

ROTEIRO PARA UTILIZAÇÃO DO KIT ALOTROPANDO EM 3D

1. ALOTROPIA

Foi o barão Jon Jacob Berzelius que introduziu o conceito de alotropia na Química.

Alotropia é a capacidade que um elemento químico tem de formar mais de uma substância simples diferente, que são chamados de variedades alotrópicas ou alótropos.

A diferença entre as variedades alotrópicas pode ocorrer por dois motivos principais: à **quantidade de átomos** (atomicidade) e pelo **arranjo cristalino** (maneira como átomos estão ligados entre si).

Formam alótropos os seguintes elementos: carbono, oxigênio, fósforo, enxofre e estanho.

2. CARBONO

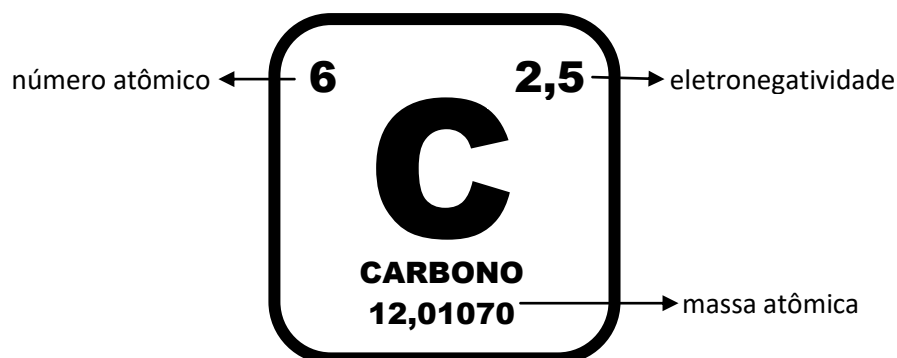
Seu nome é derivado do latim *carbo*, que significa carvão ou brasa. Na forma de carvão, o carbono é conhecido desde a pré-história.

Elemento químico localizado no segundo período e no grupo XIV da tabela periódica. Sua abundância na terra, 0,025%, é considerada pequena, quando comparada a abundância de outros elementos químicos como por exemplo, o Oxigênio (aproximadamente 50%) e o Cálcio (4%).

Mas o que fascina nesse elemento é que mesmo com essa pequena abundância, ele forma mais substâncias químicas que todos os outros elementos juntos.

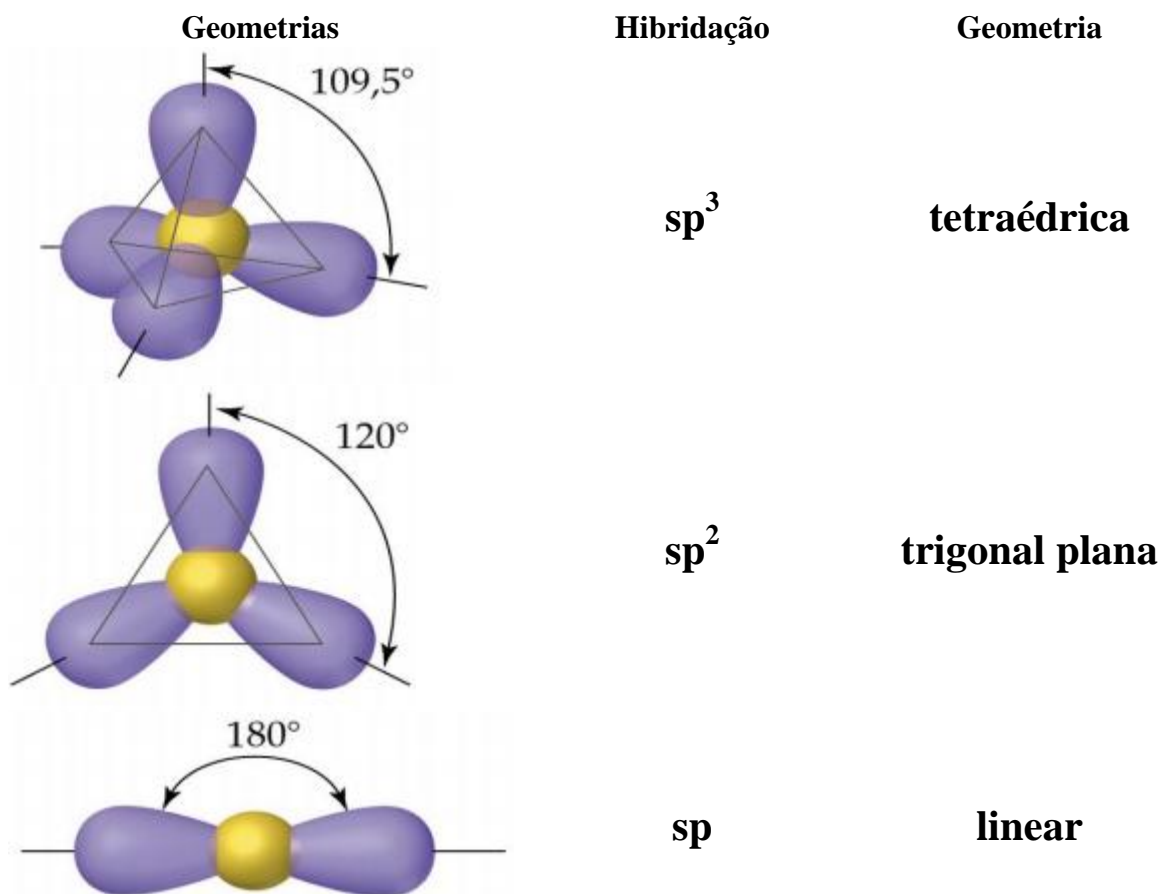
Ocorre na natureza com dois isótopos estáveis, o carbono-12 (^{12}C), que é o mais abundante, 98,93%, e o carbono-13 (^{13}C) com abundância de 1,07%. Possui o isótopo carbono-14 (^{14}C), que é instável e tem uma abundância muito pequena, $<10^{-5}\%$.

Em 1961, o isótopo ^{12}C foi selecionado para ser o padrão para cálculo das massas atômicas de todos os elementos, substituindo o oxigênio.



A configuração eletrônica original do Carbono é $1s^2 2s^2 2p^2$, correspondendo a quatro elétrons de valência (dois no orbital 2s e outros dois em dois orbitais 2p), e quatro orbitais de valência (um orbital 2s e três orbitais 2p). Tal configuração permite que três diferentes tipos de hibridizações possam ser realizadas:

Figura 1: Relacionando as hibridizações com as e as geometrias do átomo de carbono


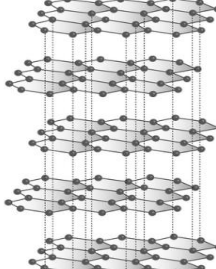
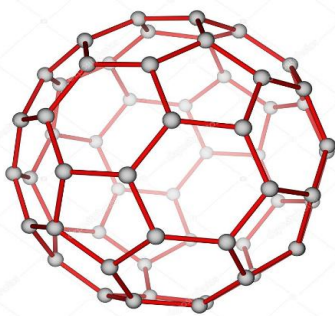
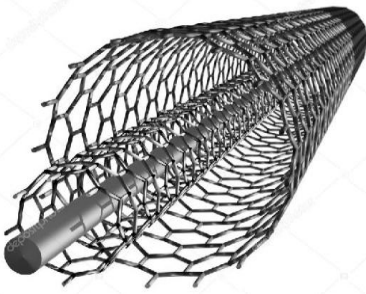
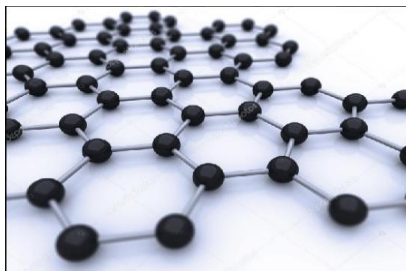


Fonte: <http://www.ufjf.br/quimica/files/2015/06/aula-11-Quimica-Fundamental-2019-3.pdf>

3. OS ALÓTROPAS DO CARBONO

A diferença entre os alótropos do carbono se dá pelo tipo de hibridização e de ligação química, pela forma como os átomos se organizam e pelas dimensões de cada estrutura.

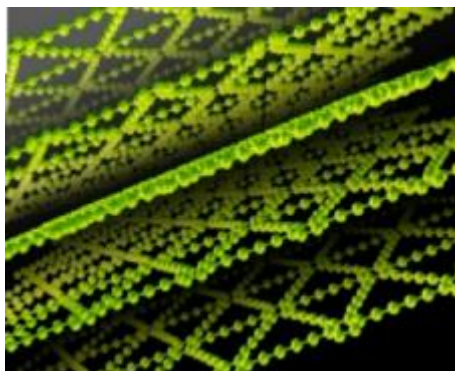
Quadro 1: Alótropos do carbono presentes no KIT ALOTROPANDO EM 3D e suas características

| ALÓTROPOS | CARACTERÍSTICAS | ESTRUTURAS QUÍMICAS | Premio Nobel |
|-----------|---|--|---|
| Diamante | Formado por átomos de carbono com hibridação sp^3 . |  | |
| Grafite | Formado por átomos de carbono com hibridação sp^2 . |  | |
| Fulerenos | Os 60 átomos de Carbono com hibridização sp^2 estão ligados uns aos outros formando uma estrutura circular, possível de ser atingida através da alternância de pentágonos (12) e hexágonos (20) |  | R. Crul, H. Kroto e R. Smalley receberam o Prêmio Nobel de Química em 1996 pela descoberta do fulereno. |
| Nanotubos | Suas estruturas são resultantes do enrolamento de uma folha de Grafeno, formando tubos ocos com diâmetros de alguns poucos nanômetros. Os átomos de carbono tem hibridação sp^2 . |  | |
| Grafeno | É o bloco de construção básico para as nanoestruturas de Carbono, sendo a unidade básica com espessura de um único átomo de carbono sp^2 . |  | Andre K. Geim e Kostantin Novoselov receberam o premio Nobel de Física de 2010, por isolar um único plano da grafite. |

As pesquisas em torno dos alótropos do carbono, devido a grande funcionalidade dos mesmos, evoluíram muito nas últimas duas décadas e as sínteses de outros alótropos têm sido propostas.

O alótropo grafidiino teve a sua síntese apresentada em 2017. Este alótropo tem estrutura plana e é composto por carbonos com hibridações sp^2 e sp .

Figura 2: Fotografia e microscopia eletrônica de varredura (SEM) de um filme do grafidiino de área grande.



JIA, Zhiyu et al. Synthesis and Properties of 2D Carbon Graphdiyne. *Accounts of chemical research*, v. 50, n. 10, p. 2470-2478, 2017.

Em agosto de 2019 foi descoberto mais um alótropo do carbono, o C_{18} , sua estrutura é um ciclo de 18 carbonos com hibridação sp .

Figura 3: Estrutura química do ciclo de C_{18} .



<https://francis.naukas.com/2019/08/20/ciclo18carbono-nuevo-alotrope-del-carbono-con-18-atomos-en-anillo/>.

4. IMPRESSÃO 3D

A maioria dos kits de modelos comerciais tem limitações na variedade de estruturas moleculares que eles são capazes de representar. Estes se destacam em representar uma classe ou grupo de estruturas químicas, mas não conseguem fornecer uma técnica capaz de fabricar uma grande variedade de estruturas químicas.

A impressão 3D é um processo moderno de fabricação aditiva que pode superar as limitações acima mencionadas nas construções de modelos moleculares. Na impressão 3D, o objeto é construído em

uma série de camadas transversais fundidas. O processo é aditivo, resultando em peças com mínimas restrições. Formas requintadas de uma peça podem ser prontamente produzidas com impressão 3D.

No contexto da fabricação de modelos moleculares, a impressão 3D elimina o processo muitas vezes tedioso da combinação de aditivos de peças individuais como esferas e hastes em ângulos específicos e combinações. Com a impressão 3D, moléculas podem ser criadas em uma única peça diretamente de um arquivo de design 3D digital, simplificando bastante processo de fabricação de modelos moleculares.

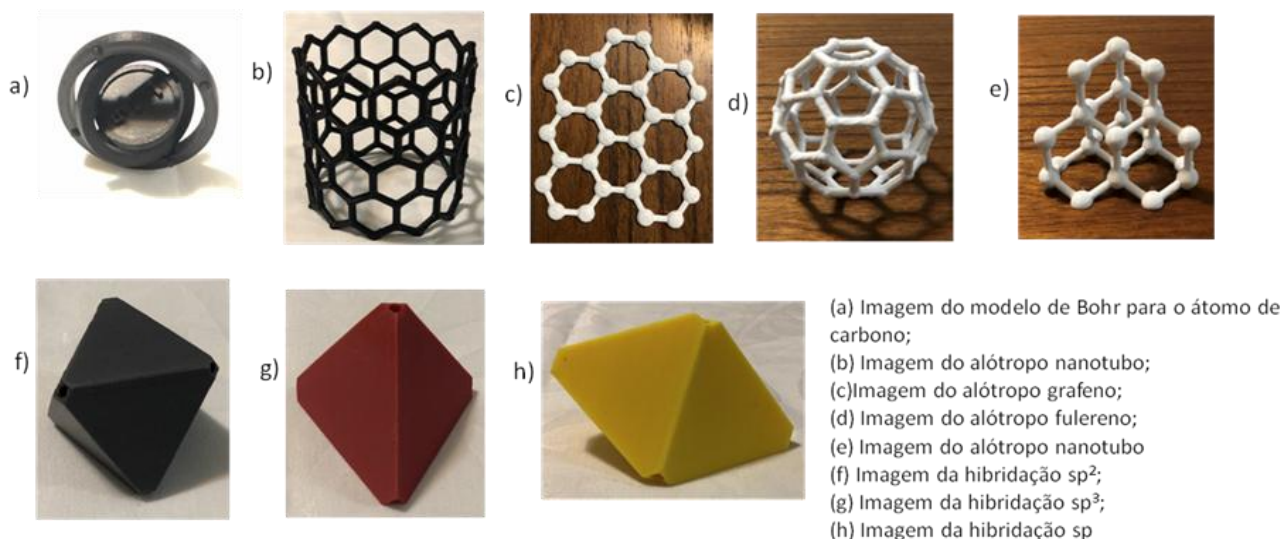
5. KIT ALOTROPANDO EM 3D

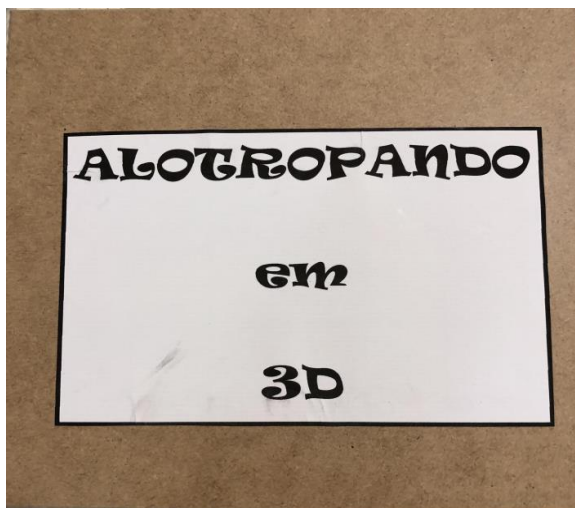
A visualização espacial das moléculas pode ser um ponto fundamental para auxiliar o ensino e as explicações envolvidos nesta Ciência.

Vários autores citam que a facilidade no entendimento de alguns conceitos químicos se deve à melhor visualização em três dimensões das estruturas, seguida de uma correta manipulação mental dessas (DE FARIAS et al., 2015). Além disso, a manipulação das peças permite a transição entre as representações microscópicas, simbólicas e macroscópicas com mais eficiência.

Além disso, o tema alotropia dificilmente é abordado nas escolas estaduais e conseqüentemente a importância do estudo dos alótropos passa despercebida pelos alunos em todas as séries do EM. Os fatores citados foram o incentivo para a elaboração do kit que recebeu o nome ALOTROPANDO EM 3D, que é composto de alguns alótropos do carbono e algumas peças geométricas, que representam as hibridações do carbono, todas impressas em 3D.

Figura 4: Peças que compõem o KIT ALOTROPANDO EM 3D





O material utilizado para impressão das peças foi o acrílonitrila butadieno estireno (ABS), por apresentar as seguintes características: preço acessível; alta resistência e durabilidade; resistente a altas temperaturas e alta velocidade de impressão.

A tabela a seguir apresenta dados da impressão das peças do KIT ALOPRANDO EM 3D.

Tabela 1: Dados da impressão das peças que compõem o KIT ALOPRANDO EM 3D

| Peça | Duração da impressão (minutos) | Quantidade de material consumida na impressão (gramas) |
|---------------------------------------|--------------------------------|--|
| Fulereo | 196 | 47,09 |
| Grafeno | 46 | 9,21 |
| Diamante | 133 | 17,35 |
| Nanotubo | 202 | 45 |
| Modelo de Bohr para o carbono | 92 | 11,24 |
| Forma geométrica da hibridação sp^3 | 64 | 23,92 |
| Forma geométrica da hibridação sp^2 | 193 | 41,45 |
| Forma geométrica da hibridação sp | 172 | 38,13 |

Vale ressaltar que a impressão das peças demanda alguns cuidados como não permitir que a impressão ocorra sem a supervisão, pois pode ocorrer super aquecimento do bico e causar um incêndio e não parar a impressão durante o processo pois a peça será totalmente inutilizada.

Para uma melhor compreensão e aproveitamento por parte dos alunos, deve-se imprimir pelo menos duas peças de cada hibridação, para estimular interesse dos alunos a criar novas estruturas químicas.

6. APLICAÇÃO DO KIT ALOTROPANDO EM 3D

Para uma boa compreensão dos temas abordados neste roteiro, alguns conteúdos são pré-requisitos: modelos atômicos; estrutura atômica e distribuição eletrônica em ordem de energia.

Para o desenvolvimento desta metodologia, foram necessárias seis semanas de aula, ou seja, 12 tempos de 50 minutos.

Os temas: distribuição eletrônica em orbitais, ligações covalentes representadas pelo modelos de Bohr e utilizando os orbitais atômicos, hibridação e alotropia não fazem parte do currículo mínimo de Química sugerido pela Rede Estadual.

Abaixo a série de atividades realizadas até a aplicação final do KIT ALOTROPANDO EM 3D.

Quadro 2: Descrição resumida das atividades propostas para a aplicação do KIT ALOTROPANDO EM 3D

| Aula | Tema |
|------|--|
| 1 | Aula expositiva – Revisão do modelo de Bohr e apresentação da distribuição eletrônica em orbitais, com apresentação das formas dos orbitais para o átomo de carbono. |
| 2 | Aplicação da Atividade 1 – avaliação qualitativa dos conceitos: distribuição eletrônica e representação das ligações através dos orbitais |
| 3 | Aula expositiva – o átomo de carbono e as suas quatro ligações. |
| 4 | Aula expositiva – Alotropia e alótropos do carbono. |
| 5 | Aplicação do KIT ALOTROPANDO EM 3D. |
| 6 | Atividade 2 – avaliação quantidade dos conceitos abordados nas oito aulas. |

As fichas utilizadas em cada aula estão anexadas ao final deste roteiro.

- ☞ Ficha 1 – Aula expositiva – Revisão do modelo de Bohr e apresentação da distribuição eletrônica em orbitais, com apresentação das formas dos orbitais para o átomo de carbono.
- ☞ Ficha 2 – Atividade 1 – avaliação qualitativa dos conceitos: distribuição eletrônica e representação das ligações através dos orbitais.

Nesta aula os alunos podem ser divididos em grupo e utilizarem como consulta a Ficha 1. Se possível, forneça para cada grupo um compasso e uma régua para facilitar a elaboração dos desenhos.

As moléculas representadas pelos grupos foram: NF_3 , NH_2Cl , NH_3 , NHCl_2 , OCl_2 , PCl_3 , PH_3 , PH_2Cl , PHCl_2 , SCl_2 , H_2S e SF_2 .

- ☞ Ficha 3 – Aula expositiva – o átomo de carbono e as suas quatro ligações.
- ☞ Ficha 4 – Aula expositiva – Alotropia e alótropos do carbono.
- ☞ Ficha 5 – Aplicação do KIT ALOTROPANDO EM 3D.

Nesta aula os alunos podem ser divididos em grupos de acordo com a quantidade de KIT's ALOTROPANDO EM 3D impressos. Após manuseio das peças do KIT ALOTROPANDO EM 3D eles deverão estar aptos para responder as questões da ficha 5.

☞ Ficha 6 - Atividade 2 – avaliação dos conceitos abordados nas seis aulas.

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O uso do KIT ALOTROPANDO EM 3D, ratificou a importância do uso de materiais concretos na visualização dos conteúdos de alotropia e hibridação. A possibilidade de utilizar uma nova ferramenta, como a impressão 3D, relacionada com a apresentação dos alótropos do carbono, suas estruturas, a vasta gama de possibilidades de utilização destes alótropos em materiais do cotidiano, na medicina, na engenharia e em várias outras áreas, traz para sala de aula uma realidade ainda não conhecida pela maioria dos alunos, instigando-os a conhecer mais a fundo esses temas.

O roteiro é, portanto, altamente benéfico e adequado para uso em um ambiente escolar pois a impressão 3D é livre para usar e requer apenas uma conexão com a Internet e acesso a uma impressora 3D, não sendo necessária a familiaridade ou conhecimento de complexos softwares.

Espero, com a divulgação deste roteiro, contribuir para ampliação do conhecimento científico dos educadores e multiplicar a utilização da impressão 3D nas escolas de Ensino Médio.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

DE FARIAS, F. M. C.; DEL-VECCHIO, R. R.; CALDAS, F. R. R.; GOUVEIA-MATOS, J. A. de M. (2015). **Construção de um modelo molecular: uma abordagem interdisciplinar Química-Matemática no ensino médio**. Revista Virtual de Química, 7 (3), 849-863. Disponível em: www.uff.br/RVQ/index.php/rvq/article/download/888/498. Acesso em: 2/12/2019

Disponível em: https://prezi.com/bjdx7sf6ot_u/a-alotropia-dos-elementos/, acessado em 22 de dezembro de 2019

Disponível em: <https://pt.quora.com/Como-se-denominam-as-variedades-alotr%C3%B3picas-dos-elementos-qu%C3%ADmicos>, acessado em 22 de dezembro de 2019

Disponível em: <https://www.britannica.com/science/carbon-chemical-element>, acessado em 27 de dezembro de 2019

Disponível em: https://www.crq4.org.br/qv_variedades_alotropicas_carbono, acessado em 27 de dezembro de 2019

JIA, Zhiyu et al. Synthesis and Properties of 2D Carbon Graphdiyne. **Accounts of chemical research**, v. 50, n. 10, p. 2470-2478, 2017.

KAISER, Katharina et al. An sp-hybridized molecular carbon allotrope, cyclo [18] carbon. **Science**, v. 365, n. 6459, p. 1299-1301, 2019.

SCALFANI, Vincent F.; VAID, Thomas P. 3D printed molecules and extended solid models for teaching symmetry and point groups. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 8, p. 1174-1180, 2014.

ZARBIN, Aldo JG. **Coleção Química no Cotidiano, Carbono**, Volume 11. Sociedade Brasileira de Química- EditSBQ. Disponível em: <http://quid.s bq.org.br/wp-content/uploads/2019/05/SBQ-Cole%C3%A7%C3%A3o-Celebrando-a-Qu%C3%ADmica-vol11-carbono-FINAL-correto.pdf>, acessado em 28 de dezembro de 2019.

9. ANEXOS

Ficha 1 - Revisão do modelo de Bohr e apresentação da distribuição eletrônica em orbitais, com apresentação das formas dos orbitais para o átomo de carbono.

TEORIA DOS ORBITAIS

ORBITAIS \Rightarrow É a região onde a probabilidade de se encontrar um elétron é máxima.

SPIN \Rightarrow É o movimento de rotação do elétron. Devido ao spin, o elétron funciona como um pequeno ímã.

O PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO DE PAULI \Rightarrow afirma que não mais do que dois elétrons podem ocupar um orbital, e isso somente se eles tiverem spins opostos.

REGRA DE HUND (Máxima Multiplicidade) \Rightarrow Em um subnível, primeiramente, adicionar um elétron em cada orbital, com o mesmo spin do anterior.

SUBNÍVEIS E ORBITAIS

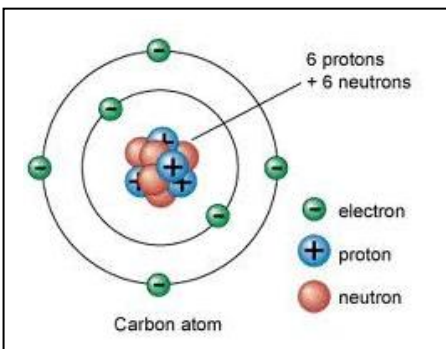
| Tipo de subnível | Valores de l | Valores de m | Quantidade de orbitais | Representação gráfica dos orbitais |
|------------------|----------------|---------------------------|------------------------|------------------------------------|
| s | 0 | 0 | 1 | |
| p | 1 | -1, 0, +1 | 3 | |
| d | 2 | -2, -1, 0, +1, +2 | 5 | |
| f | 3 | -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3 | 7 | |

DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA EM ORBITAIS

Primeiramente, devem-se preencher os orbitais de baixa energia e depois os de maior energia. Devem ser preenchidos antes os subníveis e depois os orbitais do subnível.

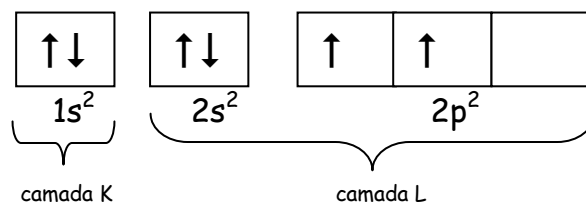
Nota Ao conjunto de regras e princípios utilizados na configuração eletrônica dá-se o nome de Princípio Aufbau ("construção", em alemão):

- 1) Ordem crescente de energia;
- 2) Princípio de Pauli;
- 3) Regra de Hund.

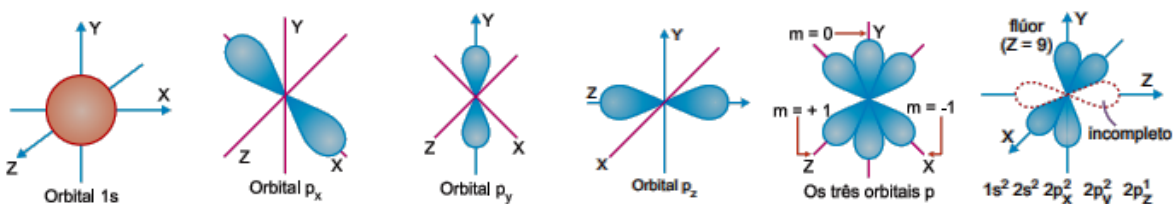


Distribuição em ordem crescente de energia: $1s^2 2s^2 2p^2$

Distribuição em orbitais:



FORMA E ORIENTAÇÃO DOS ORBITAIS NO ESPAÇO



A forma e a orientação dos orbitais s e p no espaço.

Ficha 2 - Avaliação qualitativa dos conceitos: distribuição eletrônica e representação das ligações através dos orbitais.

ATIVIDADE 1 – REPRESENTANDO A LIGAÇÃO COVALENTE PELO MODELO DE BOHR E

PELOS ORBITAIS MOLECULARES

Sua molécula é **NF₃**.

Você deverá apresentar:

- ✓ a distribuição em ordem crescente de energia de subníveis, em camadas e em orbitais para os átomos envolvidos.
- ✓ a representação da molécula no modelo de Bohr;
- ✓ a representação da molécula usando os orbitais participantes da ligação.

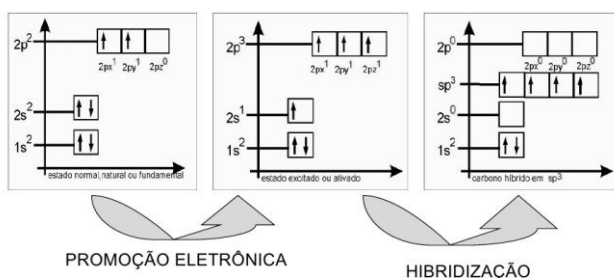
Ficha 3 – Aula expositiva – o átomo de carbono e as suas quatro ligações.

HIBRIDAÇÃO

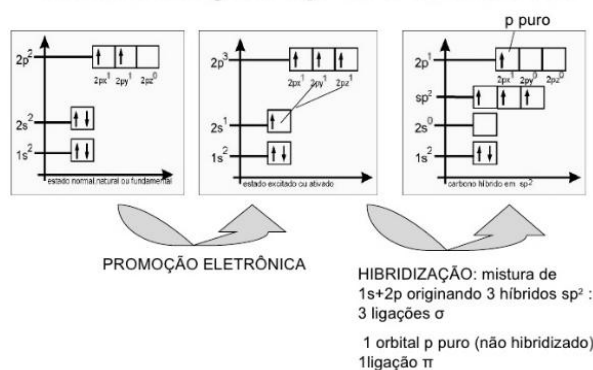
A hibridização consiste em uma espécie de mistura de orbitais atômicos puros, que se fundem, formando orbitais híbridos equivalentes entre si e diferentes dos originais.

Segundo o Modelo de Linus Pauling com os orbitais, a quantidade de ligações covalentes que um elemento realiza corresponde à quantidade de orbitais incompletos que ele possui. Por exemplo, o hidrogênio possui apenas um elétron, assim, o seu orbital s está incompleto, precisando de mais um elétron para ficar completo.

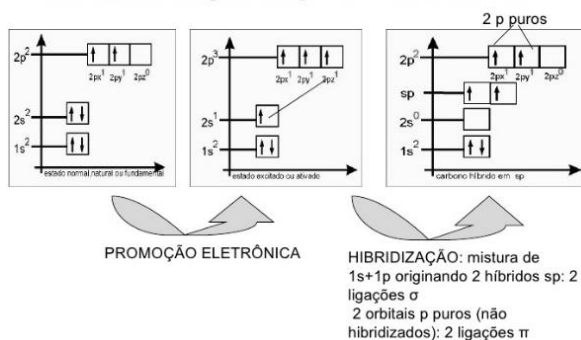
HIBRIDIZAÇÃO sp^3 DO CARBONO



HIBRIDIZAÇÃO sp^2 DO CARBONO



HIBRIDIZAÇÃO sp DO CARBONO



| Elemento | Hibridação | Geometria Molecular | Ângulo (orbitais híbridos) | Estrutura |
|----------|---------------|---------------------|----------------------------|------------------------|
| C | 0π sp^3 | tetraédrica | $109^{\circ}28'$ | sp^3 sp^2 sp |
| | 1π sp^2 | trigonal plana | 120° | |
| | 2π sp | linear | 180° | |
| B (Al) | sp^2 | trigonal plana | 120° | |
| Be | sp | linear | 180° | |

Fonte: <https://pt.slideshare.net/badalow/quimica333-hibridizacao-do-carbono-12566958>

Ficha 4 – Aula expositiva – Alotropia e alótipos do carbono.

ALOTROPIA

É a propriedade que alguns elementos químicos têm de formar uma ou mais substâncias simples diferentes. Formam alótipos os seguintes elementos: carbono, oxigênio, fósforo e enxofre.

A diferença entre as variedades alotrópicas pode ocorrer por dois motivos principais: à **quantidade de átomos** (atomicidade) e pelo **arranjo cristalino** (maneira como átomos estão ligados entre si).

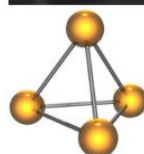
Oxigênio – forma alótipos por atomicidade.



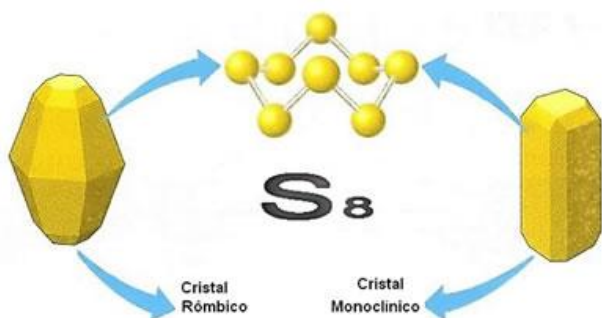
Fósforo – forma alótipos por atomicidade.

Fósforo branco (P_4)

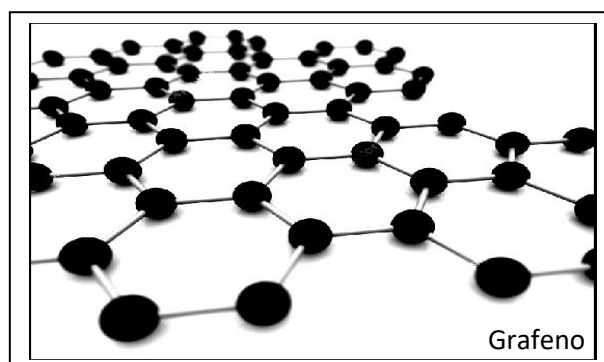
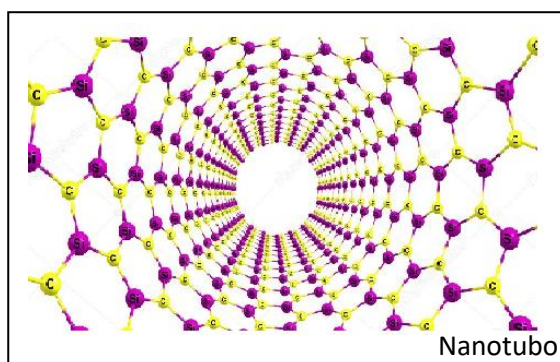
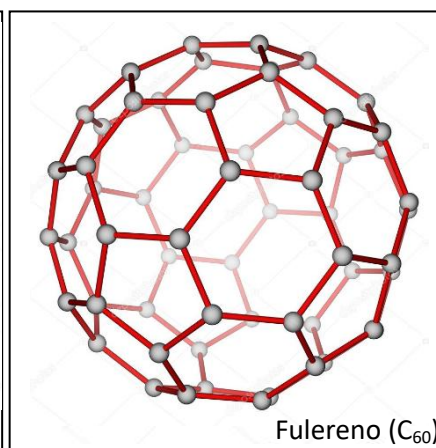
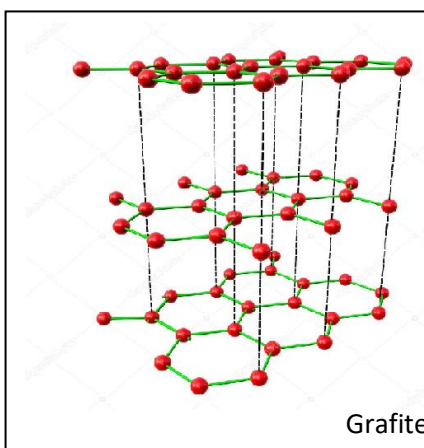
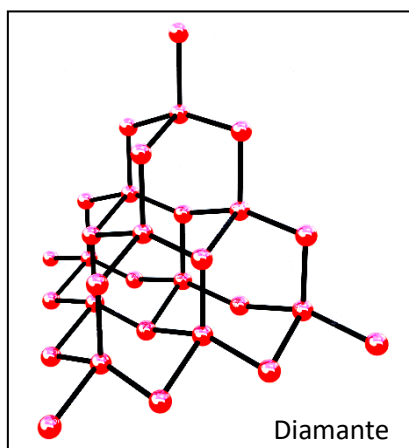
Fósforo vermelho (P_n)



Enxofre – alótipos por forma cristalina (S_8)



Carbono – alótipos por forma cristalina



ALOTROPANDO EM 3D

Após conferir as peças do kit que você recebeu, responda corretamente:

1) Qual o modelo utilizado para representar o átomo de carbono? _____

2) Faça a distribuição eletrônica do carbono em:

a) Ordem crescente de energia de níveis e subníveis \Rightarrow _____

b) Em camadas \Rightarrow _____

c) Em orbitais \Rightarrow _____

3) Relacione as formas geométricas com as geometrias e as hibridações do carbono.

cor da forma geométrica \leftrightarrow geometria do carbono \leftrightarrow hibridação

| | | | | |
|-------|-------------------|-------|-------------------|-------|
| _____ | \leftrightarrow | _____ | \leftrightarrow | _____ |
| _____ | \leftrightarrow | _____ | \leftrightarrow | _____ |
| _____ | \leftrightarrow | _____ | \leftrightarrow | _____ |

4) Indique a hibridação e geometria dos carbonos nos alótropos presentes no seu kit.

a) Fulereo \Rightarrow hibridação: _____; geometria: _____

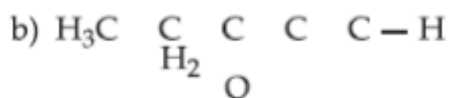
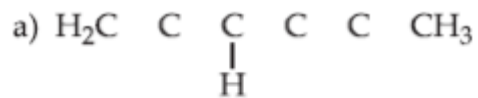
b) Diamante \Rightarrow hibridação: _____; geometria: _____

c) Nanotubo \Rightarrow hibridação: _____; geometria: _____

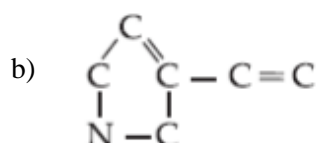
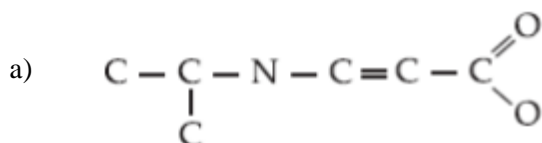
d) Grafeno \Rightarrow hibridação: _____; geometria: _____

Ficha 6 - Atividade 2 – avaliação dos conceitos abordados nas seis aulas.

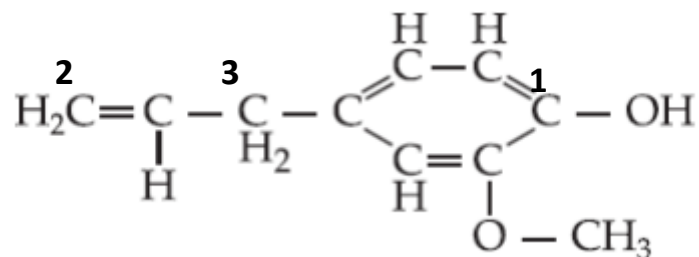
1. Completar as ligações que faltam, colocando simples, dupla ou tripla ligação.



2. Dadas as cadeias carbônicas, complete o octeto (as ligações que faltam) dos elementos utilizando hidrogênios.



3. No eugenol, composto de odor agradável de fórmula:



a) Indique os números de ligações sigma e pi. _____; _____

b) Forneça as hibridações dos carbonos numerados.

1- _____ 2- _____ 3- _____

4. Faça a distribuição em orbitais para os seguintes átomos:

a) ${}_{17}\text{Cl} \Rightarrow$

b) ${}_{20}\text{Ca} \Rightarrow$