

Explorando a Química com Modelos Moleculares 3D: Um Guia Didático para Professores

Prof. Dr. Paulo Henrique Guadagnini

Me. Rodrigo Monteiro Gusmão

Universidade Federal do Pampa

2024

1. Apresentação

Bem-vindo ao caderno didático "Explorando a Química com Modelos Moleculares 3D: Um Guia Didático para Professores". Este material foi cuidadosamente elaborado para proporcionar aos professores uma ferramenta inovadora e eficaz para o ensino de conceitos fundamentais da química relacionados à estrutura das moléculas e cristais. O guia didático descreve o passo a passo de como utilizar um conjunto de arquivos digitais de peças para compor um kit de modelo molecular físico montável, e que pode ser fabricado através de manufatura aditiva por impressão 3D. Apresentamos algumas sugestões de aplicações didáticas dos modelos moleculares 3D, e que poderão ser modificadas ou adaptadas conforme as demandas de cada professor.

A introdução da impressão 3D na educação tem proporcionado novas formas de abordarmos o ensino de ciências, especialmente a química. Modelos moleculares físicos montáveis, que podem ser impressos em 3D, oferecem uma maneira tangível e interativa de explorar estruturas e interações moleculares. Este caderno didático visa promover a integração dessa tecnologia ao ambiente escolar, facilitando a compreensão de conceitos complexos por meio de representações tridimensionais tangíveis.

Neste caderno, você encontrará uma variedade de tópicos e atividades que abordarão desde a preparação e impressão dos modelos até a sua aplicação prática em sala de aula. Inicialmente discutiremos uma introdução aos modelos moleculares e sua importância no ensino de química, além de conceitos básicos relacionados às estruturas atômicas e moleculares. Em seguida, apresentaremos um guia prático sobre a tecnologia de impressão 3D com a técnica de fabricação por filamento fundido (FFF), incluindo os princípios de funcionamento do equipamento, o fluxo de trabalho e os detalhes práticos que devem ser observados para impressão de qualidade. Em seguida, faremos uma discussão sobre como realizar a montagem de moléculas simples e complexas, utilizando os

modelos impressos. Na parte final deste caderno didático apresentaremos algumas sugestões de atividades práticas que integram os modelos moleculares ao currículo escolar, potencializando uma aprendizagem significativa e interativa.

Pretendemos que este caderno didático não seja apenas um guia técnico, mas também uma inspiração para que os professores inovem em suas práticas pedagógicas, tornando o ensino de química mais envolvente e acessível para todos os alunos. Através do uso de modelos moleculares 3D, esperamos fomentar a curiosidade científica, incentivar a experimentação e aprofundar a compreensão dos conceitos químicos.

Agradecemos por se juntar a nós nesta jornada educativa e esperamos que este caderno didático seja um recurso valioso em suas aulas de química. Vamos transformar a maneira como ensinamos e aprendemos química, tornando-a mais interativa, prática e divertida.

Boa leitura e bom trabalho!

2. Fundamentação

2.1 Modelos moleculares e o ensino de química

Segundo o filósofo francês Gaston Bachelard (BACHELARD, 2000), os modelos científicos não são, por definição, cópias exatas da realidade, mas construções abstratas que ajudam os cientistas a compreender fenômenos complexos. Ele vê os modelos como ferramentas cognitivas que mediam a relação entre teoria e observação. Esses modelos são, portanto, essencialmente simplificações e idealizações da realidade, projetadas para facilitar a compreensão de alguns aspectos de fenômenos naturais. Os modelos científicos funcionam como mediadores entre o mundo teórico e o mundo empírico, permitindo que os cientistas tratem fenômenos complexos, tornando-os mais fáceis de compreender, visualizar e modelar, e explorem fenômenos que ocorrem em escalas inacessíveis à observação direta, como os processos atômicos e moleculares.

Modelos científicos e modelos didáticos são conceitos relacionados e complementares. Os modelos científicos são utilizados por cientistas para prever, testar e modelar fenômenos naturais que são alvo de sua pesquisa científica. Por outro lado, os modelos didáticos podem ser considerados como representações simplificadas de conceitos, processos ou fenômenos físicos que auxiliam os estudantes a compreender ideias complexas através de analogias, simulações e representações virtuais ou físicas. Modelos didáticos desempenham um papel essencial no ensino de ciências, pois facilitam a transposição de conceitos abstratos para representações mais acessíveis e compreensíveis para os estudantes (Gilbert & Boulter, 2000). Enquanto os modelos científicos visam aprofundar o entendimento e obter novos conhecimentos, os modelos didáticos traduzem esses conhecimentos em formas compreensíveis, essenciais para uma transposição didática efetiva.

No contexto da química, os modelos moleculares físicos são exemplos de modelos didáticos. Eles são representações físicas das estruturas moleculares e atômicas que compõem a matéria, e podem auxiliar os estudantes a visualizar e compreender a organização tridimensional das moléculas, as ligações químicas entre átomos, e as variações estruturais que levam a diferentes propriedades químicas e físicas. O uso de modelos moleculares tem sido amplamente estudados como uma ferramenta eficaz para o ensino de química, proporcionando uma forma visual e tátil de entender estruturas complexas que são frequentemente difíceis de serem compreendidas através de descrições textuais ou representações bidimensionais (Cass & Rzepa, 2005).

Um exemplo de modelo molecular físico representando a molécula de etanol é apresentado na Figura 1. Neste exemplo, as esferas pretas representam os átomos de carbono, as brancas os átomos de hidrogênio, a vermelha o átomo de oxigênio, e os bastões brancos que conectam os átomos representam as ligações químicas covalentes. Este tipo de modelo molecular é conhecido como modelo de bolas e bastões.

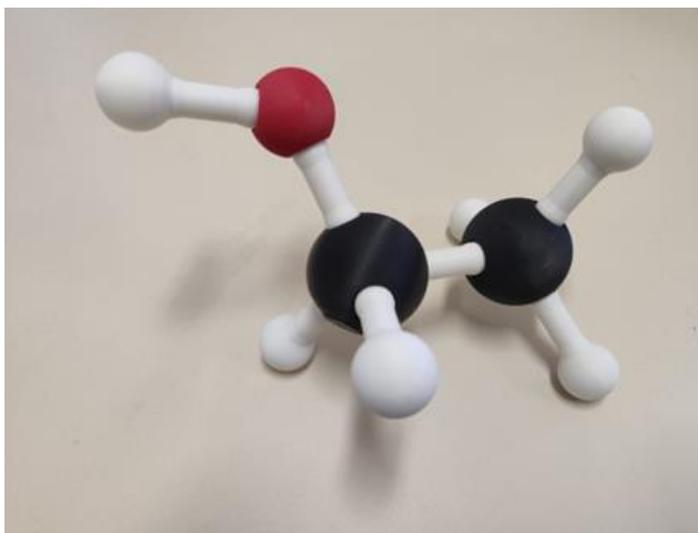


Figura 1 Modelo molecular da molécula de etanol

Os modelos moleculares permitem que os estudantes visualizem e manipulem representações físicas de estruturas envolvidas em conceitos químicos como a geometria molecular, hibridização, e isomeria, promovendo

uma compreensão mais eficiente do arranjo espacial dos átomos. O uso destes modelos potencializa o desenvolvimento de habilidades de raciocínio espacial, cruciais para a compreensão da orientação das moléculas no espaço. Essas habilidades são essenciais para o aprendizado de conceitos abstratos, como os envolvidos no estudo da estrutura molecular e isomeria.

O professor interessado em utilizar modelos moleculares no ensino de química deve, entretanto, atentar a algumas considerações importantes. Com apontado anteriormente para o caso dos modelos científicos, os modelos didáticos também não são desenvolvidos para descreverem exatamente a realidade com todas suas nuances. Portanto, os modelos didáticos, como os modelos moleculares físicos, apresentam limitações que o professor deve ter consciência. Uma destas limitações é a simplificação excessiva que é intrínseca a estes modelos, implicando na incapacidade de apresentar detalhes importantes sobre a natureza dinâmica das moléculas, mantendo o foco somente na sua estrutura, o que pode ser abordado através do uso complementar de simulações computacionais (de Jong & Van Joolingen, 1998). O comportamento das estruturas em reações químicas, interações intermoleculares, a interação eletrostática entre átomos, a distribuição da densidade eletrônica, e o movimento vibracional e rotacional não são contemplados nos modelos moleculares físicos, e normalmente exigem a aplicação complementar de modelos moleculares computacionais que contemplem a representação desejada. O cenário recomendado para aplicações didáticas de modelos moleculares físicos é aquele no qual o professor está interessado em abordar conceitos relacionados à estrutura molecular e cristalina, isomeria geométrica e ótica, ou outros detalhes que não dependam da dinâmica das estruturas moleculares.

O uso eficiente de modelos moleculares físicos em aplicações didáticas depende de um planejamento didático adequado. Um possível problema que o professor deve atentar na aplicação de modelos moleculares físicos é o do reforço de concepções científicas equivocadas, especialmente as ideias de que as moléculas são rígidas e que as ligações sempre têm

comprimentos e ângulos fixos, desconsiderando a flexibilidade e a dinâmica real das moléculas. Cabe enfatizar que muitos modelos moleculares disponíveis para impressão 3D, e também disponíveis comercialmente, não permitem a rotação livre em torno de ligações simples, ou permitem a rotação livre em torno de qualquer ligação, inclusive ligações duplas e triplas. Esta característica pode induzir a concepções equivocadas e inviabilizar a aplicação de tais modelos em atividades de ensino de conceitos de isomeria geométrica. Nos modelos moleculares físicos apresentados neste caderno didático, as ligações duplas foram projetadas de modo a não permitir a rotação em torno de seu eixo, ao contrário das ligações simples, tornando possível se desenvolver atividades para o ensino de conceitos de isometria geométrica, ótica e conformacional.

2.2 Representações químicas

Em 1982, o químico Alex H. Johnstone (JOHNSTONE, 1991) introduziu o conceito de que as representações na química podem ser categorizadas em três níveis distintos. O primeiro nível é descritivo e funcional, envolvendo a compreensão das propriedades e comportamentos das substâncias, e fornecendo uma visão macroscópica dos fenômenos químicos. O segundo nível é o atômico e molecular, que se aprofunda na estrutura da matéria. Ele explora a constituição das substâncias em termos de átomos e moléculas, revelando como as partículas se organizam e interagem para formar diferentes substâncias químicas. Este aspecto é vital para entender as reações químicas e as transformações que ocorrem em nível molecular. O terceiro nível é o representacional, que abrange as diversas formas de representar conceitos químicos, como fórmulas químicas estruturais, equações químicas, modelos tridimensionais de moléculas e diagramas. Estes três níveis de representações químicas, representados na Figura 2, que são chamados de (i) macroscópico e tangível, (ii) molecular e invisível e (iii) simbólico e matemático, são inter-relacionados, e a habilidade

de transitar entre estes níveis é de grande importância para o entendimento da química, sendo que modelos tridimensionais podem atuar como uma ponte eficaz entre esses níveis de representação (Treagust, Chittleborough, & Mamiala, 2003)..

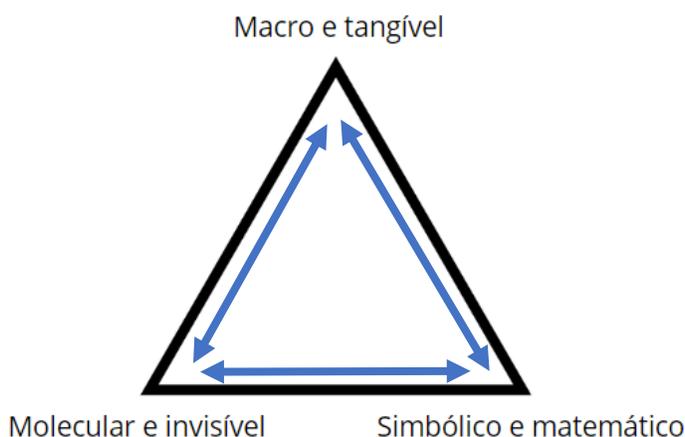


Figura 2 Triângulo de representações de Johnstone

Em métodos tradicionais de ensino de química, há uma maior ênfase no nível de representação simbólico e matemático, em que os alunos observam estruturas moleculares representadas em duas dimensões em livros, quadros ou telas de computador. Tais representações são geralmente abstratas e, por vezes, desafiadoras, especialmente quando aplicadas a temas como isomeria geométrica e ótica. Os modelos moleculares físicos podem ser considerados como uma forma de abordar a representação no nível molecular e invisível, e potencialmente facilitar a trânsito entre estes níveis. No contexto da isomeria, por exemplo, a capacidade de montar e desmontar os modelos moleculares para diferentes isômeros facilita a compreensão de como a disposição e orientação dos átomos influenciam as propriedades da molécula, e permite também a associação com as representações no papel na forma de fórmulas moleculares e outras representações químicas. Os modelos moleculares físicos atuam como uma ponte entre as representações simbólica e molecular-invisível, oferecendo uma abordagem mais concreta e intuitiva para conceitos químicos complexos.

3. Introdução à tecnologia de impressão 3D

3.1 Equipamento e processo de impressão

As impressoras 3D mais comuns em uso na atualidade utilizam o processo de manufatura aditiva por fusão de filamento fundido (FFF). Neste processo, os objetos tridimensionais físicos são criados adicionando-se um polímero fundido, camada sobre camada, de acordo com as instruções contidas em um arquivo digital. O processo utiliza um filamento de polímero, sendo os mais utilizados o ácido polilático (PLA) e acrilonitrila-butadieno-estireno (ABS). O filamento, que é armazenado em um rolo, é impulsionado por um sistema de aperto binário até a cabeça de impressão, que consiste em um bloco aquecido que funde o filamento a uma temperatura controlada. Na extremidade inferior da cabeça de impressão, o filamento é forçado a passar por um orifício de diâmetro reduzido que é comumente chamado de bico de impressão, e onde ocorre o processo de extrusão do polímero fundido. O material extrudado é depositado, camada por camada, pela cabeça de impressão que se move de acordo com a sequência de coordenadas definidas no arquivo digital.

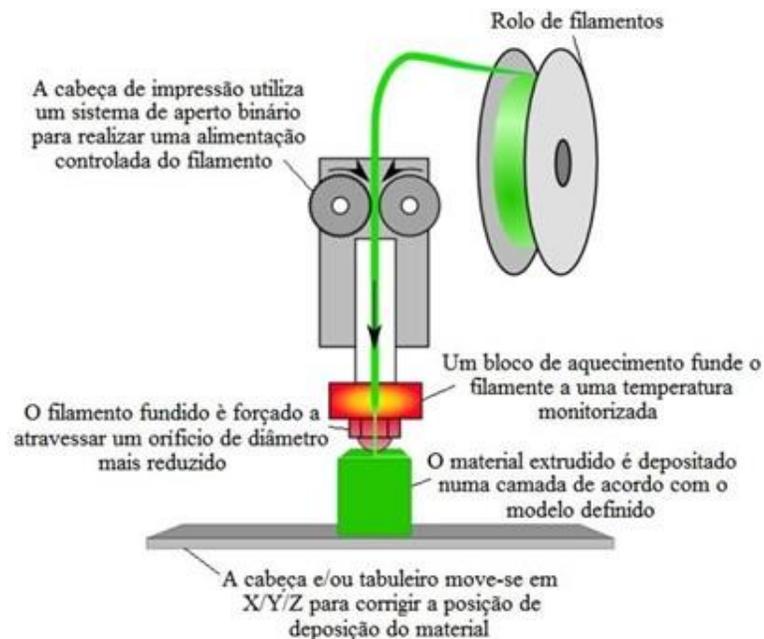


Figura 3 Diagrama esquemático dos componentes de uma impressora 3D que opera com o processo de fusão de filamento fundido

A Figura 3 mostra um esquema de funcionamento da impressora 3D com o processo de impressão por fusão de filamento fundido, com os seus diferentes componentes (rolo de filamentos, sistema de tração do filamento, cabeça de impressão, bico de impressão e a mesa de impressão). Além dos componentes indicados na Figura 3, a impressora 3D ainda utiliza um mecanismo motorizado para movimentação da cabeça de impressão e/ou da mesa de impressão, e possui uma estrutura para suportar os mecanismos. O gabinete da impressora pode ser aberto, como no modelo indicado na Figura 4a, ou fechado, como no modelo indicado na Figura 4b. As impressoras de gabinete fechado permitem a impressão de boa qualidade com filamentos como o de ABS, que necessitam de uma temperatura mais elevada, constante e homogênea durante a impressão para que não ocorram deformações na peça sendo impressa. Normalmente, as impressoras abertas são de custo mais baixo e são utilizadas para impressão com filamentos de polímero PLA, que fundem em temperaturas mais baixas e apresentam menor tendência a deformação durante a impressão.

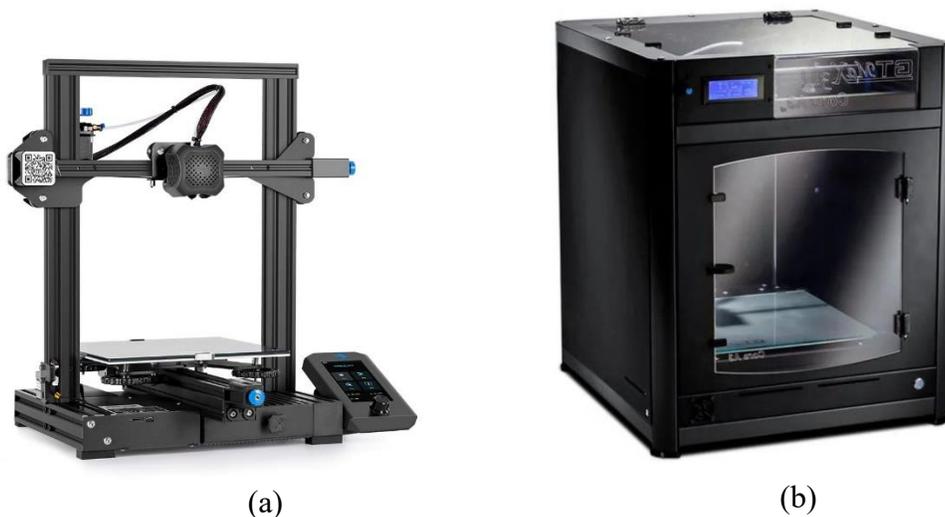


Figura 4 Modelos de impressoras 3D que operam com o processo fusão de filamento fundido do tipo (a) aberta e (b) fechada

3.2 Fluxo de trabalho para impressão 3D

O processo de impressão de um objeto físico em uma impressora 3D não é direto e simples como o da impressão de um texto em uma impressora comum. Para impressão 3D de um objeto, é necessário seguir um fluxo de trabalho apresentado na Figura 5.

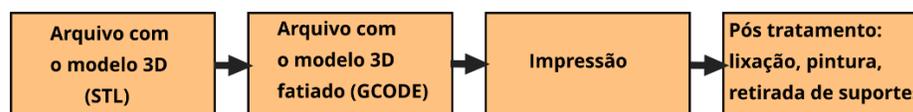


Figura 5 Fluxo de trabalho para impressão 3D de um objeto

Inicialmente, o modelo 3D da peça deve ser criado utilizando-se um aplicativo de projeto assistido por computador (CAD), ou obtido a partir de um repositório de modelos prontos. Neste caderno didático abordaremos a opção de obter o arquivo digital pronto a partir do repositório *Thingiverse*, que pode ser acessado a partir do endereço <https://www.thingiverse.com/>. Este é um dos repositórios mais populares de modelos 3D prontos e serve como uma plataforma comunitária onde usuários de todo o mundo podem compartilhar, explorar e baixar modelos 3D para impressão. *Thingiverse* é um repositório relevante para educadores, especialmente no campo da educação STEM (ciência, tecnologia, engenharia e matemática). Professores podem encontrar e utilizar modelos 3D para compor atividades práticas em sala de aula, como modelos anatômicos e peças para experimentos de física e química.

O arquivo gerado pelo aplicativo de CAD, ou obtido a partir de um repositório, normalmente é disponibilizado no formato digital STL ou OBJ, que descrevem a superfície do objeto utilizando uma malha de triângulos. Este tipo de arquivo não pode ser utilizado diretamente para impressão 3D, e necessita de um processamento por um aplicativo classificado como fatiador.

Na próxima etapa do fluxo de trabalho, usa-se um aplicativo fatiador que divide o objeto a ser impresso em camadas horizontais finas, que são o

plano de cada camada que a impressora irá depositar. Este processo inclui a conversão da geometria do modelo em um caminho que o extrusor (cabeça de impressão) seguirá para depositar o filamento fundido. Após o fatiamento, o aplicativo gera um arquivo do tipo GCode, que contém um conjunto de instruções que a impressora segue para criar o objeto. Este arquivo GCode contém comandos específicos para movimentos de eixos, controle de temperatura, extrusão de filamento, e demais parâmetros técnicos, sendo alguns específicos do modelo de impressora 3D que será utilizada.

No aplicativo de fatiamento, o usuário pode especificar parâmetros ajustáveis que irão refletir na qualidade e características físicas da peça a ser impressa, como a escala do modelo, a orientação do objeto na mesa de impressão, a resolução da impressão (altura da camada), o nível de preenchimento das estruturas internas das peças, as estruturas de suporte temporários para sustentação de partes do modelo e demais características que são específicas do modelo de impressora 3D em uso.

A etapa seguinte do fluxo de trabalho para impressão 3D consiste em iniciar a impressão do objeto. Antes de iniciar a impressão, o usuário deverá efetuar o procedimento de carregamento do filamento a ser utilizado na impressora 3D. Em seguida, é necessário aplicar um adesivo na mesa de impressão (na forma líquida ou de spray), para que o objeto a ser impresso permaneça fixo durante o processo de impressão. O arquivo no formato Gcode deve estar previamente salvo em um cartão SD, que deve ser inserido slot presente na impressora 3D. A partir dos controles no painel da impressora 3D, o usuário deve selecionar o arquivo salvo no cartão SD que contém o arquivo da peça a ser impressa, e em seguida iniciar a impressão. Esta etapa pode demorar desde algumas dezenas de minutos até dias, dependendo do tamanho e complexidade da peça a ser impressa.

Após a conclusão da impressão e a peça ter esfriado até próximo da temperatura ambiente, a peça deverá ser removida da mesa de impressão e, caso necessário, deverá ser submetida a um processo de tratamento pós-impressão. O pós-tratamento pode incluir: (a) lixação da superfície, no caso

de se desejar que ela fique mais lisa, (b) remoção de estruturas de suporte que o aplicativo fatiador pode incluir para viabilizar a impressão de alguns segmentos da peça, e (c) pintura das peças.

3.3 Impressão 3D na prática

Os autores deste caderno didático produziram um conjunto de quatro vídeos introdutórios sobre o uso de impressoras 3D FFF, com os endereços e QrCodes para acesso apresentados na Tabela 1. Estes vídeos demonstram o procedimento básico de operação da impressora 3D, o aplicativo fatiador e também algumas dicas práticas de manutenção da impressora 3D.

Para os usuários que não estão familiarizados com a impressão 3D, recomenda-se iniciar testando a impressão de peças de pequenas dimensões que podem ser baixadas do repositório *Thingiverse*. Somente com a prática da manipulação da impressora 3D e do aplicativo fatiador, o usuário adquirirá proficiência na impressão 3D, em especial com relação aos possíveis problemas que podem afetar a qualidade da impressão ou produzir falhas de impressão.

Sugerimos a seguinte lista de procedimentos básicos para impressão 3D com impressoras que usam fabricação com filamento fundido:

2) Preparação Inicial

- Verificar o equipamento, certificando-se de que a impressora 3D está em boas condições, limpa e com todos os componentes funcionando corretamente;
- Escolher o material de impressão. Selecione o filamento apropriado (PLA, ABS, PETG ou outro) conforme a necessidade do seu projeto e tipo de impressora a ser usada. Para impressoras de gabinete aberto recomenda-se usar PLA, e para impressoras de gabinete fechado pode ser usado PLA, ABS, PETG ou outro);
- Carregar o filamento. Carregue o filamento na impressora seguindo as instruções específicas do modelo. Nos modelos de impressora mais

simples, usualmente o carregamento do filamento é feito manualmente, enquanto em outros modelos este carregamento é automático e comandado através do painel frontal;

2. Obtenção do Modelo 3D

Obter o modelo 3D da peça usando um aplicativo de modelagem 3D para criar seu projeto, ou baixe um modelo de uma biblioteca online como a *Thingiverse*;

3. Preparação do Arquivo para Impressão

- Obtenção do aplicativo fatiador. O aplicativo fatiador que recomendamos é o Ultimate Cura, que pode ser baixado sem custo a partir do endereço <https://ultimaker.com/software/ultimaker-cura/>, ou a partir do QR Code apresentado na Figura 7. Podem ser utilizados outros aplicativos fatiadores, e o modo de operar é similar em todos eles.
- Abrir o arquivo do modelo 3D (geralmente com extensão .stl) no aplicativo fatiador para importar o modelo. Nesta etapa o aplicativo fatiador deverá apresentar uma visão 3D da peça sobre a mesa de impressão simulada;
- Ajustar as configurações de impressão básica no aplicativo fatiador:
 - Definir o perfil de configuração para o modelo específico de impressora que você está usando. Para a maioria dos modelos de impressora, o próprio aplicativo fatiador já vem com os perfis e basta selecionar o que corresponde à sua impressora. Caso o aplicativo fatiador não tenha o perfil para a sua impressora, é necessário baixar o arquivo do perfil do site do fabricante da sua impressora, e este arquivo deve ser importado no aplicativo fatiador;

- Altura da camada: Defina a altura da camada (geralmente 0,1mm a 0,3mm). A altura da camada irá definir a resolução da impressão, e quanto menor a altura da camada melhor será a qualidade da impressão, mas também implicará em uma impressão mais demorada;
- Densidade de preenchimento (infill): Configure a densidade do preenchimento interno (geralmente entre 10% e 30%). Uma maior densidade de preenchimento geralmente resulta em uma melhor resistência mecânica da peça, mas ao custo de um maior tempo de impressão e mais gasto de filamento;
- Ajuste da velocidade de impressão, temperatura do bico de impressão e da mesa de impressão. Nesta etapa é recomendado selecionar o tipo de filamento usado no perfil da impressora para que estes parâmetros sejam ajustados adequadamente. Opcionalmente pode-se alterar estes parâmetros manualmente, caso deseje-se fazer um ajuste fino na qualidade de impressão;
- Definir a orientação da peça. Suportes são estruturas temporárias que sustentam partes do modelo durante a impressão para evitar colapsos ou deformações. A necessidade de suportes depende do projeto do modelo e da sua orientação na plataforma de impressão. O aplicativo fatiador permite escolher a orientação da peça na mesa de impressão, e o usuário deverá experimentar diferentes orientações da peça de modo a minimizar a quantidade e complexidade de suportes. Na seção a seguir serão sugeridas as orientações recomendadas para impressão das diferentes peças que compõem o Kit de modelo molecular;
- Gerar o arquivo G-code. Execute o comando no aplicativo fatiador para gerar o arquivo G-code. Após a geração do arquivo G-code, o aplicativo deverá apresentar uma simulação

da peça impressa incluindo o os possíveis suportes. Se necessário, pode-se modificar a orientação da peça e outros parâmetros, e gerar um novo arquivo G-code. Após ajustados os parâmetros de impressão, salve o arquivo de impressão no formato G-code em um cartão de memória do tipo SD, que será a fonte de dados que serão interpretados pela impressora.



Figura 7 QR Code para download do aplicativo fatiador Ultimate Cura

4. Preparação da Impressora

- Nivelar a mesa de impressão para garantir uma boa adesão da primeira camada. O procedimento de nivelamento da mesa deve ser feito de acordo com o manual da impressora, sendo que em algumas impressoras o nivelamento é feito manualmente, e em outras o nivelamento é feito automaticamente antes de cada impressão.
- Aplicar um adesivo específico para impressão 3D na mesa de impressão para manter a peça fixa durante a impressão. Usualmente usa-se adesivos líquidos, que devem ser espalhados pela mesa de impressão, ou adesivos em spray.

5. Início da Impressão

- Carregue o arquivo G-code na impressora (via cartão SD) e comande o início da impressão através do painel frontal;
- Ao iniciar a impressão, monitorar a primeira camada observando-a para garantir que o filamento está aderindo bem

à mesa de impressão. Se a primeira camada impressa estiver defeituosa é recomendado abortar a impressão e efetuar um ajuste da altura do bico de impressão usando o painel frontal da impressora;

6. Durante a Impressão

- Supervisionar o processo, monitorando a impressão periodicamente para detectar qualquer problema, como deslocamento de camadas, entupimento do bico, soltura da peça da mesa de impressão ou interrupção do suprimento de filamento;
- Verificar o nível do filamento, certificando-se de que há filamento suficiente para concluir a impressão;

7. Finalização da Impressão

- Após a conclusão da impressão deixe a peça esfriar e retire-a da mesa de impressão com cuidado;
- Limpar a impressora, removendo qualquer resíduo de filamento do bico e da mesa de impressão para evitar problemas nas impressões futuras. Em caso de dificuldade no fluxo de filamento pelo bico de impressão, pode ser necessária a sua remoção e limpeza;

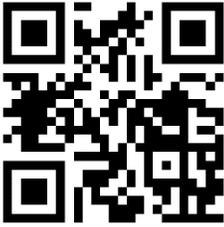
8. Pós-processamento

- Se o modelo tiver suportes, remova-os com cuidado utilizando um alicate pequeno de corte rente;
- Lixe quaisquer áreas ásperas e faça o acabamento necessário, como a pintura, colagem, etc;

9. Manutenção da Impressora

- Limpe a impressora regularmente para evitar acúmulo de resíduos;
- Verificar e ajustar componentes, inspecionando regularmente o bico, a mesa e outros componentes, ajustando e substituindo conforme necessário;

Tabela 1 QrCodes e endereços para acesso aos vídeos sobre o uso prático de impressoras impressão 3D FFF

<p>Apresentação: Visão geral sobre impressão 3D FFF</p>	 <p>https://youtu.be/IV_2LBBSstwM</p>
<p>Aplicativos: Aplicativos necessários para impressão 3D</p>	 <p>https://youtu.be/t59ne2unOYA</p>
<p>Operação básica: Procedimentos de operação de uma impressora 3D</p>	 <p>https://youtu.be/3XbGbieLfiU</p>
<p>Manutenção: Dicas para manutenção da impressora 3D e resolução de problemas comuns</p>	 <p>https://youtu.be/iEccwQ_8t2w</p>

4. Modelo molecular montável

4.1 Características do Kit de modelo molecular

O kit de modelo molecular apresenta o conjunto de características elencadas abaixo, e que consideramos como desejáveis para compor atividades didáticas de química:

- a. A impressão do kit de modelo molecular produz peças funcionais e duráveis, permitindo o encaixe e desencaixe para montagem das moléculas. A fabricação das peças é ser possível em impressoras 3D de baixo custo que utilizam a tecnologia de fabricação por filamento fundido, e filamentos de PLA e ABS. As peças podem ser impressas com o mínimo de estruturas de suporte, minimizando o trabalho de pós tratamento, e agilizando sua utilização em aplicações educacionais;
- b. As peças permitem a personalização de escala para fabricação de modelos maiores, adequados para apresentações em salas de aula, e tamanhos menores, para economia de tempo de impressão e filamento;
- c. O kit é montável, contendo peças esféricas referentes aos átomos e bastões cilíndricos para representar as ligações químicas. As ligações simples permitem a rotação livre em torno de seu eixo, e as ligações duplas não permitem a rotação em torno de seu eixo;
- d. As esferas que representam diferentes átomos têm raios que são proporcionais aos raios atômicos dos átomos. Os encaixes das ligações nos átomos são projetados de modo que os ângulos de ligação fiquem de acordo com os valores para geometrias correspondentes às hibridizações sp^3 ($109,5^\circ$) e sp^2 ($120,0^\circ$);

4.2 Arquivos digitais das peças do Kit de modelo molecular

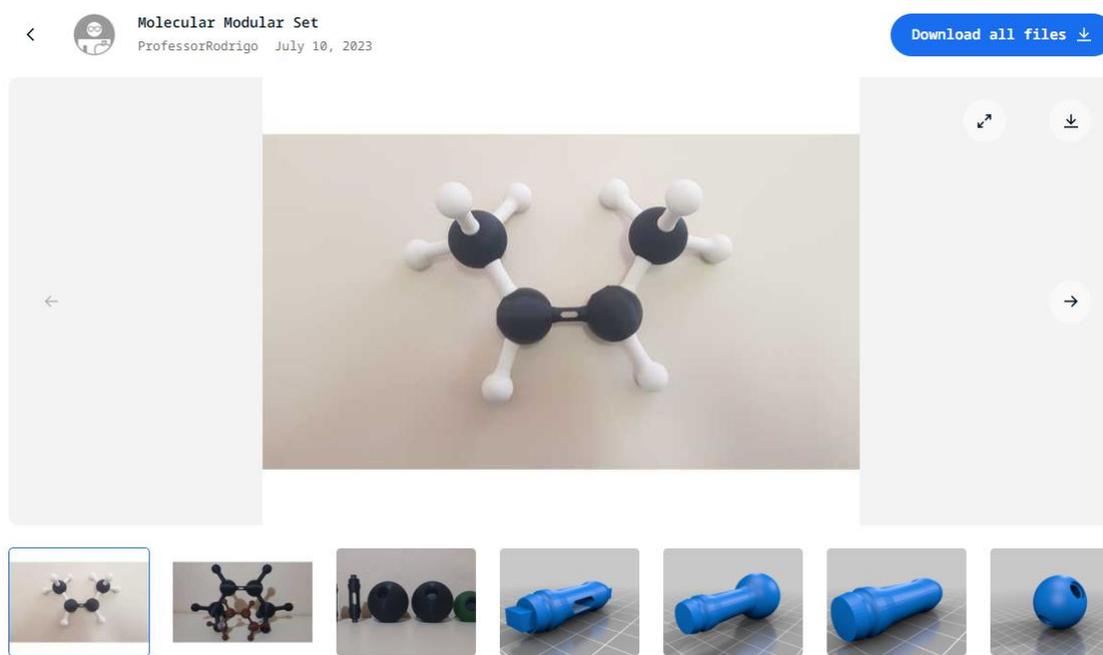
Neste caderno didático utilizaremos modelos 3D de peças para montagem de modelos moleculares que foram desenvolvidos pelos autores desta publicação, e que podem ser obtidos a partir do endereço <https://www.thingiverse.com/thing:6117212>, ou através do QR Code representado na figura 6. Os detalhes de como efetuar a impressão e uso das peças para montagem de modelos moleculares serão detalhados a seguir. Os arquivos estão sujeitos à licença Creative Commons Atribuição não comercial (CC BY-NC), o que permite o uso educacional com as restrições de exigir que os créditos aos autores sejam citados e não permitir o seu uso comercial.



Figura 6 QR Code para download dos arquivos dos modelos 3D das peças para montagem de modelos moleculares

Inicialmente, o usuário deverá baixar o conjunto de arquivos contendo os modelos 3D das peças do Kit de modelo molecular através do link da figura 6. A página do projeto no *Thingiverse* é similar à indicada na Figura 7. Clicar em *Download all files*, para baixar todos os arquivos que são compactados e empacotados no formato RAR. Para extrair os arquivos dos modelos 3D das peças do arquivo no formato RAR, recomenda-se o aplicativo 7zip, que pode ser baixado do endereço: <https://www.7-zip.org/download.html>. No aplicativo 7zip, selecione o arquivo baixado e clique em Extrair. Em seguida selecione a pasta na qual os arquivos serão salvos. Em seguida, e escolha o arquivo desejado (terminado em .stl), como, por exemplo, "carbono.stl" e abra-o usando o aplicativo de fatiamento *Ultimaker Cura*.

Figura 7 Aparência da página para baixar os arquivos dos modelos 3D das peças do Kit de modelo molecular



Você deverá encontrar um total de 7 arquivos, sendo um para cada uma das peças que compõem o Kit de modelo molecular. A Tabela 2 mostra a lista de peças com o respectivo nome do arquivo.

Tabela 2 Descrição dos arquivos dos modelos 3D das peças para compor o Kit de modelo molecular

Arquivo	Descrição
Carbono.STL	Átomo de carbono sp^3
Carbonosp2.STL	Átomo de carbono sp^2 (com encaixe que não permite a rotação livre em torno da ligação)
Hidrogenio.STL	Átomo de hidrogênio anexado a uma ligação
Ligacaodupla.STL	Ligação dupla
Ligacaosimples.STL	Ligação simples
Nitrogenio.STL	Átomo de nitrogênio
Oxigenio.STL	Átomo de oxigênio

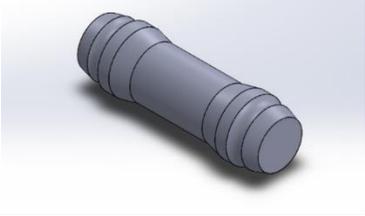
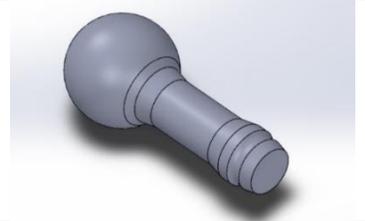
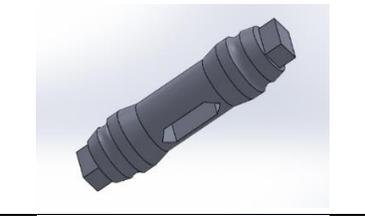
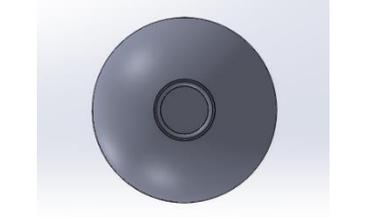
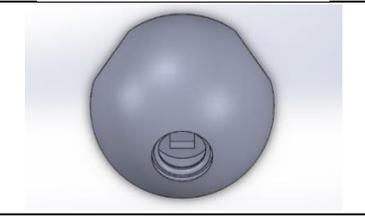
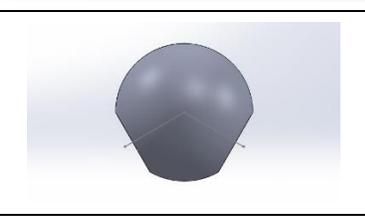
Peça	Modelo 3D	Peça impressa
Ligação simples		
Átomo de hidrogênio com ligação simples		
Ligação dupla		
Átomo de carbono sp ³		
Átomo de carbono sp ²		
Átomo de nitrogênio		
Átomo de oxigênio		

Figura 8 Conjunto de peças para o Kit de modelo molecular

A Figura 8 mostra as 7 peças modulares do Kit de modelo molecular, na forma de modelo 3D, e impressas com filamento de ABS. Estas peças podem ser impressas de acordo com a necessidade de cada professor, mas em geral recomenda-se que sejam impressas, para cada grupo de alunos, ao menos 6 carbonos sp^3 , 3 carbonos sp^2 , 2 oxigênios, 2 nitrogênios, 8 ligações simples, 2 ligações duplas e 12 átomos de hidrogênio com ligação simples. Este conjunto permite ao aluno montar moléculas orgânicas pequenas para o estudo de estrutura molecular e isomeria.

A montagem das moléculas consiste em simplesmente encaixar as diferentes peças de acordo com a estrutura química desejada. Em geral, o aluno deverá transpor a nomenclatura química na forma de fórmulas estruturais bidimensionais no papel ou tela do computador para a estrutura tridimensional na forma do modelo molecular físico.

Observe na Tabela 8 que a peça para o átomo de hidrogênio já vem acompanhada da ligação simples, facilitando a montagem de moléculas orgânicas. Observe também na Tabela 8 que existem dois tipos de peças para ligação química, uma peça para ligações simples e uma peça para ligações duplas. Note que a peça para a ligação dupla se diferencia pela presença de um corte no seu centro. A peça para ligação dupla tem um encaixe específico para as peças de átomos de carbono sp^2 que não permite a rotação livre em torno de seu eixo, permitindo representar adequadamente isômeros.

4.3 Dicas para impressão das peças do kit de modelo molecular

Na fase de fatiamento do modelo 3D, é recomendado ajustar os parâmetros de acordo com a Tabela 3. Estes parâmetros são sugestões que permitem a impressão das peças com um bom compromisso de tempo de impressão, qualidade de acabamento e resistência mecânica. É possível alterar os parâmetros para personalizar a impressão, por exemplo reduzindo a altura da camada a resolução da impressão aumenta e os detalhes da peça

ficam mais precisos e o acabamento superficial melhora, porém o tempo de impressão fica maior. O percentual de preenchimento interno da peça pode ser elevado para 50%, caso se deseje mais resistência mecânica, mas com um maior consumo de filamento e maior tempo de impressão.

Parâmetro	Valor recomendado
Altura da camada	0.25 mm
Preenchimento	35%
Suportes	Habilitar a geração automática
Tipo de filamento	PLA ou ABS
Temperatura do bico	PLA: 190°C a 220°C, ABS: 230°C a 260°C Usar preferencialmente o valor que consta no perfil da impressora

Figura 7 Parâmetros recomendados para impressão das peças do kit de modelo molecular

Antes de efetuar o fatiamento é possível configurar a orientação das peças a serem impressas na mesa de impressão. A escolha da orientação otimizada permite minimizar problemas de impressão, a quantidade e complexidade de suportes. Para o caso das peças referentes às ligações simples, ligações duplas e para a peça referente ao átomo de hidrogênio com a ligação simples recomendamos a impressão das peças em pé, de acordo com as imagens da Figura 9 (que foram obtidas a partir do aplicativo Ultimate Cura).

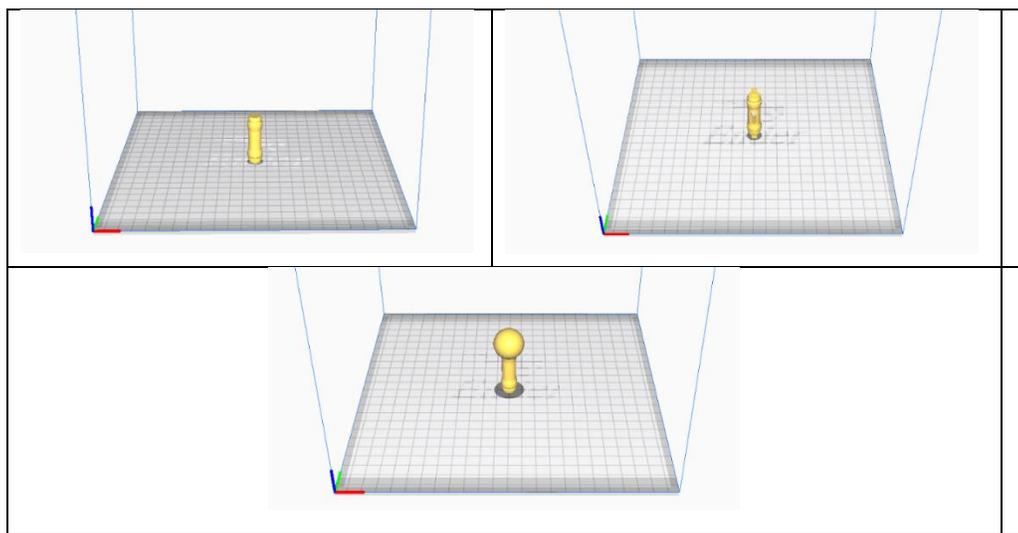


Figura 9 Orientações recomendadas para impressão de peças das ligações simples, duplas e átomos de hidrogênio com ligação simples

Nestas orientações, estas peças não necessitam de suportes. Para os casos das peças referentes aos átomos de carbono sp^3 , carbono sp^2 , nitrogênio e oxigênio, recomendamos posicionar as peças com um dos encaixes sobre a mesa de impressão, conforme a figura 10, que ilustra o caso do posicionamento das peças dos átomos de carbono sp^3 . Nestes casos, o aplicativo fatiador deverá gerar uma pequena quantidade de suporte que é relativamente simples de serem removidos após a impressão com um alicate pequeno de corte rente.

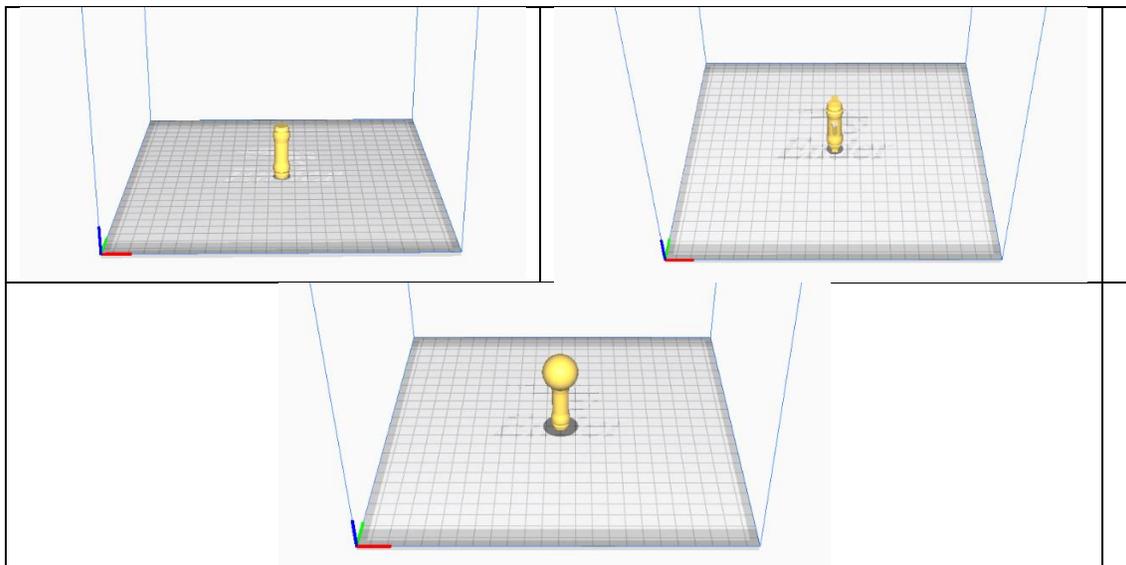


Figura 10 Orientações recomendadas para impressão de peças das ligações simples, duplas e átomos de hidrogênio com ligação simples

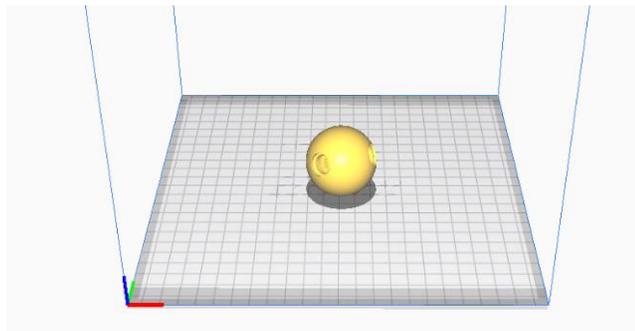


Figura 11 Orientação recomendada para impressão da peça para o átomo de carbono sp^3 . A mesma orientação é sugerida para as peças dos átomos de nitrogênio, oxigênio e de carbono sp^2

Com uma forma de otimizar o tempo de impressão é possível posicionar mais de uma peça na mesa da impressora para que sejam impressas simultaneamente, como ilustrado na Figura 12. Deve-se atentar

que nesta configuração torna-se mais provável ocorrer uma falha na impressão como o deslocamento de uma das peças da mesa de impressão, o que resulta na perda da impressão de todas as demais.

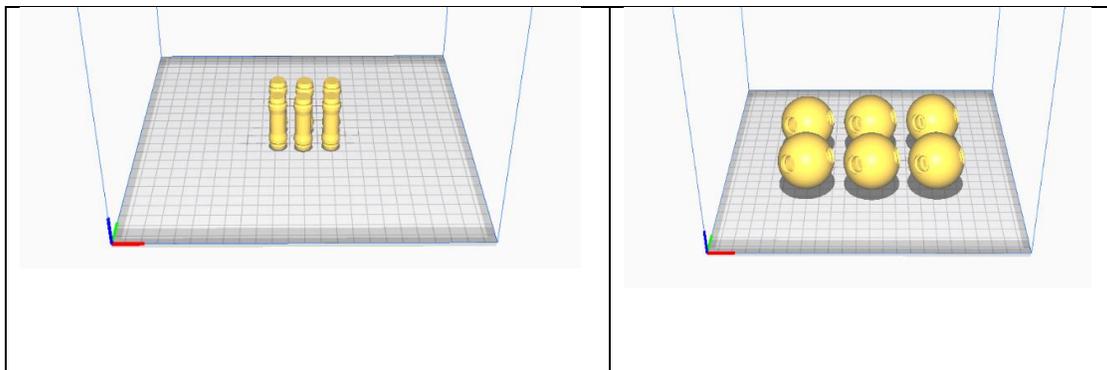


Figura 12 Posicionamento de múltiplas peças para impressão simultânea

4.4 Utilização do Kit de modelo molecular

A figura 9 mostra uma aplicação em que os isômeros cis-2-buteno e trans-2-buteno foram montados usando uma peça para a ligação dupla na qual foram encaixados dois átomos de carbono sp^2 , e em cada um destes foi encaixada a peça para um átomo de carbono sp^3 . Os átomos de hidrogênio foram adicionados encaixando 8 peças que representam o átomo de hidrogênio juntamente com uma ligação simples. Observe que neste caso esta peça que representa o átomo de hidrogênio com a ligação simples recebeu um acabamento de pintura após sua impressão, de modo que a parte da peça que representa a ligação simples foi pintada de preto.

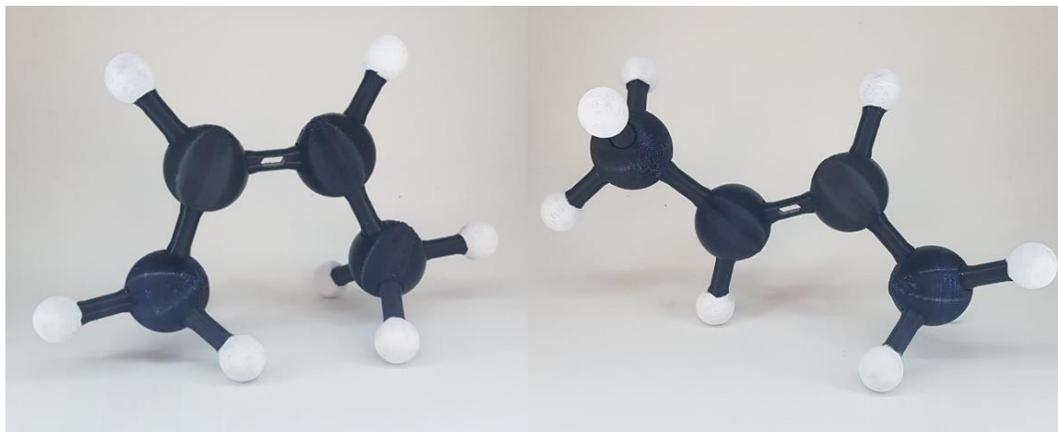


Figura 9 Modelos moleculares para o cis-2-buteno (esquerda) e trans-2-buteno (direita)

Na figura 10, são representados dois isômeros conformacionais para a molécula de etanol, que diferem entre si na orientação relativa dos grupos -CH_3 e $\text{-CH}_2\text{OH}$. Como os encaixes entre os dois átomos de carbono sp^3 , representados em preto, permitem a rotação livre, é possível girar livremente os grupos que estão ligados a estes dois carbonos, representando diferentes isômeros conformacionais. Para a montagem destes modelos, as peças foram impressas em ABS de cores diferentes, sendo o carbono sp^3 em preto, o átomo de oxigênio em vermelho, os átomos de hidrogênio em branco e as ligações simples também em branco. Observe que os átomos de hidrogênio apresentam um raio menor que o raio do átomo de oxigênio, e este apresenta um raio menor que o dos átomos de carbono, conforme é esperado para a ordem do raio atômico destes átomos.

O modelo permite também demonstrar os diferentes isômeros conformacionais do ciclo-hexano, que são o ciclo-hexano na conformação cadeira (Figura 10 à esquerda), e o ciclo-hexano na conformação barco (figura 10 à direita). Para a montagem destes modelos foram usadas peças para átomos de carbono sp^3 e átomos de hidrogênio com ligações simples. O modelo não necessita ser desmontado para se converter de uma conformação para ou outra, sendo necessário apenas alguns movimentos para a mudança de conformação.

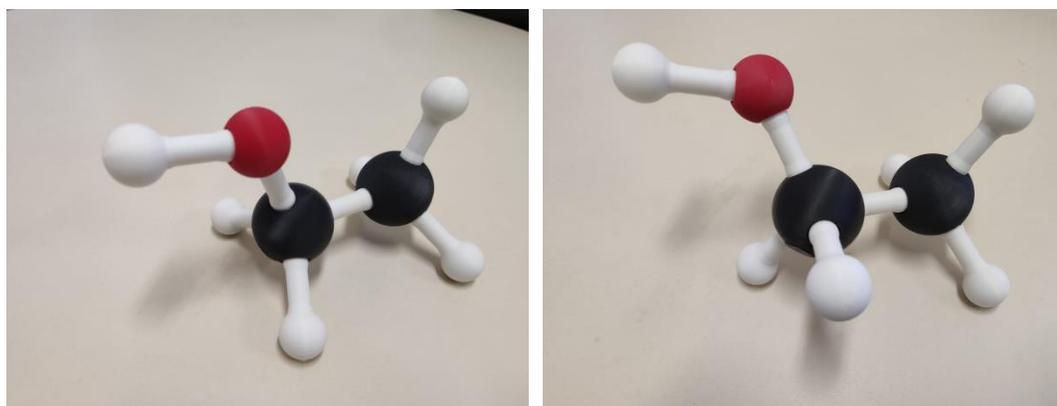


Figura 10 Modelos moleculares para o etanol em duas conformações, obtidas através da rotação da ligação C-C

Neste caso, a montagem e manipulação do modelo permitem que o aluno compreenda a diferença das conformações de uma maneira muito mais eficiente do que com o uso de representações gráficas bidimensionais. Modelos físicos têm se mostrado eficazes no ensino de conceitos complexos como isomeria, permitindo uma visualização clara das diferenças estruturais que são difíceis de serem percebidas em representações bidimensionais (Bhushan & Wyeth, 2010).

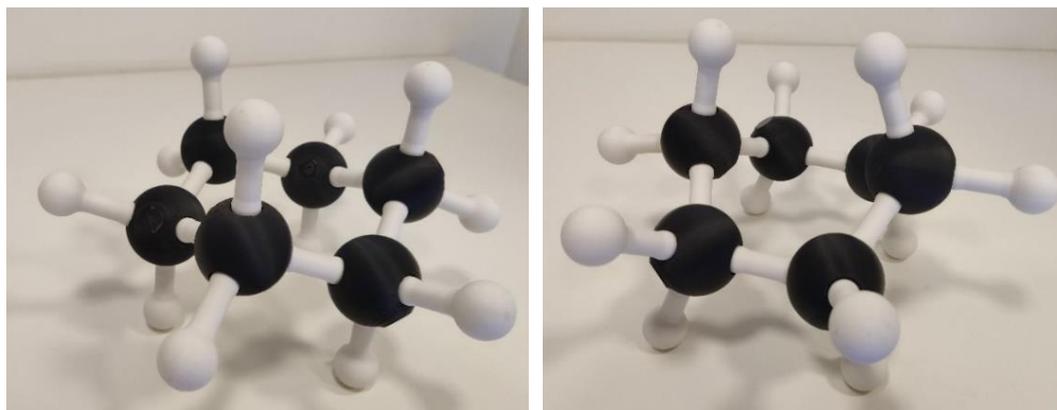


Figura 11 Modelos moleculares para os isômeros conformacionais do ciclo-hexano. À esquerda a forma cadeira, e à direita a forma barco.

O Kit de modelo molecular apresentado neste caderno didático apresenta algumas vantagens importantes em relação aos Kits de modelo molecular disponíveis comercialmente. Os Kits de modelo molecular disponíveis comercialmente como produtos prontos apresentam geralmente custo elevado de aquisição, o que se deve possivelmente à sua pequena escala de fabricação e comércio. Por outro lado, o kit de modelo molecular apresentado neste caderno didático foi projetado para que possa ser facilmente fabricado utilizando impressoras 3D simples e suprimentos de baixo custo. Outra vantagem do kit de modelo molecular é que as peças podem ser fabricadas por impressão 3D, resultando na facilidade de repor peças extraviadas ou danificadas. Nos kits comerciais, em geral não é possível a reposição de peças, sendo necessária a compra de um kit adicional. O kit de modelo molecular descrito neste caderno didático

apresenta alguns aspectos inovadores que não estão presentes na maioria dos kits moleculares descritos em trabalhos anteriores, ou em produtos comerciais, e que são importantes para o ensino de isomeria. Dentre estas inovações, as ligações duplas foram projetadas de modo a não permitir a rotação em torno de seu eixo, ao contrário das ligações simples.

Destacamos outra possibilidade interessante que é possível com a impressão 3D das peças para o kit de modelo molecular que é a personalização de escala. Os kits de modelos moleculares comerciais são vendidos com peças em um tamanho fixo. Por outro lado, quando se imprime as peças em uma impressora 3D é possível aumentar ou reduzir a escala das peças, e personalizar a escala. No contexto da sala de aula, o professor pode utilizar o kit de modelo molecular com peças impressas com o dobro do tamanho original, permitindo que os alunos possam visualizar melhor o modelo durante uma explicação ou demonstração quando o professor manipula o modelo e apresenta para a turma. Em atividades nas quais os alunos devem manipular os modelos, pode-se imprimir as peças na escala original, ou até mesmo em uma escala menor que a original, de modo a economizar filamento e tempo de impressão. A Figura 12 mostra o modelo molecular para a molécula de cis-2-buteno montadas com peças impressas no tamanho original (em preto), e na metade do tamanho original (em marrom). A configuração da escala é feita durante a fase do fatiamento, com um ajuste no aplicativo fatiador. O tamanho mínimo das peças irá depender da qualidade e resolução da impressão, e o tamanho máximo dependerá a área livre na mesa de impressão da impressora em uso.



Figura 12 Modelo molecular para o cis-2-buteno na escala de 50% (marrom) e 100% (preto)

Além das limitações conceituais dos modelos moleculares que já foram discutidas, deve-se citar também algumas limitações técnicas do kit de modelo molecular impresso em 3D. Uma das limitações é que modelos de moléculas com mais de 10 átomos de carbono tendem a romper os encaixes das ligações com as peças dos átomos devido ao peso destas peças. Se for necessário montar modelos de moléculas maiores recomendamos fazer a impressão das peças na metade da escala, pois neste caso o peso das peças é reduzido. Outra limitação que o professor deverá ficar atento é que o tempo de vida dos encaixes das peças é limitado, e dependerá do tipo de filamento usado, da qualidade de impressão, do cuidado na manipulação e do número de ciclos de encaixes e desencaixes. Segundo os nossos testes, normalmente o tempo de vida dos encaixes é suficiente para realizar ao menos 10 atividades em que os alunos manipulam e montam os modelos moleculares. O sinal de desgaste acentuado dos encaixes se manifesta quando as peças dos átomos tendem a soltar facilmente das peças das ligações. Se o professor julgar conveniente, é possível elevar a taxa de preenchimento na configuração do aplicativo fatiador para conferir mais durabilidade aos encaixes.

5. Propostas de atividades didáticas utilizando o kit de modelo molecular impresso em 3D

5.1 Introdução

Propomos a seguir quatro atividades que exploram o kit de modelo molecular no ensino de química, que são descritas na Tabela 3.

Tabela 3 Lista de atividades e seus objetivos de aprendizagem que exploram o uso do kit de modelo molecular

Atividade	Tópico	Apêndice	Objetivos de aprendizagem
1	Familiarização ao uso do kit de modelos moleculares e montagem de pequenas moléculas.	A	Compreender como montar modelos moleculares de moléculas simples utilizando o Kit de modelos moleculares impressos em 3D.
2	Estrutura molecular.	B	Compreender a geometria molecular e a flexibilidade das ligações químicas em moléculas, utilizando modelos moleculares
3	Isomeria geométrica.	C	Construir modelos moleculares de moléculas que apresentam isomeria cis/trans e relacionar as estruturas tridimensionais de cada isômero com suas respectivas representações bidimensionais. Identificar a não possibilidade de rotação livre da ligação dupla.
4	Isomeria ótica	D	Construir modelos de isômeros óticos e relacionar as estruturas tridimensionais de cada isômero com suas respectivas representações bidimensionais.

As atividades são sugestões que o professor poderá adaptar ou modificar de acordo com a sua realidade educacional. É também possível que o professor use sua criatividade livremente para usar o kit de modelos moleculares para elaborar outras atividades de seu interesse.

As atividades propostas procuram desafiar os alunos a construírem os modelos moleculares de diferentes estruturas e explorar os conceitos químicos tratados. Sugere-se que a dinâmica das atividades siga a seguinte sequência:

- 1) Introdução ao guia de atividades, que pode incluir pequenas demonstrações e exposição dialogada. Nesta etapa, o professor deverá deixar claro os objetivos da atividade e quais recursos serão utilizados. Recomenda-se que o professor retome os principais conceitos químicos que são fundamentais para o desenvolvimento da atividade;
- 2) Execução das atividades pelos alunos de forma ativa, com o professor atuando como mediador e orientando os alunos sempre que solicitado, mas permitindo que os alunos desenvolvam as atividades propostas por si próprios. Uma sugestão é que os alunos registrem a execução das atividades fazendo anotações no guia de atividades, em fotos ou vídeos. Nesta etapa, os alunos deverão responder aos questionamentos que contam do guia de atividades;
- 3) Ao final da atividade, o professor deverá reunir os alunos e discutir no grande grupo as conclusões de cada uma a respeito das atividades, e em especial esclarecendo sobre o conhecimento químico que foi explorado na atividade. Nesta etapa é recomendado que o professor questione os alunos a respeito das limitações do modelo que

montaram e discuta o que o modelo pretende representar e o que ele não foi desenvolvido para representar;

- 4) No encerramento das atividades, os alunos são incentivados e apresentar suas dificuldades e sugestões para melhoria no procedimento didático.

Os recursos necessários incluem um conjunto de peças impressas em impressora 3D para os átomos e ligações que sejam suficientes para as atividades, mais algumas peças de reserva para o caso de alguma ser danificada ou perdida. Cada atividade proposta pode ser aplicada em cerca de 1 hora/aula.

Para a avaliação das atividades sugere-se usar as respostas do questionário do guia de atividades e a observação da participação dos alunos nas tarefas propostas. Apresentamos, para cada atividade, uma lista de padrões de resposta para as questões presentes nos guias de atividades. O professor poderá usar os padrões de resposta para auxiliar o seu processo de avaliação dos alunos.

Os guias de atividades e os respectivos padrões de resposta para cada uma das atividades sugeridas listadas na Tabela 3 encontram-se nos Apêndices A, B, C e D.

6. Considerações finais

O uso de modelos moleculares físicos montáveis, impressos em 3D, representa um aspecto inovador no ensino de química, oferecendo uma abordagem tangível para a compreensão de conceitos muitas vezes abstratos e desafiadores. Este caderno didático buscou não apenas introduzir essa ferramenta, mas também fornecer orientações práticas para sua implementação em sala de aula.

Através das atividades propostas, esperamos que os professores possam incentivar seus alunos a explorar a química de forma mais interativa e envolvente. A capacidade de manipular modelos tridimensionais permite uma melhor visualização das estruturas moleculares e das interações que ocorrem entre os átomos, facilitando a compreensão de tópicos como geometria molecular, isomeria e hibridização.

Entretanto, é importante reconhecer as limitações dos modelos moleculares físicos. Como discutido ao longo deste caderno, eles simplificam certos aspectos da realidade molecular, não capturando completamente a dinâmica e as complexidades das interações químicas. Esses modelos devem ser utilizados como uma ferramenta complementar, em conjunto com outras representações e abordagens didáticas, para proporcionar uma visão mais holística e precisa da química.

Encerramos este caderno com a expectativa de que ele inspire e capacite os professores a integrar novas tecnologias em suas práticas pedagógicas, transformando o ensino de química em uma experiência mais rica e acessível. Que esta iniciativa contribua para o desenvolvimento de uma geração de estudantes mais curiosos, criativos e proficientes em ciências, capazes de enfrentar os desafios do futuro com conhecimento e confiança.

Agradecemos a dedicação e o empenho de todos os professores que se comprometem com a missão de educar, e esperamos que este material seja uma ferramenta valiosa em suas jornadas pedagógicas.

Referências bibliográficas:

BACHELARD, Gaston. O novo espírito científico. 3. ed. São Paulo: Martins Fontes, 2000.

BHUSHAN, N.; WYETH, P. The role of physical models in teaching chemical concepts: A case study. *Chemistry Education Research and Practice*, v. 11, n. 3, p. 207-213, 2010.

CASS, M. E.; RZEPA, H. S. The use of molecular models in the teaching of chemistry. *Journal of Chemical Education*, v. 82, n. 11, p. 1671-1680, 2005.

DE JONG, T.; VAN JOOLINGEN, W. R. Scientific discovery learning with computer simulations of conceptual domains. *Review of Educational Research*, v. 68, n. 2, p. 179-201, 1998.

GILBERT, J. K.; BOULTER, C. J. Developing models in science education. Kluwer Academic Publishers, 2000.

JOHNSTONE, A. H. Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *Journal of Computer Assisted Learning*, v. 7, n. 2, p. 75-83, 1991.

TREAGUST, D. F.; CHITTLEBOROUGH, G.; MAMIALA, T. L. The role of submicroscopic and symbolic representations in chemical explanations. *International Journal of Science Education*, v. 25, n. 11, p. 1353-1368, 2003.

Apêndice A: Familiarização ao uso do kit de modelos moleculares e montagem de pequenas moléculas.

Guia de Atividades:

1) O professor disponibilizará uma caixa contendo um conjunto de peças soltas do Kit de modelo molecular para montagem de moléculas. Utilizando estas peças monte os modelos moleculares para as moléculas de a) água (H_2O), (b) amônia (NH_3) e (c) metano (CH_4). Registre em fotos os modelos montados.

2) Modifique o modelo molecular do metano de modo a montar o modelo molecular da molécula de etano CH_3CH_3 . Registre em foto o modelo montado.

3) Rotacione os grupos $-\text{CH}_3$ em torno da ligação C-C no modelo para a molécula de etano que foi montada e observe as posições relativas dos átomos de hidrogênio. Registre sua observação em vídeo e descreva abaixo seus comentários.

Padrões de Resposta:

- 1) Os alunos devem escolher as peças correspondentes aos átomos corretos para cada caso. A escolha do tipo de átomo a ser usado na montagem deve levar em conta a valência (número de encaixes para ligações) e o ângulo entre as ligações. Para decidir quais átomos utilizar nas montagens, o aluno deve lembrar conceitos básicos de química como valência, ligações químicas e geometria molecular. (a) Para o caso da molécula de água, deve ser usado o átomo de oxigênio que possui dois encaixes com um ângulo aproximado de $109,5^\circ$ entre eles, e as peças que consistem de uma ligação simples com átomos de hidrogênio, (b) Para o caso da molécula de amônia, deve ser utilizado a peça para o átomo de nitrogênio que apresenta três encaixes também com um ângulo aproximado de $109,5^\circ$ entre eles, e (c) para o caso da molécula de metano deve ser utilizado a peça para o átomo de carbono sp^3 , na qual há quatro encaixes para ligações, e o ângulo aproximado entre eles é $109,5^\circ$ (geometria tetraédrica).
- 2) Para montagem da molécula de etano deve ser usada uma peça para a ligação simples em que devem ser encaixadas duas peças para átomos de carbono sp^3 (que possuem 4 encaixes). Os demais encaixes dos átomos de carbono devem ser conectados às peças que representam ligações simples com um átomo de hidrogênio.

A ligação simples C-C da molécula de etano permite rotação livre em torno de seu eixo, o que permite que o aluno possa simular diferentes conformações dos grupos $-CH_3$. Através da manipulação do modelo, o aluno poderá visualizar de modo mais efetivo o aspecto dinâmico da rotação em torno da ligação simples.

Apêndice B: Estrutura molecular

Guia de Atividades:

- 1) Utilizando o Kit de modelo molecular, monte a estrutura das moléculas de etano (C_2H_6) e eteno (C_2H_4). Observe as diferentes geometrias formadas em torno dos átomos de carbono nas moléculas que foram montadas. Registre as montagens em foto, com os modelos lado a lado. Que diferença é observada entre ligações simples e ligações duplas nas moléculas de etano e eteno? Como podem ser classificadas as geometrias de cada uma destas moléculas tomando como referência os átomos de carbono?

- 2) Utilize o Kit de modelo molecular para construir os modelos das moléculas dos isômeros geométricos do n-butano e isobutano. Ambas moléculas apresentam a mesma fórmula molecular C_4H_{10} , mas as possuem arranjos especiais diferentes. Registre em fotos os modelos montados.

Padrões de Resposta:

- 1) Para montagem da molécula de etano é utilizada uma peça para ligação simples C-C e dois átomos de carbono sp^3 (com 4 encaixes). Para a montagem da molécula de eteno deve ser utilizada uma peça para ligação dupla C=C (que pode ser diferenciada da peça da ligação simples pela presença de elemento vazado no seu centro). No caso da molécula de eteno, as peças dos átomos de carbono devem ser para os carbonos sp^2 . A molécula de etano permite rotação em torno da ligação C-C e a geometria em relação a cada átomo de carbono é tetraédrica. No caso da molécula de eteno, a ligação C=C não permite rotação e geometria da molécula é planar, com todos os átomos de carbono e hidrogênio no mesmo plano.
- 2) A montagem das moléculas de n-butano e isobutano utilizam peças para átomos de carbono sp^3 com geometria tetraédrica, peças para as ligações C-C simples e peças para ligações simples com o átomo de hidrogênio. As duas moléculas são isômeros estruturais, ou seja, possuem os mesmos átomos, mas com conectividade entre eles diferente. A montagem dos modelos permite ao aluno visualizar a diferença entre os arranjos espaciais dos dois isômeros.

Apêndice C: Isomeria geométrica

Guia de Atividades:

Considere a molécula de buteno, cuja fórmula molecular é C_4H_8 .

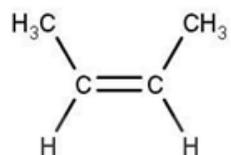
1) Represente no espaço abaixo a estrutura molecular plana de todos os isômeros geométricos do buteno:

2) Utilizando o Kit de modelo molecular, construa os modelos moleculares tridimensionais físicos para os isômeros cis-buteno e trans-buteno. Verifique se as estruturas tridimensionais de cada isômero podem ser superpostas e escreva suas observações abaixo:

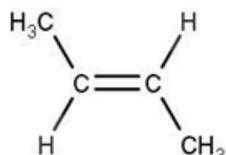
3) Construa o modelo molecular tridimensional físico para a molécula de butano, C_4H_{10} . Explore os possíveis movimentos de rotação em torno das ligações simples e responda abaixo se você acredita que esta molécula pode apresentar ou não isomeria geométrica do tipo cis/trans:

Padrões de Resposta:

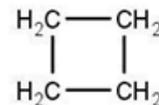
1)



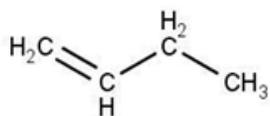
cis-but-2-eno



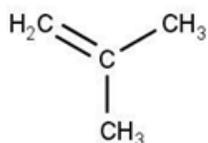
trans-but-2-eno



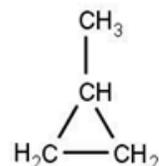
ciclobutano



but-1-eno



2-metilpropeno
(isobutileno)



metilciclopropano

2) Ao comparar as estruturas tridimensionais do cis-buteno e do trans-buteno, observamos que elas não podem ser superpostas. Isso ocorre porque a orientação espacial dos átomos de hidrogênio em relação à dupla ligação é diferente nos dois isômeros. No cis-buteno, os hidrogênios estão do mesmo lado da dupla ligação, enquanto no trans-buteno, eles estão em lados opostos. Essas diferenças na orientação espacial resultam em propriedades químicas e físicas distintas entre os dois isômeros.

3) A isomeria geométrica do tipo cis/trans ocorre quando há uma restrição ao movimento de rotação em torno de uma ligação dupla ou anel, resultando em diferentes arranjos espaciais para os grupos ligados aos carbonos envolvidos. No caso do butano, as ligações entre os carbonos são todas simples, o que permite que ocorra livre rotação em torno dessas ligações. Portanto, não há restrição que possa gerar diferentes arranjos espaciais e, conseqüentemente, não há isomeria geométrica do tipo cis/trans no butano.

Apêndice D: Isomeria ótica

Guia de Atividades:

Considere a molécula de ácido láctico, cuja fórmula molecular é $C_3H_6O_3$.

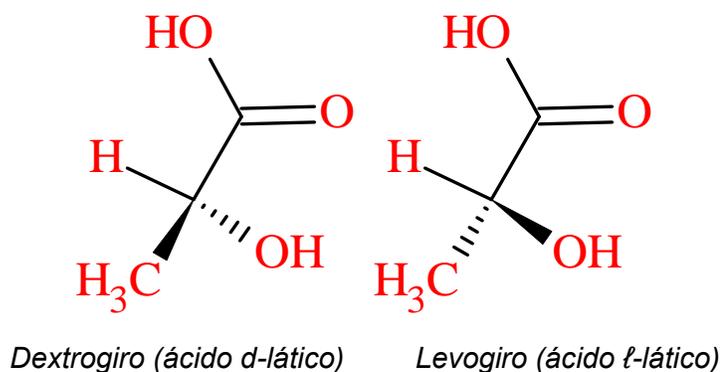
1) Represente no espaço abaixo as estruturas moleculares na representação de Fischer dos isômeros óticos do ácido láctico (d-ácido láctico e l-ácido láctico):

2) Construa os modelos moleculares tridimensionais físicos para todos os possíveis isômeros óticos do ácido láctico. Verifique se as estruturas tridimensionais de cada isômero são superponíveis e anote suas observações abaixo:

3) Você construiu os modelos moleculares tridimensionais com os modelos impressos na impressora 3D. Explique o que você pôde observar de diferente manipulando estes modelos em comparação às representações bidimensionais no papel:

Padrões de Resposta:

1)



- 2) Nesta atividade, os alunos utilizarão modelos moleculares para montar a estrutura tridimensional do ácido láctico. Eles devem fotografar a estrutura montada, apresentá-la ao professor e fazer anotações sobre as observações. O conceito de estereoisômeros ópticos e enantiômeros será explorado, comparando-os à imagem especular das mãos. Além disso, os alunos devem verificar se as estruturas e suas imagens especulares se sobrepõem; se isso ocorrer sem ajustes, as moléculas são iguais, não isômeros ópticos diferentes.
- 3) O aluno pode abordar as diferenças nos planos das estruturas, que podem ser menos intuitivas em um formato bidimensional. Além disso, é importante mencionar que a estrutura não é sobreponível, enfatizando como isso contribui para a identificação de enantiômeros.

Licença Creative Commons



CC BY-NC-SA 4.0 DEED

Atribuição-NãoComercial-Compartilhalgal 4.0 Internacional

Você tem o direito de:

Compartilhar — copiar e redistribuir o material em qualquer suporte ou formato
Adaptar — remixar, transformar, e criar a partir do material

O licenciante não pode revogar estes direitos desde que você respeite os termos da licença.

De acordo com os termos seguintes:

Atribuição - Você deve dar o [crédito apropriado](#), prover um link para a licença e [indicar se mudanças foram feitas](#). Você deve fazê-lo em qualquer circunstância razoável, mas de nenhuma maneira que sugira que o licenciante apoia você ou o seu uso.

NãoComercial - Você não pode usar o material para [fins comerciais](#).

Compartilhalgal - Se você remixar, transformar, ou criar a partir do material, tem de distribuir as suas contribuições sob a [mesma licença](#) que o original.

Sem restrições adicionais - Você não pode aplicar termos jurídicos ou [medidas de caráter tecnológico](#) que restrinjam legalmente outros de fazerem algo que a licença permita.