

MIT**1ª MOSTRA
DE INOVAÇÃO
E TECNOLOGIA
SÃO LUCAS**

A INFLUENCIA DOS ASPECTOS GEOMETRICOS MOLECULARES EM MACRO CORPOS

**Pedro Henrique Mendes SIMOES^{1*}; Diego Uilian da Silva PERES¹; Sleyner
Carvalho BARBOSA¹; Rafael MOREIRA¹**

1. Centro Universitário São Lucas, Porto Velho, Rondônia, Brasil.

*Autor correspondente: simoesengenharia23@gmail.com

O objetivo do trabalho estudo, compreende estudar a geometria de ligações molécula-átomo e molécula-molécula, por meio de artifícios matemáticos e físicos, afim de compreender o fenômeno a estabilidade das ligações e suas aplicações em materiais de construção. Foi BOHR (1865-1962), o responsável por descrever uma teoria atômica que condissesse com os padrões de eletricidade e magnetismo, bem como explicar fenômenos como as orbitas de energia. Ademais, BORH (1865-1962) foi responsável pelo início da mecânica quântica, a qual estuda as leis físicas de estruturas atômicas. Seu modelo gerou uma quebra de paradigmas, pois, satisfatoriamente explicava fenômenos que antes, outros modelos não conseguiam, pois explicava corretamente os espectros atômicos, e correspondia com as equações eletromagnéticas de Maxwell mostrando, mostrando que elétrons conseguiam “migrar” entre camadas ao ganhar ou perder energia, e ao realizar tal feito emitiam, em formado de onda, o que hoje é conhecido como “fóton”, mas na época foi denominado de “quanta”. O enfoque em DALTON (1766-1844), deu-se, pois, em sua teoria arcaica, afirmou que átomos se uniam, ou, como diz a química, ligavam-se e esse fenômeno fisicoquímico é o responsável pela geração de moléculas, que são composições de dois ou mais átomos em uma estrutura geometricamente estável. E nessas estruturas é capaz observar que, a geometria influencia diretamente em sua estabilidade, bem como fatores microscópicos como o compartilhamento de elétrons ou doação desses, a energia da ligação e redução de forças tensionantes, que, quando suficientemente fortes, comprometem a estabilidade da molécula formada. Certamente, um exemplo de estrutural molecular forte é a do composto orgânico aromático Benzeno, de fórmula molecular C_6H_6 . Esse composto tem seus átomos de carbono ligados em formato hexagonal, com cerca de 120° graus de abertura. Tal organização geométrica é essencial para reduzir a

MIT**1ª MOSTRA
DE INOVAÇÃO
E TECNOLOGIA
SÃO LUCAS**

tensão entre as ligações além de prover estabilidade. De certa maneira, moléculas também se unem, formando substancias simples, quando apenas há presença de um tipo de molécula ou compostas, com dois ou mais tipos. Além disso, ainda ocorre que, a geometria da ligação molécula-molécula é um fator que influencia diretamente na estabilidade física do composto, quando este se encontra na forma sólida a temperatura e pressão normais. Assim, é afirmativo que, instabilidades moleculares geram instabilidade. Um exemplo, da instabilidade molecular ocorre no vidro, composto formado majoritariamente pelo dióxido de silício (SiO_2) – IUPAC (International union of pure and applied chemistry) -, que é uma molécula oxigenada e que em altas temperaturas funde-se e forma o vidro, empregado no dia a dia para proteção de intempéries externas como o frio e chuva. Entretanto, devido a maneira desuniforme com a qual as moléculas de dióxido de silício unem-se, tornam o vidro um composto de baixa resistência a tensão, dureza (que na escala de Moh é cerca de 5.5) e, portanto, facilmente quebradiço devido a sua geometria. Em comparação, o dióxido de silício também é um composto majoritário no cristal de quartzo, o qual apresenta, na escala de Moh, dureza 7,0, devido a sua geometria molecular, que, dura anos para se formar. O fenômeno descrito onde dois compostos compartilham da mesma matéria química mas destoam geometricamente é chamado alotropia. Além do silício, elementos como o oxigênio, carbono e fosforo. Utilizando a geometria para a geração de materiais de construção, seria possível produzir materiais de construção mais rígidos, com átomos que formam entre si ligações iônicas e covalentes, e moléculas que se unem a partir de ligações como ponte de hidrogênio e a força de London. Além disso, a formação de estruturas moleculares que remetem a geometria gera mais estrutura para os compostos. Através de revisões de literatura e aplicações de conceitos matemáticos e físicos, tem como objetivo principal, estudar as características e as influências da geometria molecular nos macros compostos, como exemplificado pelo vidro e quartzo, além de aplicar esses conceitos a o estudo de materiais de construção, visando melhor aproveitamento do conteúdo e a geração de novos materiais. Logo, na visão do supradito, é visível que a estrutura e organização das moléculas influencia diretamente em fatores como a estabilidade dos corpos, logo,

MIT

1ª MOSTRA
DE INOVAÇÃO
E TECNOLOGIA
SÃO LUCAS



estudando essas características seria possível gerar materiais de construção mais resistentes. **Agradecimentos:** Todos do grupo agradecem a professora dr^a. Juliana Cougo pela participação e auxílio no trabalho.

PALAVRAS-CHAVE: Estrutura molecular. Geometria molecular. Materiais de construção.