**Geometria molecular**

Acede à simulação *Molecule Shapes*, do repositório PHET da Universidade do Colorado: <https://phet.colorado.edu/pt/simulation/molecule-shapes>

**Tarefa 1**

Acede ao separador *Model* e seleciona a opção *Show Bond Angles.*

Caso 1: Moléculas com dois átomos

Cria uma molécula com dois átomos. Conclui completando as seguintes afirmações:

Qualquer molécula com dois átomos (iguais ou diferentes), apresenta geometria \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Caso 2: Moléculas com três átomos

* Sem pares de eletrões não ligantes no átomo central

Cria uma molécula com três átomos sem pares de eletrões não ligantes no átomo central. Conclui completando as seguintes afirmações:

Na ausência de eletrões não ligantes no átomo central, qualquer molécula com três átomos apresenta geometria \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. O seu ângulo de ligação é de \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

* Com pares de eletrões não ligantes no átomo central

Cria uma molécula com três átomos com um par de eletrões não ligantes no átomo central. Compara o ângulo de ligação dessa molécula com outra também com três átomos mas dois pares de eletrões não ligantes no átomo central. Conclui completando as seguintes afirmações:

Na presença de eletrões não ligantes no átomo central, a geometria de uma molécula com três átomos será \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. O valor do do ângulo depende dos raios atómicos dos átomos envolvidos e da quantidade de pares de eletrões não ligantes no átomo central. Para comprimentos de ligação similares, maior número de eletrões não ligantes resulta num ângulo de ligação \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Caso 3: Moléculas com quatro átomos

* Sem pares de eletrões não ligantes no átomo central

Cria uma molécula com quatro átomos sem pares de eletrões não ligantes no átomo central. Conclui completando as seguintes afirmações:

Na ausência de eletrões não ligantes no átomo central, qualquer molécula com quatro átomos apresenta geometria \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. O seu ângulo de ligação é de \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

* Com pares de eletrões não ligantes no átomo central

Cria uma molécula com quatro átomos com um par de eletrões não ligantes no átomo central. Compara o ângulo de ligação dessa molécula com outra também com quatro átomos mas dois pares de eletrões não ligantes no átomo central. Conclui completando as seguintes afirmações:

Na presença de eletrões não ligantes no átomo central, a geometria de uma molécula com quatro átomos será \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. O valor do do ângulo depende dos raios atómicos dos átomos envolvidos e da quantidade de pares de eletrões não ligantes no átomo central. Para comprimentos de ligação similares, maior número de eletrões não ligantes resulta num ângulo de ligação \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Caso 4: Moléculas com cinco átomos

Cria uma molécula com cinco átomos sem pares de eletrões não ligantes no átomo central. Conclui completando as seguintes afirmações:

Na ausência de eletrões não ligantes no átomo central, qualquer molécula com cinco átomos apresenta geometria \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. O seu ângulo de ligação é de \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

**Tarefa 2**

Acede agora ao separador *Real Molecules* e seleciona a opção *Show Bond Angles.*

Completa a tabela seguinte e confirma as tuas previsões observando cada uma das moléculas na simulação que estamos a usar:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Molécula** | **Nº de átomos** | **Nº de pares de eletrões não ligantes no átomo central** | **Geometria molecular** |
| CH4 |  |  |  |
| NH3 |  |  |  |
| H2O |  |  |  |
| CO2 |  |  |  |

Em resumo:

A geometria molecular depende essencialmente das interações eletrostáticas entre os eletrões de valência dos átomos que estabelecem as ligações formando a molécula.

Os ângulos que as ligações estabelecem entre si, para que a molécula atinja o estado de energia mínima, definem a **geometria da molécula**. A estabilidade da molécula depende do equilíbrio entre as repulsões entre pares de eletrões de valência. O esquema seguinte representa, por ordem crescente, a intensidade da força elétrica repulsiva entre pares de eletrões na molécula:

Pares não ligantes com pares não ligantes

Pares não ligantes com pares ligantes

Pares ligantes com pares ligantes

**Polaridade de moléculas**

**Tarefa 3**

Uma ligação covalente apolar ocorre quando há dois átomos \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ envolvidos na ligação química. Uma molécula diatómica homonuclear é \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. Um exemplo deste tipo de moléculas é \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Uma ligação covalente polar ocorre quando há dois átomos \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ envolvidos na ligação química. Uma molécula diatómica heteronuclear é \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_. Um exemplo deste tipo de moléculas é \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Para moléculas com mais de dois átomos, há que avaliar a distribuição global da carga elétrica dessa molécula. Usa o simulador *Molecule Shapes* para visualizar de novo as moléculas da tarefa 2, avalia a respetiva distribuição global da carga elétrica e classifica-as em polar ou apolar.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Molécula** | **CH4** | **NH3** | **H2O** | **CO2** |
| **Polaridade** |  |  |  |  |

Bom trabalho!