

A utilização de modelos moleculares no ensino da geometria molecular: Uma abordagem interdisciplinar

Ricardo Barroso Gomes

Mestre em Ensino de Ciências da Saúde e do Ambiente

Instituição: Universidade Plínio Leite (UNIPLI)

E-mail: ricardogomes188@gmail.com

RESUMO

Devido à dificuldade em compreender as ligações químicas, especialmente as ligações moleculares (covalentes) e a disposição espacial das moléculas, um tema abordado nas aulas de Química do ensino médio, este trabalho interdisciplinar entre Química e Matemática propõe a utilização de modelos moleculares Atomlig e Magical Science para facilitar o aprendizado de geometria molecular. Esta abordagem será integrada ao ensino de geometria plana e espacial por meio de uma atividade prática no laboratório de Ciências de uma escola particular na zona norte do Rio de Janeiro, funcionando como um recurso que estimula e enriquece o processo de ensino-aprendizagem. Além disso, o trabalho inclui a execução de cálculos práticos relacionados à estrutura molecular do hexafluoreto de enxofre (SF_6), onde os comprimentos das ligações interatômicas são usados para calcular a área total, o diâmetro e o volume do sólido geométrico associado à geometria molecular do SF_6 .

Palavras-chave: Geometria Molecular. Interdisciplinaridade. Ensino.

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, a grande dificuldade dos estudantes do ensino médio, sobretudo no conteúdo de Química está na compreensão e visualização de certos temas, tais como a geometria molecular, o que torna a Ciência abstrata e pouco atrativa. Nos conteúdos de Química Orgânica, especificamente, muitos problemas de aprendizagem estão relacionados, geralmente, às deficiências no entendimento das ligações moleculares (covalentes) e do arranjo espacial das moléculas. Como a Química é uma ciência experimental e os experimentos propiciam ao estudante uma compreensão mais científica das transformações que nela ocorre, esse trabalho visa o uso de modelos moleculares nas aulas experimentais de Química, em uma instituição privada de ensino do Rio de Janeiro, com o intuito de tornar a compreensão de conceitos, uma forma prazerosa e ao mesmo tempo lúdica, trabalhando com uma abordagem interdisciplinar entre a Química e a Matemática, com o auxílio do uso de modelos moleculares, como um recurso facilitador de aprendizagem, a fim de esclarecer conceitos como ligações covalentes, estrutura e geometria molecular minimizando as limitações encontradas no ensino médio dessa disciplina.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

De acordo com os Parâmetros Curriculares Nacionais – Ensino Médio (Brasil, 2000), a Química é



uma disciplina essencial para o desenvolvimento humano, servindo como um meio de entender o mundo e de se relacionar com a realidade ao nosso redor. A maneira como se absorvem os conteúdos de Química está ligada a uma nova percepção da ciência e do conhecimento científico, que vai além de um conjunto de teorias e métodos positivistas, sendo vista como modelos teóricos que foram construídos social e historicamente. Esses modelos, que são apenas uma de várias formas de interpretar a complexidade e a diversidade da realidade, se manifestam por meio de códigos e símbolos químicos que, embora possuam um grande potencial para explicar, também apresentam suas limitações.

Como qualquer porção da matéria, as moléculas ocupam lugar no espaço e apresentam uma forma tridimensional. As moléculas são formadas por átomos unidos através de ligações químicas do tipo covalentes (moleculares) e podem apresentar na sua composição química com diversas estruturas tridimensionais, de dois a milhares de átomos. A disposição espacial dos núcleos atômicos das moléculas será o fator primordial para determinar as diferentes formas geométricas.

A teoria de repulsão de elétrons de valência (VSPER) é um modelo usado em Química para prever a geometria de moléculas individuais do número de átomos que cercam seus átomos centrais. A teoria da VSPER parte da premissa de que os pares de elétrons da camada de valência se repelem, adotando maneira tal que minimize essas repulsões, determinando, assim, sua geometria molecular. Os pares de elétrons, sejam ligantes ou não-ligantes, se repelem, mutuamente, para se obter o máximo de distância entre eles. Isso resulta em arranjos geométricos específicos ao redor do átomo central, determinados pelo número de pares de elétrons ao redor desse átomo (Brown et al., 2016).

No quadro a seguir (Tabela 1), que apresenta as geometrias moleculares mais comuns, pode-se observar a relação da geometria das moléculas com o número de nuvens eletrônicas localizadas ao redor do átomo central e o número de átomos a ele ligados.

Tabela 1: Exemplos de moléculas e suas geometrias via VSEPR.

Número de domínios eletrônicos	Configuração dos domínios eletrônicos	Domínios ligantes	Domínios não ligantes	Geometria molecular	Exemplo
2	 Linear	2	0	 Linear	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$
3	 Trigonal plana	3	0	 Trigonal plana	$\begin{array}{c} \text{:F:} \\ \\ \text{:B:} \\ / \quad \backslash \\ \text{:F:} \quad \text{:F:} \end{array}$
		2	1	 Angular	$\left[\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \backslash \\ \text{:N:} \\ / \quad \backslash \\ \text{:O:} \end{array} \right]^-$
4	 Tetraédrica	4	0	 Tetraédrica	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
		3	1	 Piramidal trigonal	$\begin{array}{c} \text{:N:} \\ \\ \text{H} - \text{N} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
		2	2	 Angular	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \\ \text{H} - \text{O} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

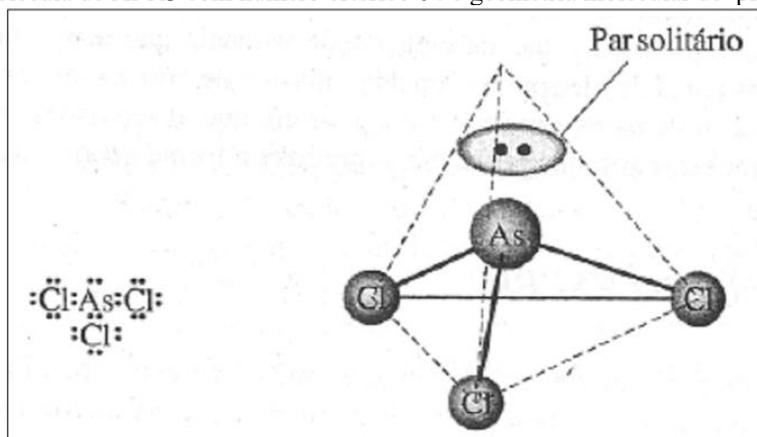
Fonte: Brown et al., 2016

Arelado ao conhecimento teórico, o uso de modelos moleculares é promissor, na medida em que possibilita a visualização das ligações químicas existentes nas moléculas e desenvolve nos alunos a percepção do arranjo espacial destas (LIMA; LIMA NETO, 2009).

Pode-se determinar a geometria molecular com o cálculo do número estérico de um átomo que é definido como a soma do número de átomos ligados a ele mais o número de pares de elétrons livres não-ligantes (Russel, 2008). Para exemplificar podemos observar a fórmula eletrônica do tricloreto de arsênio (Figura 01) com 3 ligações moleculares e um par de elétrons livres no átomo central, tendo como número

estérico 04.

Figura 1: A molécula de AsCl_3 com número estérico 04 e geometria molecular de pirâmide trigonal



Fonte: Russel, 2008

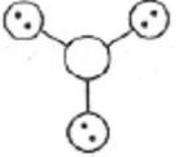
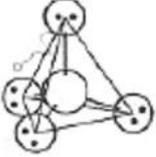
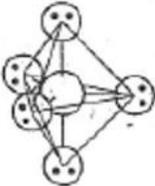
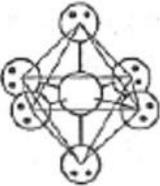
Resumindo, a teoria VSEPR afirma que os pares de elétrons (ligantes e não ligantes) ao redor de um átomo central se repelem, e a geometria molecular é a forma que minimiza essas repulsões e o número estérico ajuda a determinar a geometria molecular, indicando o arranjo espacial dos pares de elétrons e seus ângulos de ligação observados nas tabelas 2 e 3.

Tabela 2: Geometria espacial relacionada aos números estéricos, domínios ligantes e não-ligantes

NÚMERO ESTÉRICO	DOMÍNIOS LIGANTES	DOMÍNIOS NÃO LIGANTES	GEOMETRIA MOLECULAR
2	2	-	LINEAR
3	3	-	TRIGONAL PLANA
4	4	-	TETRAÉDRICA
4	3	1	PIRAMIDAL TRIGONAL
4	2	2	ANGULAR
5	5	-	TRIGONAL BIPIRAMIDAL
6	6	-	OCTAÉDRICA

Fonte: Brown et al., 2016

Tabela 3: Orientação espacial dos pares de elétrons ao redor de um átomo central

<i>Número estérico</i>	<i>Orientação</i>	<i>Diagrama</i>	<i>Ângulo entre pares</i>
2	Linear		180°
3	Trigonal plana		120°
4	Tetraédrico		109,5°
5	Trigonal bipiramidal		90°, 120°
6	Octaédrico		90°

Fonte: Russel, 2008

À medida que o ensino evolui a cada dia, tanto os processos utilizados para comunicar conteúdos aos alunos quanto às metodologias nas quais o conteúdo é transmitido devem evoluir também, para ter aulas mais envolventes, divertidas e enriquecedoras e nunca tirar o interesse pelas matérias a serem estudadas na sala de aula. O uso de novos instrumentos no ensino de Química, como neste caso o modelo molecular, pode, portanto, ser considerado como uma técnica que contribuiria para que a matéria fosse aprendida de uma forma menos cansativa e mais interessante, o que poderia garantir desempenho e interesse na aula e, conseqüentemente, a qualidade do que é ensinado e aprendido. Os métodos de ensino-aprendizagem estão sendo gradualmente transformados e tanto os professores quanto os alunos, atores envolvidos no processo ou sistema educacional, são obrigados a se adaptar a essas transformações (Ausubel, 2003).

Os modelos moleculares na associação com os conhecimentos de geometria espacial podem ser desenvolvidos por cálculos que permitam a obtenção dos sólidos geométricos e visualização de figuras planas em moléculas, fazendo um trabalho interdisciplinar necessário com a Matemática. Segundo o documento Semtec-MEC, 2000:

[...] O conhecimento especializado, o conhecimento químico isolado, é necessário, mas não



suficiente, para o entendimento do mundo físico, pois não é capaz de estabelecer explícita e constantemente, por si só, as interações com outros subsistemas. Isso é verdade não só na Química; por exemplo, para a compreensão da respiração humana não basta o conhecimento do aparelho respiratório: é necessário que se conheçam conceitos como pressão atmosférica, dissolução e transporte de gases, combustão e capilaridade. Na interpretação do mundo através das ferramentas da Química, é essencial que se explicita seu caráter dinâmico (Brasil 2000, p.31).

Há um consenso de que a experimentação motiva os alunos em qualquer nível de escolaridade (GIORDAN, 1999). Com base no exposto, e considerando o objetivo de desenvolver às habilidades e competências dos alunos, propõe-se o uso de modelos moleculares, que por sua vez integram o conhecimento matemático para identificar e projetar modelos moleculares em Química, contribuindo para a aprendizagem da geometria molecular, que é uma abordagem concreta para o ensino da geometria molecular como parte do ensino de Química no ensino médio.

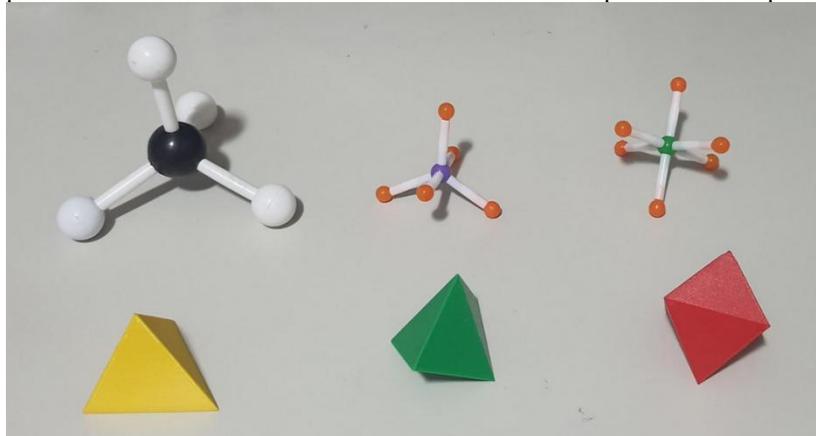
3 METODOLOGIA

Para a montagem dos modelos moleculares, voltado para o ensino de Química Orgânica, foram necessários o uso de kits dos modelos moleculares Atomlig e Magical Science, previamente separados com a quantidade necessária para a montagem das moléculas que foram selecionadas com suas respectivas geometrias moleculares distintas, para tanto foi necessário a utilização da Teoria de Repulsão dos Pares de Elétrons da Camada de Valência (VSEPR) (Brown et al., 2016) para ajustar as quantidades de ligações químicas e ângulos de ligação.

Primeiramente, em sala de aula, tivemos o conteúdo da geometria das moléculas sendo relacionado ao VSEPR e às formas dos poliedros. As geometrias linear, angular, trigonal planar, piramidal, tetraédrica, bipiramidal trigonal e octaédrica foram selecionadas usando uma única molécula de cada tipo como ilustração. As moléculas escolhidas foram dióxido de carbono (CO_2 - LINEAR), tricloreto de berílio (BeCl_3 - TRIGONAL PLANAR), gás metano (CH_4 - TETRAÉDRICA), pentacloreto de fósforo (PCl_5 - BIPIRAMIDAL TRIGONAL), água (H_2O - ANGULAR), amônia (NH_3 - PIRAMIDAL) e hexafluoreto de enxofre (SF_6 - OCTAÉDRICA). Para montar suas geometrias moleculares, os alunos tiveram que: representar a distribuição de Lewis (fórmula eletrônica); verificar a quantidade de pares de elétrons ligantes e não-ligantes (a estrutura mais provável foi então delineada, de acordo com o VSEPR, expressa nas Tabelas 2 e 3), sendo todos os pares de elétrons ligantes e não-ligantes ao redor do átomo central por repulsão eletrônica, mantidos o mais distante possível uns dos outros (ATKINS et al., 2018). A usar o modelo VSEPR, as ligações simples, duplas ou triplas são indistintamente tratadas como um conjunto de elétrons (domínios eletrônicos) que se afasta ao máximo de outras ligações químicas e também de pares de elétrons não usados em ligações. Após a montagem, o gás metano, o pentacloreto de fósforo e o hexafluoreto de enxofre foram comparados com suas formas geométricas (Figura 02). O SF_6 foi selecionado para a demonstração dos cálculos da área lateral, diâmetro e volume do sólido geométrico com os dados de acordo

com a literatura.

Figura 02: Gás metano, pentacloreto de fósforo e o hexafluoreto de fósforo comparado seus respectivos sólidos geométricos

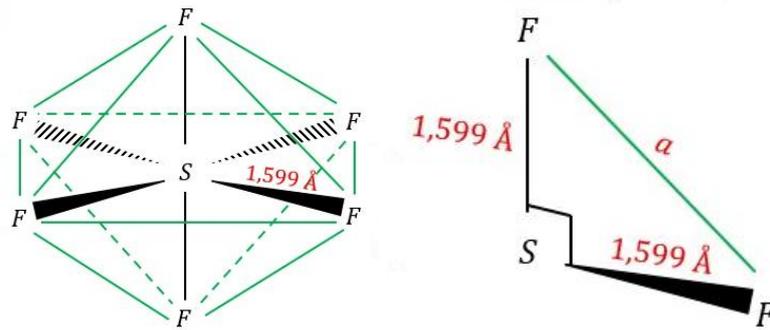


Fonte: Autor

No caso da molécula SF_6 , embora suas ligações interatômicas sejam polares, visto que, a diferença de eletronegatividade entre os átomos envolvidos nas ligações não é nula, a molécula é apolar, pois apresenta geometria bipiramidal quadrangular, sendo todos os átomos ao redor do S (enxofre) idênticos. Sendo assim, o seu momento de dipolo ou momento dipolar é zero. Logo, a molécula SF_6 com sua geometria otimizada apresenta momento dipolo igual a zero no estado fundamental sendo, portanto um molécula apolar, ângulo de ligação F – S – F de 90° e distâncias de ligações S—F de $1,599 \text{ \AA}$ (angstroms) (J. L. SILVA1; J. V. FERREIRA; E. A. C. PAVÃO, 2020). O arranjo espacial na molécula SF_6 é a bipirâmide quadrada ou bipiramidal quadrangular, visto que os 6 pares de elétrons ao redor do S (enxofre), são pares ligados ou compartilhados, sendo o arranjo espacial mencionado o que possibilitará o maior distanciamento entre esses pares eletrônicos, minimizando as repulsões entre os mesmos (Russel, 2008). No espaço, a molécula dá origem a um octaedro regular, com os centros dos átomos de flúor correspondendo aos vértices do octaedro e o centro do átomo de enxofre corresponde ao centro desse sólido.

Com bases nessas informações, pode-se calcular a área total, a diagonal do sólido formado e o seu respectivo volume. A área total é calculada pela fórmula $A = 2.a^2.\sqrt{3}$, sabendo que as distâncias de ligações S—F de $1,599 \text{ \AA}$ (angstroms), conforme a Figura 02.

Figura 03: Hexafluoreto de enxofre e suas distâncias interatômicas



Fonte: Autor

Inicialmente, devemos calcular o valor da aresta do octaedro regular utilizando o teorema de Pitágoras, utilizando os dados do triângulo retângulo formado pelas distâncias interatômicas entre o enxofre (S) e o flúor (F) e entre os átomos de flúor conforme a Figura 02:

$$\begin{aligned}
 a^2 &= (S - F)^2 + (S - F)^2 \\
 a^2 &\approx (1,599)^2 + (1,599)^2 \\
 a^2 &\approx 2,557 + 2,557 \\
 a^2 &\approx 5,114 \\
 a^2 &\approx \sqrt{5,114} \\
 a^2 &\approx 2,261 \text{ \AA}
 \end{aligned}$$

Com o valor da aresta do octaedro faz-se o cálculo da área total formado pelo SF₆:

$$\begin{aligned}
 A &= 2 \cdot a^2 \cdot \sqrt{3} \\
 A &\approx 2 \cdot 2,261 \cdot \sqrt{3} \\
 A &\approx 7,832 \text{ \AA}
 \end{aligned}$$

Dando continuidade, o cálculo do volume total será dado por $V = (a^3 \cdot \sqrt{2}) / 3$, logo:

$$\begin{aligned}
 V &= (a^3 \cdot \sqrt{2}) / 3 \\
 V &\approx (2,261^3 \cdot \sqrt{2}) / 3 \\
 V &\approx (2,261^3 \cdot \sqrt{2}) / 3 \\
 V &\approx 11,558 \cdot \sqrt{2} / 3 \\
 V &\approx 16,345 / 3 \\
 V &\approx 5,448 \text{ \AA}^3
 \end{aligned}$$

Por fim, é concluído com o cálculo da diagonal do hexafluoreto de enxofre:

$$\begin{aligned}
 D &= a \cdot \sqrt{2} \\
 D &\approx 2,261 \cdot \sqrt{2} \\
 D &\approx 3,198 \text{ \AA}
 \end{aligned}$$

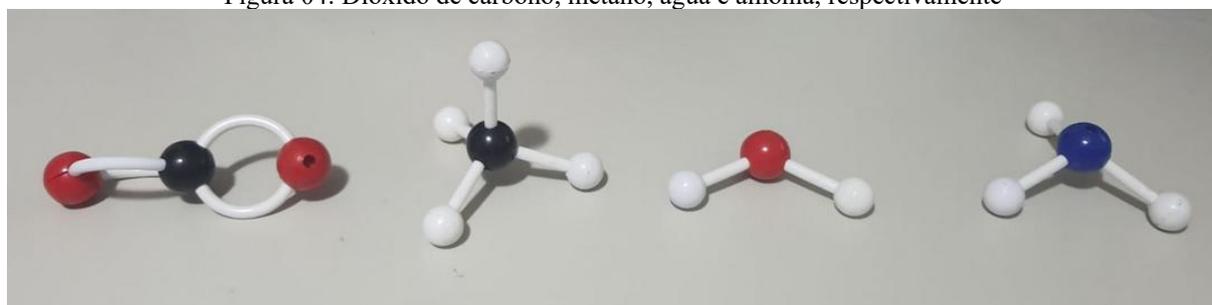
Como podemos observar, é plausível e tangível, a interdisciplinaridade das aulas de Química e Matemática, favorecendo, desse modo a compreensão dos conceitos e a aprendizagem da geometria

molecular e de sólidos geométricos.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

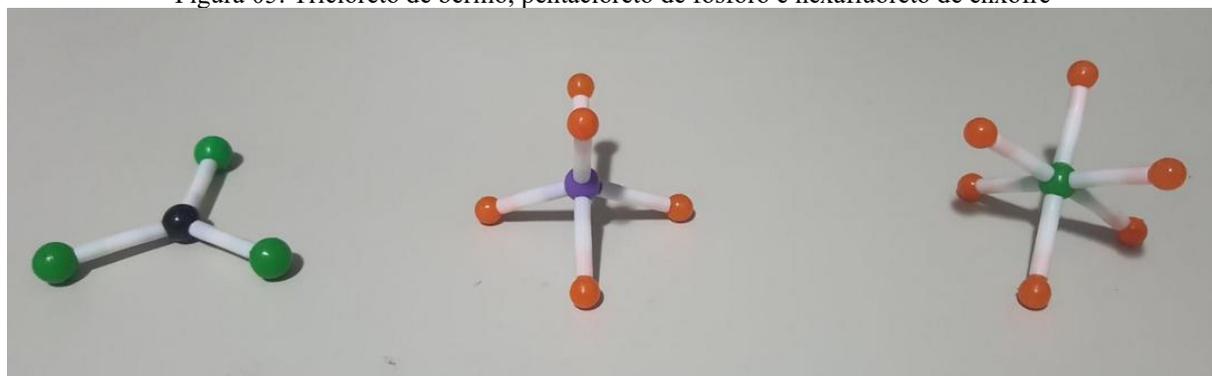
Após as discussões em sala de aula sobre as geometrias moleculares, os discentes foram capazes de montarem com os kits moleculares, moléculas propostas sem grandes dificuldades fazendo uma comparação das diversas formas geométricas diferenciando-as quanto ao número estérico, os elétrons ligantes e não-ligantes de cada estrutura proposta. Os resultados obtidos nas montagens em sala de aula podem ser visualizados na Figura 03 com o uso do modelo molecular Atomlig e na Figura 04 construído com o kit Magical Science:

Figura 04: Dióxido de carbono, metano, água e amônia, respectivamente



Fonte: Autor

Figura 05: Tricloreto de berílio, pentacloreto de fósforo e hexafluoreto de enxofre



Fonte: Autor

Consoante Carneiro et al. (2011), a aplicação de modelos moleculares é promissora, pois permite visualizar as ligações químicas nas moléculas, promovendo nos alunos uma compreensão do arranjo espacial dessas estruturas. Giordan (1999) destaca que incorporar a experimentação como parte de um processo investigativo é essencial, uma ideia compartilhada por educadores do ramo das ciências, já que a formação do pensamento e das atitudes dos alunos deve ocorrer preferencialmente através de atividades de investigação.

Além disso, os Parâmetros Curriculares Nacionais – Ensino Médio (Brasil, 2000) afirmam que a Química, assim como outras áreas do conhecimento, utiliza uma linguagem matemática que se relaciona



com fenômenos em níveis macro e microscópico. A proficiência nessa linguagem é fundamental para desenvolver competências e habilidades que envolvem a construção de relações lógico-empíricas, lógico-formais, hipotético-lógicas e raciocínio proporcional.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O Kit Molecular, como ferramenta pedagógica, cumpriu sua função ao facilitar a compreensão de conceitos importantes e abstratos pelos alunos, os quais muitas vezes são mal interpretados devido às limitações de explicações abstratas e bidimensionais em sala de aula. Além disso, promoveu uma conexão interdisciplinar com a Matemática. O intuito do desenvolvimento desta proposta é abrir caminhos para diversos estudos interdisciplinares, não apenas com a Matemática, mas também com outras áreas do conhecimento. Seu uso como ferramenta pedagógica visa práticas docentes mais contextualizadas, integradas e que facilitem o ensino e a aprendizagem de conceitos abstratos e complexos, estimulando a motivação interna, o raciocínio, a argumentação e a interação entre os alunos e o professor.



REFERÊNCIAS

ATKINS, P.; JONES, L.; LAVERMAN, L. Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente. Porto Alegre: Bookman Editora, 2018.

AUSUBEL, David Paul. Aquisição e retenção do conhecimento: uma perspectiva cognitiva. Tradução de L. Teopisto. São Paulo: Paralelo, 2003.

BRASIL. Parâmetros Curriculares Nacionais: Ensino Médio. Parte III - Ciências da Natureza, Matemática e suas Tecnologias. Brasília: MEC; Secretaria da Educação Média e Tecnológica (SEMTEC), 2000.

BROWN, T. L.; LEMAY, H. E.; BURSTEN, B. E. Química: a Ciência Central. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2016.

CARNEIRO, F.J.C. et al. Construção de Modelos Moleculares Para o Ensino de Química Utilizando a Fibra de Buriti. ACTA Tecnológica. v. 6, n. 1, 2011.

GIORDAN, M. O papel da experimentação no ensino de ciências. Química Nova na Escola, n. 10, p. 43-49, 1999.

J. L. SILVA¹; J. V. FERREIRA; E. A. C. PAVÃO. Estudo teórico computacional do hexafluoreto de enxofre: um gás de efeito estufa. HOLOS, Ano 36, v.2, e5910, 2020.

LIMA, M.B.P de; LIMA-NETO, P. de. Construção de modelos para ilustração de estruturas moleculares em aulas de química. Química Nova, 1999.

RUSSEL, John B. Química Geral. Tradução de Márcia Guekezian et al. Rio de Janeiro: LTC, 2008.