

# Impressão em 3D do modelo didático para a representação de estruturas que contemplam as diferentes hibridações.

Bruno Carmo de Sá (IC)<sup>1\*</sup>, Alexandre Geraldo Vianna Faria (PQ), Gustavo Yoshio Maruyama (PQ), Joseila Aparecida Bergamo (PQ), Paula Vianna (PQ).  
\*bruunocarmo@gmail.com

*IFMS-Instituto Federal de Mato Grosso do Sul<sup>1</sup>, Rua Salime Tanure, s/n. Bairro Santa Tereza, Coxim, MS 79400-000*

*Palavras-Chave: Geometria molecular, Impressão 3D, modelos.*

**RESUMO:** NO ENSINO DE GEOMETRIA MOLECULAR, TANTO ESTUDANTES DE CURSO SUPERIOR QUANTO DO ENSINO MÉDIO APRESENTAM PROBLEMAS NA COMPREENSÃO DAS DIFERENTES ESTRUTURAS TRIDIMENSIONAIS. OS MODELOS DISPONÍVEIS PARA USO DIDÁTICO POSSUEM FALHAS NA REPRESENTAÇÃO DE DIFERENTES HIBRIDIZAÇÕES, COSTUMAM APRESENTAR FÁCIL DESGASTE E EM SUA MAIORIA SÃO DE CUSTO ELEVADO PARA A AQUISIÇÃO. VISANDO RESOLVER ESSAS QUESTÕES FOI CONSTRUÍDO UM MODELO QUE CONTEMPLASSE AS DIFERENTES HIBRIDAÇÕES DE ÁTOMOS, A CUSTO BAIXO E COM BOA RESISTÊNCIA. A IDEIA INICIAL DO MODELO JÁ ESTÁ DISPONÍVEL, PORÉM SUA CONSTRUÇÃO NÃO HAVIA SIDO FEITA. ESSE TRABALHO MOSTRA OS PASSOS DA CONSTRUÇÃO DESSE MODELO, PRODUZIDO POR IMPRESSORA 3D E SOFTWARES GRATUITOS.

## 1. INTRODUÇÃO

Quando o conteúdo de geometria molecular é abordado na graduação, ou no ensino médio, dificuldades na compreensão e na visualização tridimensional de estruturas moleculares costumam aparecer (SEBATA, 2006). Então, o uso de modelos didáticos que contemplem as estruturas tridimensionais pode contribuir com a aprendizagem de conceitos químicos. Para compreender geometria molecular, é necessária a compreensão de ligações químicas, uma vez que essas dão origem às estruturas moleculares. A Teoria de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM) se complementam para explicar fenômenos que envolvem a construção de estruturas químicas.

As teorias normalmente utilizadas para as explicações sobre ligações costumam se apresentar de maneira muito abstrata e, portanto, temos que torná-las compreensíveis aos alunos e para isso podemos utilizar o modelo pedagógico, conforme propõe Mendonça (2008). Os modelos disponíveis apresentam algumas dificuldades na representação e muitas vezes tentando facilitar a compreensão das estruturas acabam por dificultar a aprendizagem de conteúdos. Alguns exemplos de modelos que estão disponíveis na literatura, usados para a representação de geometrias moleculares, costumeiramente usados em sala de aula, como, os modelos de bola de isopor com palitos, apresentam a desvantagem de se desgastarem facilmente. Outros como os modelos comerciais, tanto os fabricados no Brasil como importados, não contemplam em suas representações as diferentes hibridações que um mesmo átomo pode assumir. Outros modelos alternativos como, fibra do buriti (CARNEIRO, 2011), contas de bijuterias com massa de epóxi (LIMA, 1999), massa de biscoito (LOPES, 2012), assim como outras possibilidades como o uso de palitos de plástico de pirulito, a criação dos modelos em EVA e também de balões de aniversário, possuem a desvantagem de apresentarem montagem definitiva, o que não permitiria as múltiplas hibridações que um mesmo átomo central poderia assumir.

Em sala de aula, são diversos os modelos utilizados para a representação de geometrias moleculares. faz uso de fibra de buriti,) utiliza papel reciclado e biscuit e usa massa de epóxi para a construção de seus modelos. Porém segundo Silva (2014), todos esses modelos em uso possuem falhas nas representações de diferentes hibridações e muitos deles são de fácil desgaste. Gandra (2012) percebendo a problemática, da representação das diferentes hibridações, propôs um modelo que suprisse essa falha e que auxiliasse de forma efetiva no processo de ensino e de aprendizagem. Esse modelo proposto foi construído por Sá, Gandra e Faria (2015), que mostram que as falhas até então apresentadas na representação das hibridações, foram resolvidas, porém o modelo ainda apresentava limitações no tamanho dos átomos e no desgaste em médio prazo.

A proposta do presente trabalho visa a continuação dos estudos realizados pelas equipes precedentes, objetivando a criação de um protótipo em plástico PLA (ácido polilático) do modelo proposto por Gandra (2012), para isso recorreremos à especialistas em informática que contribuirão na construção do modelo utilizando a impressora 3D (3D procer)<sup>1</sup> e softwares gratuitos. Todas as ações descritas no trabalho foram efetuadas na cidade de Coxim/MS, foram realizadas por estudantes de nível superior do Curso de Licenciatura em Química, de nível médio do curso Técnico em Informática do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso do Sul e tiveram o acompanhamento de seus professores de Química e Informática.

## 2. Metodologia

Esse trabalho foi dividido em diferentes momentos. Inicialmente fez-se a análise de softwares gratuitos que pudessem ser utilizados na construção de modelos moleculares virtuais. Posteriormente a essa análise, são desenvolvidas estruturas virtuais que poderiam representar os objetos necessários à construção de moléculas. Essa sequência de ações é descrita a seguir.

### 2.1. Análise de Softwares para modelagem 3D

Foram analisados dois softwares para modelagem 3D, o Google SketchUp e o Blender 3D. O software Google SketchUp, facilita a criação de ambientes virtuais, porém em sua versão gratuita não possui todos os recursos necessários para a perfeita construção de modelos de moléculas e por esse motivo foi descartado. O Blender 3D, é um software open source, ou seja, de código aberto, possui várias opções de recursos, beneficia a modelagem de objetos, renderização, edição de vídeo, permite a modificação dos objetos, é de fácil manuseio e já foi testado com sucesso (BENTO, 2011). Devido às considerações apresentadas, concluiu-se que para esse trabalho, o software Blender 3D mostrou-se mais adequado.

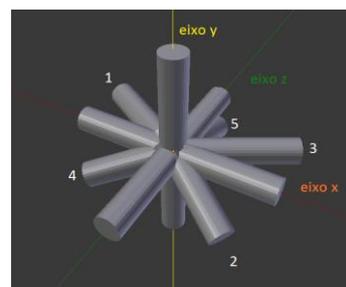
### 2.2. Construção do Modelo

Para iniciar a construção do protótipo, primeiramente foi modelado virtualmente uma guia com onze cilindros de 4,9 cm de diâmetro para que se pudesse determinar os locais exatos dos orifícios na esfera central, conforme demonstrado na figura 1, e cada cilindro foi acoplado em ângulos específicos conforme descrito na Tabela 1.

<sup>1</sup> As informações sobre a impressora utilizada podem ser encontradas no site <http://www.3dprocer.com.br>.

**Tabela 1 – Ângulos de acoplamentos dos cilindros**

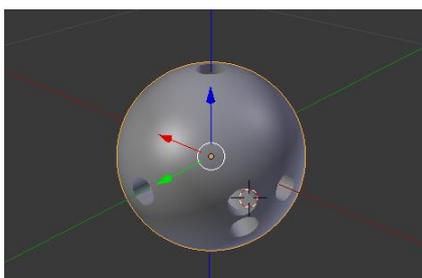
Nº do cilindro	Angulação em relação aos eixos		
	X	y	Z
1	- 45°	90°	45°
2	45°	-70°32'	- 45°
3	45°	90°	45°
4	- 45°	-70°32'	- 45°
5	45°	-70°32'	- 45°



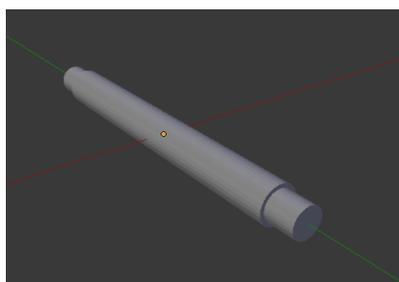
**Figura 1.** Guia com os números de cada cilindro

Posteriormente foi inserida uma esfera com 30 cm de diâmetro sobre a guia, com as extremidades dos cilindros sobresaindo e utilizando a função “modificador” juntamente com a opção Subdivisão de Superfície<sup>2</sup>, foi possível homogeneizar a superfície da esfera permitindo um acastamento melhor, e isso foi repetido em todas as esferas seguintes. Ainda usando o “modificador” na opção Booleana<sup>3</sup>, em sua função “diferença”, substituímos a guia por orifícios, o que resultou em uma esfera com orifícios de encaixe que pode ser vista na Figura 2.

Com o propósito de representar ligações, foi modelada uma haste que pudesse contemplar a ligação sigma. O diâmetro dessa haste é de 0,5 cm, seu tamanho total de 4,8 cm e em 0,4 cm de suas extremidade teve seu diâmetro reduzido em 0,1 cm e a demonstração virtual dessa haste pode ser observada na figura 3.

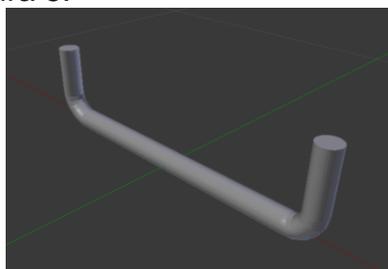


**Figura 2.** Modelo esférico com orifícios

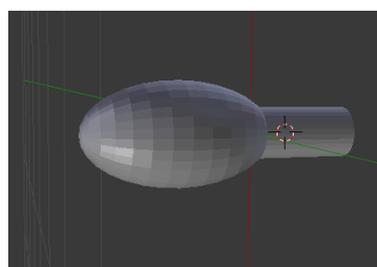


**Figura 3.** Haste para representação de ligação sigma

Para representar a ligação pi, foi modelada uma haste cujo comprimento total é de 11,32 cm e o seu diâmetro é de 0,4 cm. Em 1,96 cm de suas extremidades, foi aplicada uma curvatura de ângulo 90°, sendo assim a haste na parte horizontal possui 7,4cm e na parte vertical possui 1,96 cm. Tal haste pode ser observada na figura 4. A representação do par de elétrons livre foi feita por uma haste com 0,4 cm de diâmetro e 5,2 cm de comprimento e o modelo pode ser visto na figura 5.



**Figura 4.** Haste para a representação da ligação pi



**Figura 5.** Haste para a representação do par de elétrons livre

<sup>2</sup> O Subdivisão de Superfície é um modificador que melhora a qualidade do objeto em que é submetido.

<sup>3</sup> A Booleana é um modificador que pode difenciar, intersseccionar e unir dois objetos diferentes, oferecendo facilidade e eficiência à realização do trabalho. Por essas qualidades foi escolhida esse modificador nesse projeto.

O átomo de hidrogênio foi modelado por uma guia de 10 cm de comprimento e 0,4 cm de diâmetro. Em seguida foi inserida uma esfera com 20 cm de diâmetro e projetado sobre a guia. Para realizar o orifício na esfera utilizamos novamente o “modificador” na sua opção Booleana, em sua função diferença, efetivando o orifício, como se pode notar na figura 6.



Figura 6. Modelo esférico para a representação do Hidrogênio

### 2.3. Impressão 3D

Para a produção do modelo 3D em plástico PLA na máquina utilizada, foi necessário dividir todas as estruturas esféricas ao meio, pois assim têm-se uma base de sustentação para a impressão. Para tal, foi projetado uma figura plana em meio ao modelo, conforme pode se visualizar na figura 7 que representa o modelo para o par de elétrons livres. Para realizar o corte, utilizamos o “modificador” na opção Booleana, em sua função diferença. O resultado destas operações podem ser vistas na Figura 8.

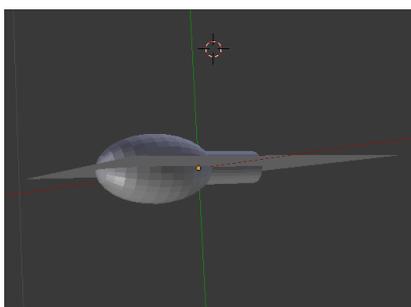


Figura 7. Plano sobre a representação do par de elétrons livre

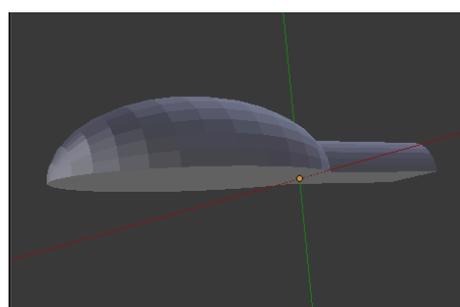


Figura 8. Par de elétrons livre cortado ao meio

Todo esse procedimento, foi realizado para todas as modelagens aqui apresentadas. Após feita as modelagens, todas foram exportadas em STereoLithography (doravante, stl) para serem submetidas ao programa Cura, disponibilizado pela impressora. O Cura é um software que permite a configuração de parâmetros da impressora, com ele é possível escolher, por exemplo, a extrusora que será utilizada para imprimir o objeto, a temperatura da mesa e o local onde o objeto será impresso. Para que a impressão do modelo criado no Blender fosse possível, foi necessária a conversão do arquivo stl gerado pelo Blender em arquivo gcode, pois esse formato - segundo Takagaki (2012) - descreve cada superfície horizontal através de comandos já determinados no programa. Para concretizar a impressão dos objetos, importamos os arquivos para um cartão SD, e o inserimos na impressora que realizou as impressões.

### 2.4. Computador em que foi realizada a modelagem

Toda a modelagem foi desenvolvida em um notebook pessoal com as seguintes características: Processador Intel® Core™ i3 CPU M 380 @ 2.53 GHz;

Memória instalada (RAM) de 4,00 GB (utilizável de 3,80 GB); Sistema Operacional de 64 Bits; Mouse com 3 botões.

### 3. Resultados e Discussão

Ao imprimirmos a esfera, que representaria o átomo central, pela primeira vez, ocorreu erro de proporção em relação ao diâmetro tanto da esfera quanto de seus orifícios e por esse motivo foi necessário aplicar ajustes para a correção do seu tamanho e do diâmetro dos orifícios. Somente após executada essa operação é que foi feita a impressão final em 3D. O resultado obtido pode ser observado na figura 9. Para o desenvolvimento da haste sigma, foram necessárias 3 impressões. Nas duas primeiras as hastes não ficaram com um tamanho adequado. Posteriormente ao realizarmos os devidos ajustes, como tamanho da haste na modelagem, foi impresso o modelo final da haste sigma (fig. 10).



Figura 9. Impressão final da esfera



Figura 10. Impressão final da haste sigma.

Para realizar o modelo final da haste  $\pi$ , foram necessárias quatro impressões, nos três primeiros testes as hastes não ficaram com tamanho adequado. Ao realizar os devidos ajustes no modelo, como tamanho e diâmetro, realizamos a impressão do modelo final da haste  $\pi$  (Fig. 11).



Figura 11. Impressão da haste  $\pi$ .

Para desenvolver o modelo final de par de elétrons, realizamos uma série de testes até encontrar o tamanho ideal. Após os ajustes como tamanho e diâmetro da haste, foi feita a impressão final do par de elétrons livre e o resultado pode ser visto na figura 12 abaixo.

O modelo de hidrogênio não necessitou de ajustes e o resultado da impressão pode ser conferido na figura 13 abaixo.



Figura 12. Impressão final do par de elétrons livres.



Figura 13. Impressão final do hidrogênio

Ao exportar os modelos desenvolvidos em stl do Blender para o Cura ocorreram erros de proporção, que foram corrigidos conforme a apropriação da tecnologia ocorria .

O modelo construído permite que uma única esfera representativa para o átomo central, possa mostrar as diferentes estruturas moleculares tridimensionais, permitindo contemplar as diferentes hibridações possíveis nos átomos. Para compreendermos a montagem das possíveis estruturas, utilizando uma mesma esfera como átomo central, descreveremos a seguir, cada possível estrutura e teremos como referência de encaixe, os orifícios produzidos a partir dos eixos mostrados na tabela 1.

Utilizando apenas os eixos x, ou o eixo y ou ainda o eixo z, teremos a representação da estrutura linear de moléculas saturadas como a do  $\text{BeH}_2$ , porém se a molécula linear a ser representada for a  $\text{XeF}_2$ , teremos três pares de elétrons livres mostrados nos eixos 1, 3 e parte negativa de z e no eixo y teríamos ligados em seus lados a representação sigma. Quando a molécula linear é formada com duas duplas ligações, como na molécula de  $\text{CO}_2$ , poderemos utilizar um desses eixos para a ligação sigma e os demais representariam as ligações pi dispostas em lados contrários e isso poderia representar, também, a molécula de  $\text{HCN}$ , bastando colocar as duas ligações sigmas para o mesmo lado.

Para facilitar a compreensão, todas as representações demonstradas, a partir desse ponto, teremos como referência o eixo y. Usando os cilindros 2 e 4 para as ligações sigmas, o cilindro 5 e a parte positiva do eixo y para os pares de elétrons livre, obtemos a representação molecular angular, como vista na estrutura do  $\text{H}_2\text{O}$ . Para a representação da molécula trigonal, fazemos uso dos cilindros 2, 4 e 5 representando as ligações sigma e a parte positiva do eixo y para o par de elétrons livres, obtendo assim a estrutura do  $\text{NH}_3$ . A representação tetraédrica poderia ser montada formando as ligações nos eixos y, 2, 4 e 5 e isso pode ser visto na figura 14. A molécula de estrutura T pode ser montada formando as ligações simples nos lados positivo e negativo do eixo y e no negativo do eixo z, enquanto que os elétrons livres estariam representados nos eixo 1 e 3, conforme podemos observar na molécula de  $\text{PCl}_3$ . A geometria do tipo gangorra poderia ser montada utilizando as duas partes do eixo y para ligações sigmas, e os eixos 1, 3 e lado negativo de z, para outras duas ligações sigmas e um par de elétrons, independente de sua escolha, essa é a estrutura esperada na molécula de  $\text{SF}_4$ . Fazendo uso dos dois lados do eixo y, a parte negativa do eixo z, juntamente com os cilindros 1 e 3, podemos contemplar a estrutura bipiramidal trigonal, como pode ser verificada na Figura 15. Com os eixos x, y e z representando as ligações sigmas, podemos contemplar a estrutura da geometria octaédrica, como pode ser visualizado na figura 16. Tendo como base a representação do octaedro e retirando uma das partes usada para a ligação sigma do eixo y, substituindo por par de elétrons livres, pode ser montada a estrutura pirâmide de base quadrangular, como na molécula de  $\text{IF}_5$ . E se na estrutura anterior substituirmos a outra parte do eixo y por par de elétrons livres, teremos representada a estrutura quadrado planar, e seria essa a estrutura observada no  $\text{XeF}_4$ .

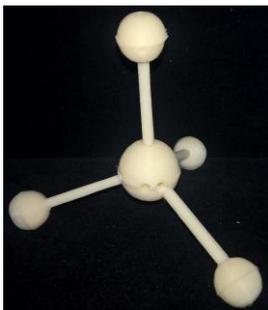


Figura 14. Representação do tetraedro

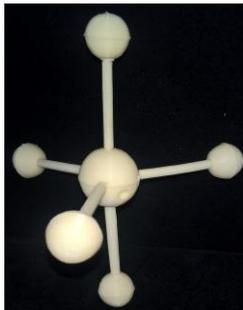


Figura 15. Modelo proposto representando o bipirâmide triaxial

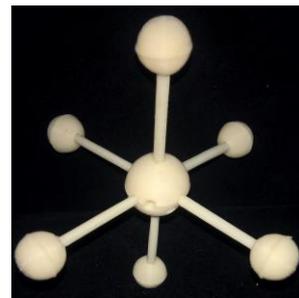


Figura 16. Modelo proposto representando o octaedro

Esses modelos utilizados em aulas de ensino superior e médio, foram analisados por professores e alunos, passaram por diferentes apreciações públicas em encontros científicos, o que permitiu a sua validação (SÁ, FARIA, GANDRA, 2015).

#### 4. Conclusão

Com as possibilidades de contemplarmos as diferentes hibridações de átomos atendidas, a construção dos modelos em impressão 3D permitiu que novas abordagens pedagógicas pudessem ser desenvolvidas. A abstração natural do conteúdo de hibridação e, conseqüentemente, de geometria molecular, foi diminuída, pois isso fica evidente na fácil representação de todas as possíveis estruturas de moléculas. Com esse trabalho, podemos considerar finalizada a investigação iniciada no ano de 2012 e desenvolvida em uma série de etapas, uma vez que foi discutida a problemática dos modelos de geometria molecular utilizados em sala de aula, permitimos o desenvolvimento de um novo modelo e agora a sua construção em 3D.

O modelo construído permitiu a representação de todas as possíveis estruturas de moléculas, incluindo as diferentes possibilidades de uma mesma hibridação, em todos os casos tendo um mesmo átomo como centro, conseguiu mostrar que seu constante uso não desgastaria com o passar do tempo, já que não se observa desgastes nos encaixes e a construção poderia ser feita de forma barata, uma vez que com uma pequena quantidade de material podemos construir várias peças do modelo. Isso nos leva a afirmar que as estruturas utilizadas se apresentam com alta resistência ao desgaste e conseguem superar as falhas apresentadas pelas até então utilizadas e podem ser construídas com um custo baixo. Estão agora disponíveis para serem utilizados em aulas de Química e passam a ser mais uma boa ferramenta para auxílio à aprendizagem de conceitos que envolvem a geometria de moléculas.

#### 5. Referências

BENTO, J. J. F. Desenvolvimento e avaliação de um ambiente de aprendizagem 3D. Bragança: ESA. Relatório de Estágio para Obtenção do Grau de Mestre em TIC na Educação e Formação, 2011.

CARNEIROS, J. C.; RANGEL, J. H. G., LIMA, J. M. R. Construção de modelos moleculares de química utilizando a fibra de buriti. Revista ACTA Tecnológica - Revista Científica - ISSN 1982-422X , Vol. 6, número 1, jan-jun. 2011

GANDRA, L. P.; Coimbra, P. S.; CAVALCANTI, A.; FARIA, A. G. V.; BERGAMO, J. A. Modelos para a representação de estruturas moleculares que contemplam as diferentes hibridações de átomos. Primeiro Seminário de Divulgação Científica e Tecnológica do IFMS – campus Coxim, 2012.

LIMA, M. B.; LIMA-NETO, P. Construção de modelos para ilustração de estruturas moleculares em aulas de química. QUÍMICA NOVA, 22(6) (1999).

LOPES, L. L.; SILVA, M. A. P.; FERNANDES, A. P. S.; MACHADO, M. S.; SILVA, D. S.; SILVA, A. J., CHAVES, D. C. Construção de Modelos Moleculares a partir de materiais alternativos de forma didática para o Ensino de Química. XVI Encontro Nacional de Ensino de Química (XVI ENEQ) e X Encontro de Educação Química da Bahia (X Eduqui) Salvador, BA, Brasil – 17 a 20 de julho de 2012.

MENDONÇA, P. C. C. 'Ligando' as ideias dos alunos à ciência escolar: Análise do ensino de ligação iônica por modelagem. Dissertação do Mestrado em Educação. Universidade Federal de Minas Gerais. Belo Horizonte, MG. 2008.

SÁ, B. C.; GANDRA, L. P.; FARIA, A. G. V. Modelo didático para a representação de estruturas que contempla as diferentes hibridizações de átomos: avaliando a eficácia do modelo. Seminário De Iniciação Científica e Tecnológica (SEMICT) IFMS 2015.

SEBATA, C. E. Aprendendo a imaginar moléculas: uma proposta de ensino de geometria molecular. Dissertação do mestrado profissionalizante em ensino de ciências- Universidade de Brasília, DF. 165p. 2006.

SILVA, J. F. da; GANDRA, L. P.; FARIA, A. G. V. Modelos didáticos para ensino de geometria molecular: dificuldades em contemplar as múltiplas hibridações de um mesmo átomo. In: IV Mostra de Materiais Didáticos de Química, 2014, Ouro Preto. Anais da IV Mostra de Materiais Didáticos de Química, 2014.

TAKAGAKI, L. K. TECNOLOGIA DE IMPRESSÃO 3D. RIT – Revista Inovação Tecnológica, São Paulo, v.2, n. 2, p.28-40, jul/dez. 2012.