizado para a simulação numérica por ser uma linguagem de alto nível e por todo o suporte gráfico necessário para analisar as ligações fortes e fracas através do poço potencial.

A equação 1, chamada de equação potencial Lennard-Jones também utilizada por GULLITH & DANTAS (2023), foi modelada no algoritmo para traçar graficamente o gráfico do potencial.

$$V(r) = D \cdot 4 \cdot \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

Onde $V(r)$ é a energia potencial (KJ/mol^{-1}), D é a energia de dissociação da ligação, Tabela 1 e ' r ' é a distância intermolecular.

Tabela 1: Energia de dissociação de ligação.

Molécula	$D / \text{kJ mol}^{-1}$
H_2	435,8
Li_2	105
Na_2	74,8
K_2	57
Ni_2	944,8
P_2	489,1
O_2	498,4
S_2	425,3
F_2	158,7
Cl_2	242,4
Br_2	193,9
I_2	152,3

O cálculo do raio interatômico ' a ' é executado ao medir a distância entre os núcleos dos átomos, que é expressa em picômetros. Utilizando esse raio ' R ' determinado, procedemos ao cálculo da área superficial atômica (A_a), Figura 1. A aplicação subsequente da fórmula de John, conforme descrito por GULLITH & DANTAS (2023), permite uma investigação detalhada, os métodos de simulação do poço potencial foram aplicados para três tipos distintos de ligações

atômicas. A observação detalhada das características dessas ligações, como ilustrado na Figura 2, revela que a profundidade do poço potencial é diretamente proporcional à força da ligação química. Isso é corroborado pela Tabela 1, que apresenta dados empíricos confirmando que a maior profundidade do poço potencial é associada à ligação química mais robusta. Dessa maneira, a profundidade do poço potencial emerge como um conceito crucial para a compreensão das ligações químicas. Essa compreensão é vital para desvendar as interações fundamentais que ocorrem no nível atômico e molecular.

$$a = R * 2/100 \quad (2)$$

Figura 1: Raio de Van Der Sar.

Grupo #	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Período																		
1	H 120		He 140															
2	Li 182	Be 153		B 192	C 170	N 155	O 147	F 147	Ne 154									
3	Na 227	Mg 173		Al 184	Si 210	P 180	S 180	Cl 175	Ar 188									
4	K 275	Ca 231	Sc 211	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni 163	Cu 140	Zn 139	Ga 187	Ge 211	As 185	Se 190	Br 185	Kr 202
5	Rb 303	Sr 249	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd 163	Ag 172	Cd 158	In 193	Sn 217	Sb 206	Te 206	I 198	Xe 216
6	Cs 343	Ba 268	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt 175	Au 166	Hg 155	Tl 196	Pb 202	Bi 220	Po 348	At	Rn 283
7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Fl	Uup	Lv	(Uus)	Uuo
* Lantanídeos	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
** Actinídeos	Ac	Th	Pa	U 186	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

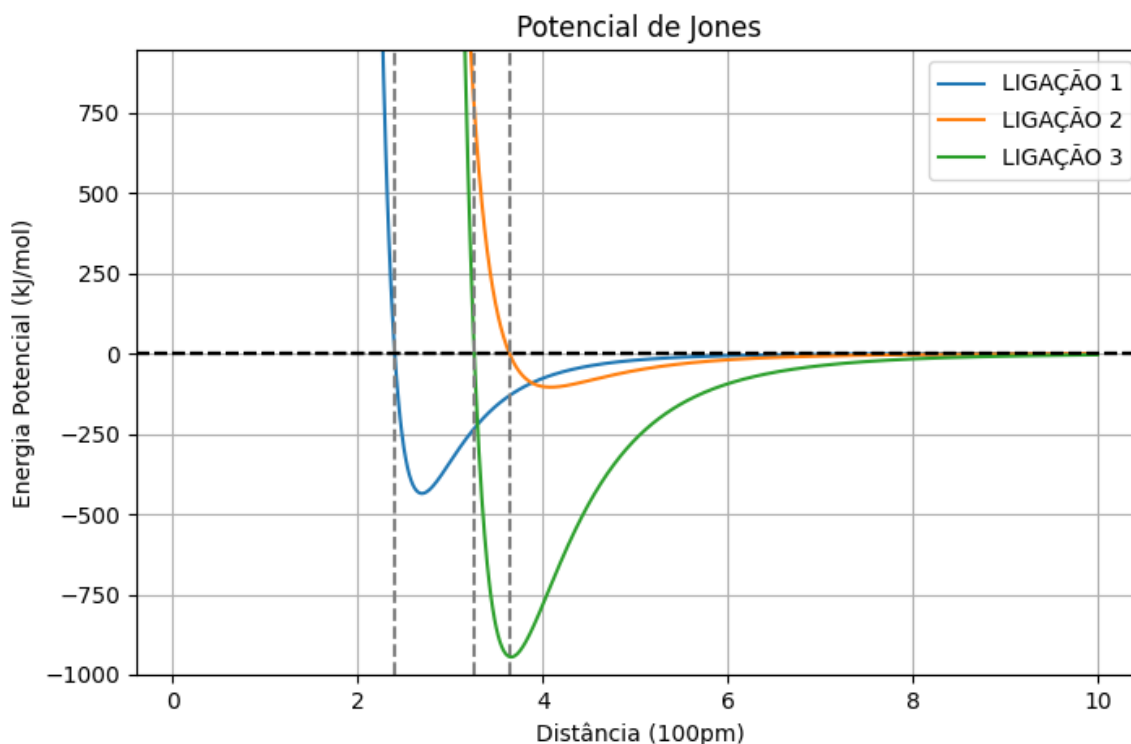
Fonte: NiNa.Az (2023).

Com isso foi desenvolvido um software em python que plote o gráfico do potencial de Jones visando mostrar as diferenças entre as profundidades dos poços potenciais gerados por ligações com diferentes energias de dissociação.

Para validar o software desenvolvido em python o mesmo foi colocado a prova para comparar o gráfico do poço potencial de três ligações químicas, são essas ligações responsáveis por gerar H₂, Li₂ e Ni₂.

RESULTADOS

Figura 2: Gráfico do poço potencia de Jones gerado pelo software desenvolvido(LIGAÇÃO 1 - H₂, LIGAÇÃO 2 - Li₂, LIGAÇÃO 3 - Ni₂).



Fonte: Próprio autor.

A simulação foi feita com o intervalo intermolecular de 10pm à 1000pm, a partir do gráfico da figura 2 gerado é possível observar as diferentes profundidades dos poços gerados para cada ligação química com suas diferentes energias de dissociação, mostrando que a ligação de maior energia de ligação é a ligação 3(Ni₂), ligação essa que mostrou o poço mais fundo e a ligação com o poço potencial mais raso é a ligação 2 (Li₂), ligação mais fraca, esse resultado afirma o que mostra a Tabela 1.

CONCLUSÃO

O estudo demonstrou eficazmente a aplicação de simulações numéricas no entendimento dos poços potenciais em ligações químicas, destacando como variações na profundidade e formato influenciam as propriedades moleculares. Os modelos empregados forneceram novas percepções sobre o comportamento molecular, essenciais para avanços na química de materiais e bioquímica. O trabalho sublinha o papel crítico das simulações numéricas na predição precisa de interações

moleculares e recomenda sua aplicação em sistemas mais complexos para descobertas futuras. A integração com dados experimentais promete refinamentos adicionais nesse campo, reforçando o valor das simulações numéricas como uma ferramenta central na pesquisa química contemporânea.

REFERÊNCIAS

- CRISTINA, P.; MENDONÇA, C.; DA, R.; JUSTI, S. Ensino-Aprendizagem de Ciências e Argumentação: Discussões e Questões Atuais Science Education and Argumentation: Discussions and Current Questions. **Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 13, n. 1, 2013.
- COLL, R. K.; TREAGUST, D. F. Investigation of secondary school, undergraduate, and graduate learners' mental models of ionic bonding. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 40, n. 5, p. 464–486, mar. 2003.
- BARTH, J.; SCHNEIDER, S.; VON KÄNEL, R. Lack of Social Support in the Etiology and the Prognosis of Coronary Heart Disease: A Systematic Review and Meta-Analysis. **Psychosomatic Medicine**, v. 72, n. 3, p. 229–238, mar. 2010.
- PEREIRA SILVA, R. **UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA MESTRADO PROFISSIONAL O ENSINO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS POR MEIO DO CONCEITO DE ENERGIA: Uma proposta didática para o Ensino Médio UBERLÂNDIA 2016.**
- JOKI, J.; AKSELA, M. The challenges of learning and teaching chemical bonding at different school levels using electrostatic interactions instead of the octet rule as a teaching model. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 19, n. 3, p. 932–953, 2018.
- VAN DULMEN, T. H. H.; VISSER, T. C.; COENDERS, F. G. M.; PEPIN, B.; MCKENNEY, S. Learning to teach chemical bonding: a framework for preservice teacher educators. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 24, n. 3, p. 896–913, 21 nov. 2022.
- MENNANI, M.; RAOUF, K.; KHYATI, A. Epistemological and Didactic Difficulties of Teaching

Chemistry in Moroccan High Schools. **Journal of Educational and Social Research**, v. 13, n. 3, p. 60–68, 1 maio 2023.

TABER, K. S. Understanding the octet framework: Comment on ‘What resources do high school students activate to link energetic and structural changes in chemical reactions? – A qualitative study’. **Chemistry Education Research and Practice**, 2024.

GARBACZEWSKI, P.; STEPHANOVICH, V. A. Superharmonic double-well systems with zero-energy ground states: Relevance for diffusive relaxation scenarios. 24 abr. 2021. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2104.11905>>.

JIANG, Y.; ZHOU, H. S. Schrödinger-Poisson system with steep potential well. **Journal of Differential Equations**, v. 251, n. 3, p. 582–608, 1 ago. 2011.

HABIBOLLAH ZADEH, D. **Molecular theory considering nuclear potential wells**, 2021.

PADMAVATHI, D. A. Potential Energy Curves & Material Properties. **Materials Sciences and Applications**, v. 02, n. 02, p. 97–104, 2011.

RENAN DA SILVA, J.; PEREIRA DIAS, R.; CRISTINA GOMES CATUNDA DE VASCONCELOS, F. **SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA: O USO DO PROGRAMA AVOGADRO ® COMO FERRAMENTA AUXILIAR NO ENSINO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS** Computer Simulation In Chemical Teaching: The Use Of The Avogadro ® Program As Aid Tool In Chemical Teaching, 2020.

CRISTINA, P.; MENDONÇA, C.; DA, R.; JUSTI, S. **MODELAGEM NO ENSINO DE LIGAÇÃO IÔNICA COM ÊNFASE EM ASPECTOS ENERGÉTICOS: EVIDÊNCIAS DE APRENDIZAGEM**, 2007.

SILVA, R. A.; VASCONCELOS, F. C. G. C. **Softwares de simulação no ensino de química: uma perspectiva através do m-learning** RESUMO, 2021.

GULLITH, P.; DANTAS, M. **UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA BACHARELADO EM FÍSICA**, 2023.

NiNa.Az. “RaiodevanDerWaals.” www.wikidata.ptPt.nina.az, 1 Oct. 2023, www.wikidata.ptpt.nina.az/Raio_de_Van_der_Waals.html. Accessed 10 Mar. 2024.

ANEXOS

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
# Parâmetros para o potencial de Lennard-Jones do hidrogênio
#[H2, Li2, Ni2]
energia_de_ligacao = [435.8, 105.0, 944.9]
raio_van_der_waals = np.array([120.0, 182.0, 163.0]) # Distância para a qual o potencial é zero em
Angstroms
sigma_ligacoes = raio_van_der_waals*2/100 #pm
# Função do potencial de Lennard-Jones
def lennard_jones(r, epsilon, sigma):
    # Evita divisão por zero
    r = np.maximum(r, 1e-10)
    return 4 * epsilon * ((sigma / r)**12 - (sigma / r)**6)
# Definindo o intervalo de distâncias em Angstroms
r = np.linspace(0.1, 10, 1000)
# Plotando o gráfico
plt.figure(figsize=(8, 5))
i = 0
V = lennard_jones(r, energia_de_ligacao[i], sigma_ligacoes[i])
plt.plot(r, V, label = "LIGAÇÃO 1 (H2)")
plt.axhline(0, color='black', linestyle='--')
plt.axvline(sigma_ligacoes[i], color='grey', linestyle='--')
i = 1
V = lennard_jones(r, energia_de_ligacao[i], sigma_ligacoes[i])
plt.plot(r, V, label = "LIGAÇÃO 2 (Li2)")
plt.axhline(0, color='black', linestyle='--')
plt.axvline(sigma_ligacoes[i], color='grey', linestyle='--')
i = 2
V = lennard_jones(r, energia_de_ligacao[i], sigma_ligacoes[i])
plt.plot(r, V, label = "LIGAÇÃO 3 (Ni2)")
plt.axhline(0, color='black', linestyle='--')
plt.axvline(sigma_ligacoes[i], color='grey', linestyle='--')
plt.ylim(-1000, energia_de_ligacao[i])
plt.legend()
plt.grid()
plt.xlabel('Distância (100pm)')
plt.ylabel('Energia Potencial (kJ/mol)')
plt.title('Potencial de Jones')
plt.show()
```