

**MODELOS MOLECULARES: PASSADO E PRESENTE**  
(Molecular models: past and present)

**Helmoz Rosenaiaim Appelt** [helmoz@unifra.br]

**Julieta Saldanha de Oliveira** [julieta@unifra.br]

**Márcio Marques Martins** [marciomm@unifra.br]

Centro Universitário Franciscano – UNIFRA

Rua do Andradas, 1614, Centro, Santa Maria, RS, CEP: 97010-032

**Resumo**

Os modelos moleculares são largamente utilizados nas aulas de química devido a facilidade de visualização espacial de estruturas químicas e ligações químicas. Há um número grande de modelos moleculares disponíveis aos professores de química. Para a construção de modelos moleculares pode-se utilizar os mais diversos materiais, desde materiais concretos tais como madeira ou metal até a utilização de sofisticados programas computacionais. Visando aperfeiçoar o processo de ensino-aprendizagem este trabalho mostra a evolução dos modelos moleculares, desde as primeiras propostas até a atualidade com o uso de modernos *softwares*.

**Palavras-chave:** modelo molecular, ensino-aprendizagem, ensino de Química

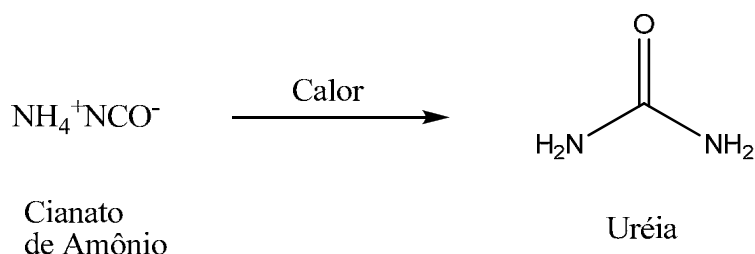
**Abstract**

Molecular models are widely used in chemistry classrooms due to easiness of spatial visualization of chemical structures and chemical bonds. There is a huge number of molecular models available to the chemistry teacher. To build a molecular model one can use different materials, from concrete materials such as wood or metal, up to the use of sophisticated computational softwares. Aiming at improving the process of teaching-learning, the present work shows the evolution of molecular models, from the first proposals up to the present ones with the use of modern softwares.

**Keywords:** molecular model, teaching-learning, teaching of chemistry

**Introdução**

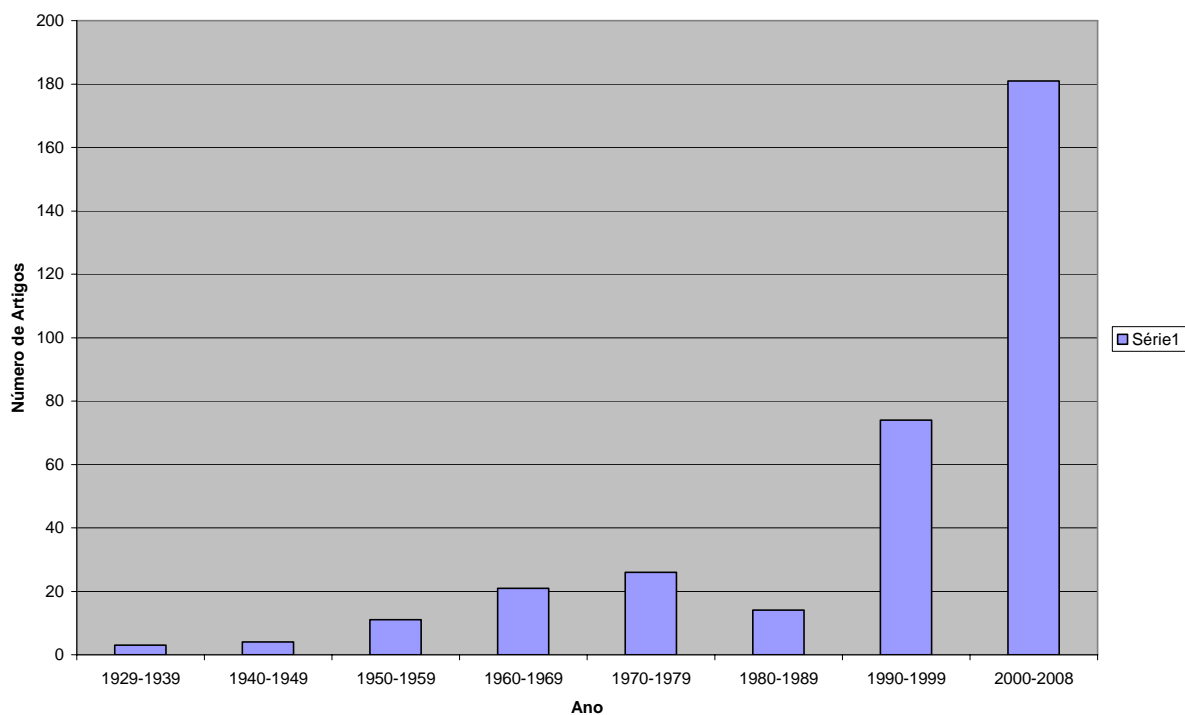
A química como um todo, e a química orgânica em especial, teve seu maior desenvolvimento a partir do século XIX. Alguns marcos importantes para esse desenvolvimento foram a síntese da uréia, por Friederich Wohler, em 1828 (Esquema 1), que determinou o fim da Teoria do Vitalismo, e posteriormente a Teoria Estrutural, por Kékulé, em 1860, que postulou que o carbono seria tetravalente (Solomons, 1996).



**Esquema 1:** Síntese da uréia

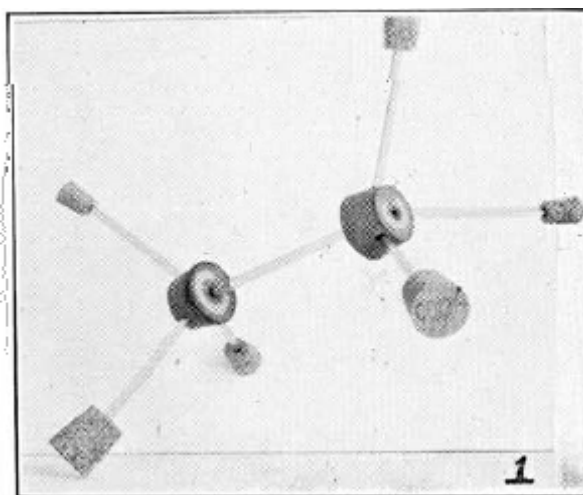
A estrutura dos compostos de carbono, como nós os conhecemos hoje, com estrutura tridimensional, foi proposta em 1874, por Le Bell e van't Hoff. Esses pesquisadores propuseram





**Figura 2:** Gráfico de distribuição de publicações envolvendo a palavra-chave “*molecular model*” na revista *Journal of Chemical Education*.

Em 1929, Minné propôs a construção de um modelo para demonstrar a existência dos estereoisômeros do ácido tartárico, com a utilização de rolhas de cortiça e bastões de vidro. Rolhas de tamanhos diferentes representavam os diferentes substituintes ligados aos carbonos quirais (Figura 3).



**Figura 3:** Modelo molecular do ácido tartárico, proposto por Minné (1929)

Brode e Boom (1932) descreveram a utilização de modelos estruturais em um curso experimental de química orgânica elementar, para desenvolver os conceitos de séries homólogas e isomerismo. Segundo os autores isso foi possível devido à aquisição de kits de modelos comerciais

a preços acessíveis. São dados exemplos de exercícios simples de laboratório para que o estudante iniciante desenvolva por si só os conceitos básicos de química orgânica estrutural (Figura 4).

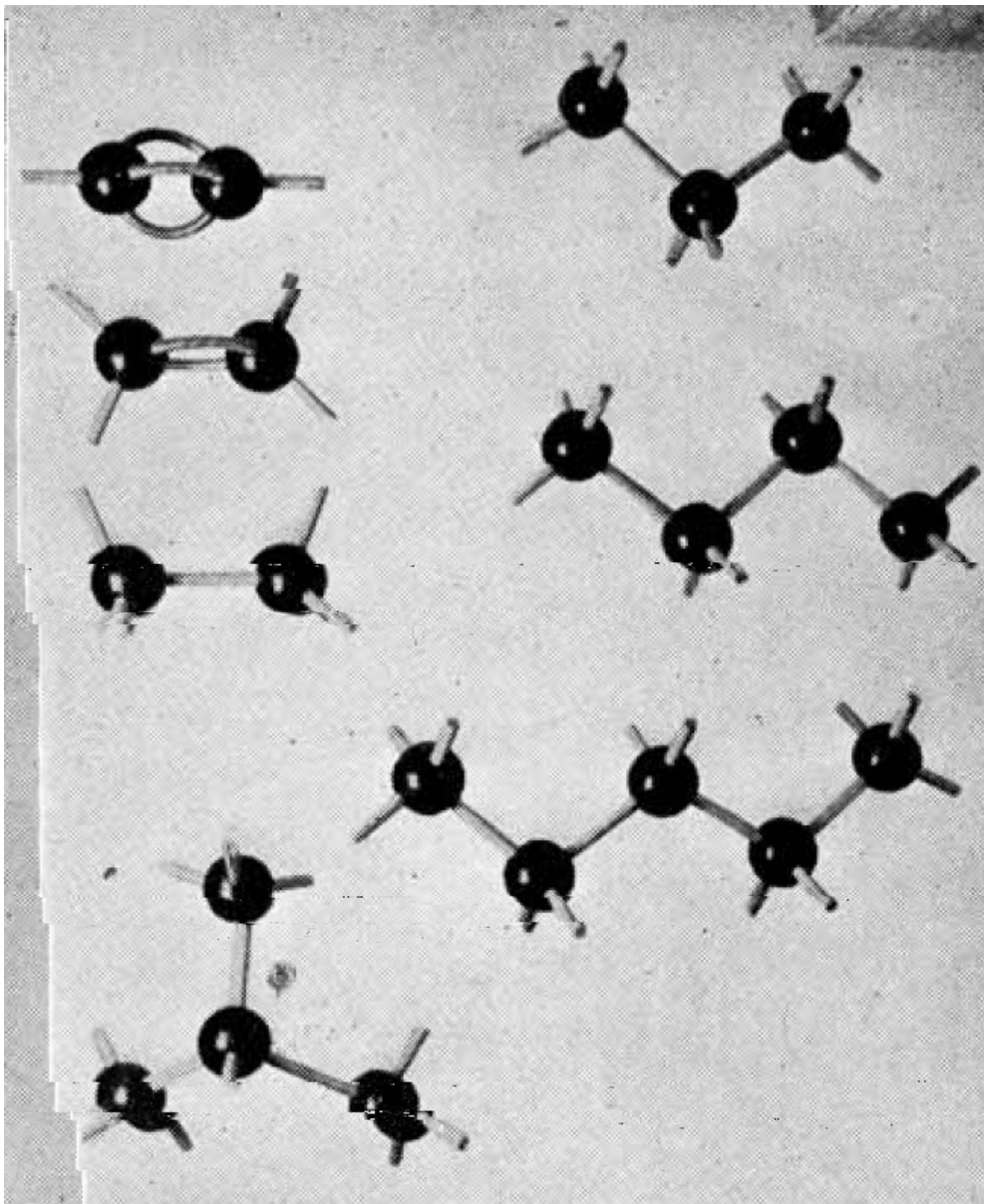
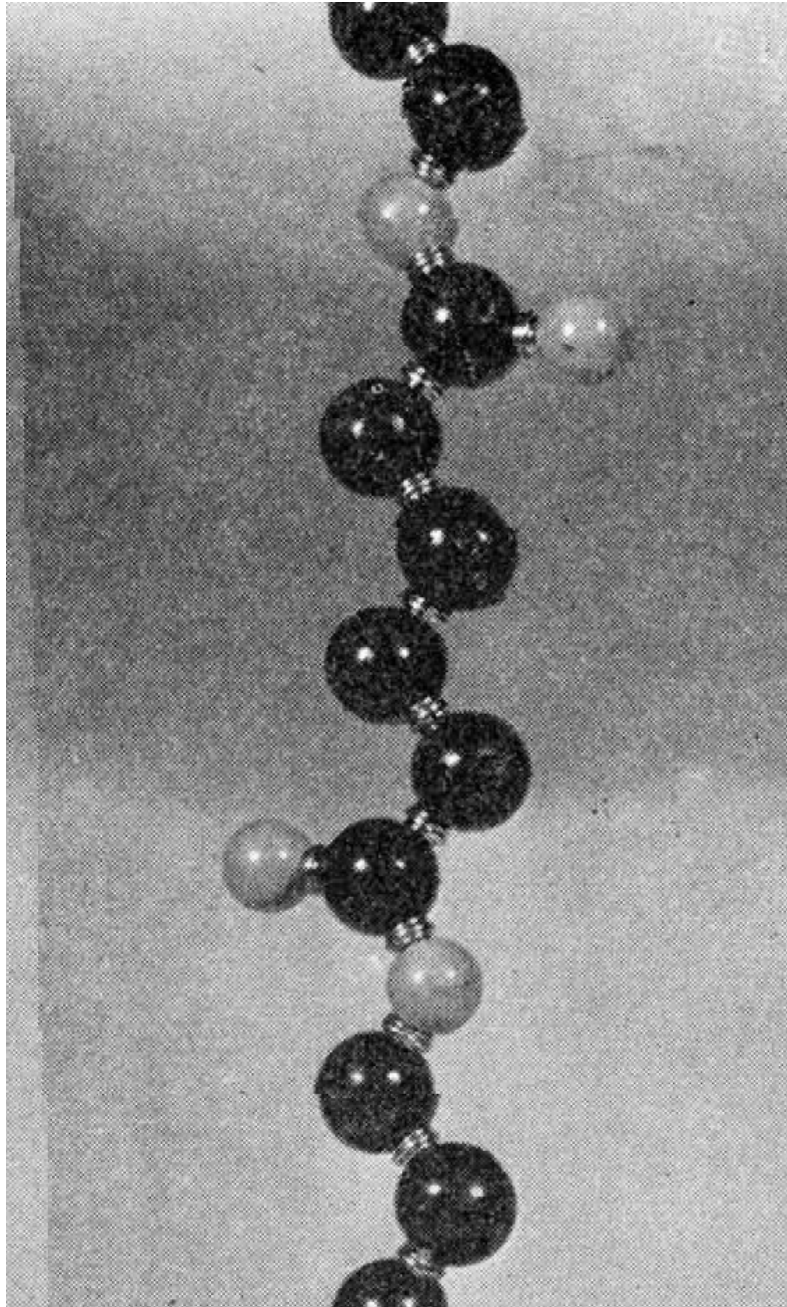


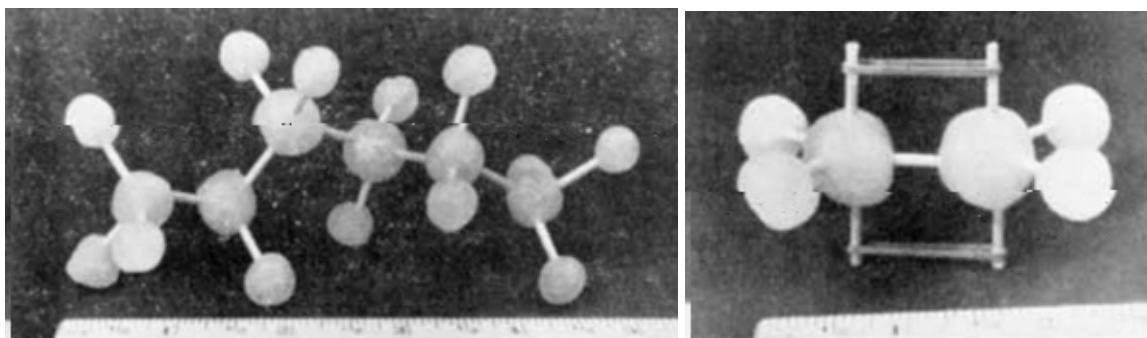
Figura 4: Esqueleto carbônico das estruturas propostas por Brode e Boom (1932) ilustrando ligações simples, duplas e triplas entre carbonos.

Um modelo molecular feito a partir de esferas de madeira unidas por botões de pressão foi proposto por Black e Dole (1941) (Figura 5). Os botões de pressão permitem livre rotação em torno das ligações e ao mesmo tempo mantém os átomos fortemente unidos entre si. Detalhes são dados no trabalho para a confecção de tais modelos, incluindo métodos para a obtenção dos ângulos tetraédricos para as ligações. Esses modelos foram utilizados não somente para observar ligações nas moléculas, também rotações em torno das ligações e conseqüentemente, conformações espaciais.



**Figura 5:** Modelo molecular proposto por Black e Dole (1941). Os átomos são unidos por botões de pressão.

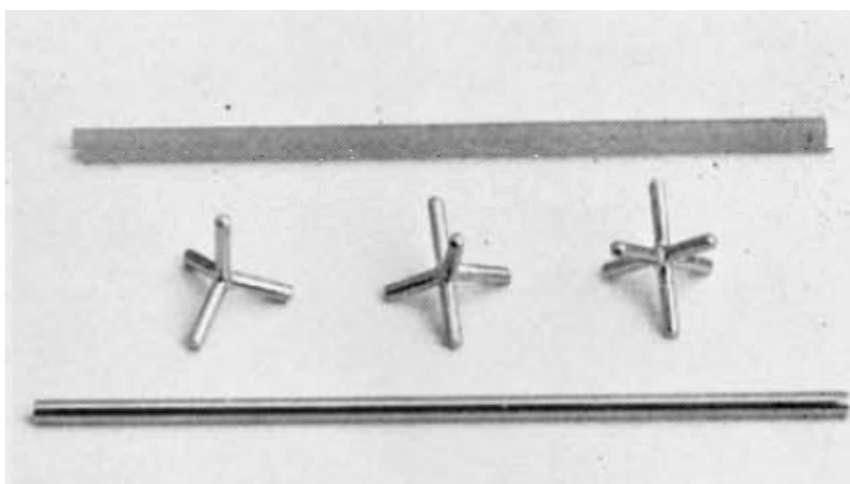
Em 1948, Campbell propôs a construção de modelos para os diferentes átomos da Tabela Periódica mantendo a proporção de 1 polegada para 1 ângstrom. Essa dimensão mostrou-se adequada para a utilização em sala de aula. A partir desses modelos foram construídas várias moléculas. Já Tanaka, em 1957, propôs a construção de modelos moleculares utilizando materiais de baixo custo, como cera, para confecção das esferas, palitos de madeira para as ligações entre átomos e pequenas tiras de borracha para representar ligações duplas (Figura 6). Esse modelo mostrou-se superior a outros modelos utilizados na época, como os confeccionados com argila de modelar.



**Figura 6:** Modelos feitos por Tanaka (1957), utilizando cera, para moldar os átomos. Esquerda: hexano; direita: etileno

Anker (1959) descreve o método de construção de modelos a partir de esferas de borracha ligadas por palitos de madeira. A forma de confecção e definição dos ângulos de ligação no modelo são bem detalhadas. Já Pierce (1959), descreve a receptividade dos estudantes para conceitos envolvendo geometria molecular, após um exercício de construção de modelos moleculares com materiais simples.

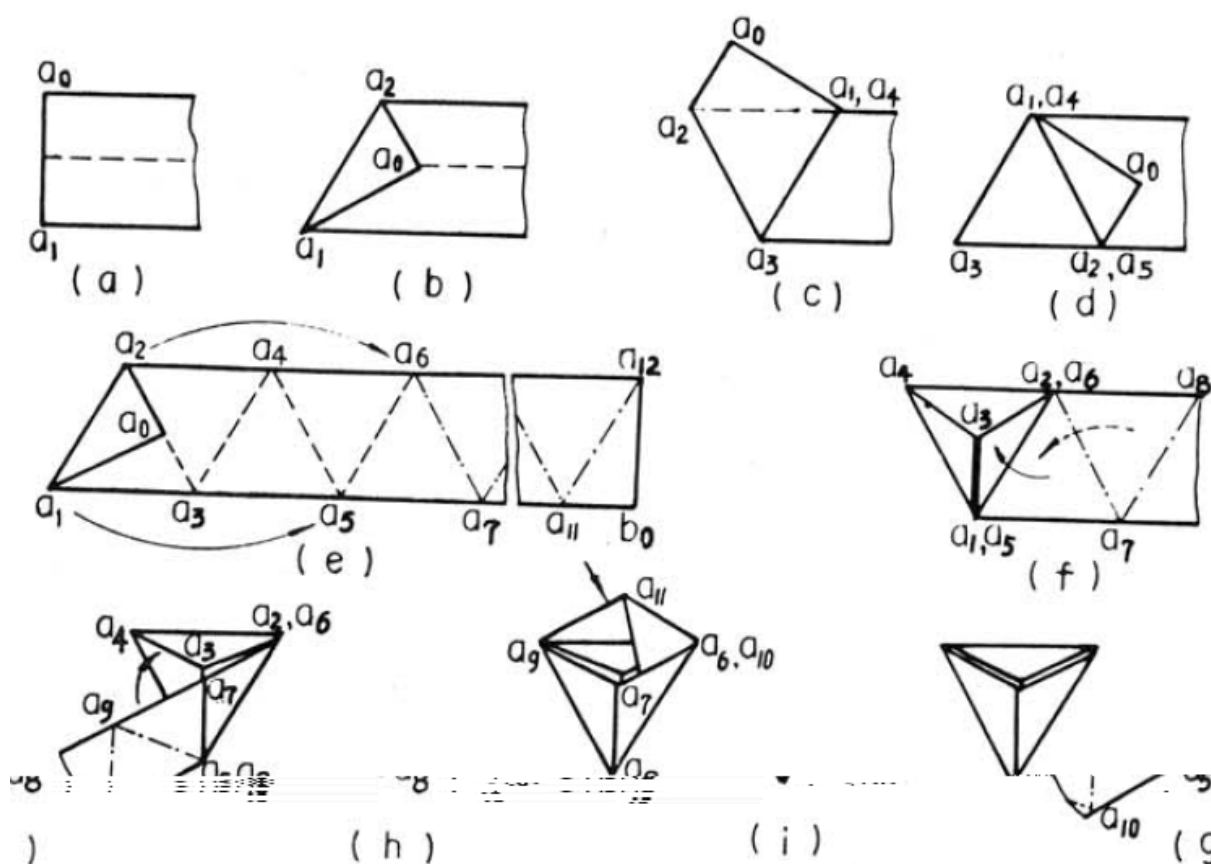
Os modelos moleculares representando apenas o esqueleto de carbono (*Framework Molecular Orbital*) foram propostos por Brumlik, Barret e Baumgalten (1964), sendo que a maioria dos átomos eram representados por apenas três modelos: tetraédrico, bipiramidal trigonal e octaédrico. Os átomos foram confeccionados em metal, e as ligações, por canudos de plástico ou metal (figura 7). Posteriormente, este modelo tornou-se disponível comercialmente.



**Figura 7:** Modelo molecular produzido por Brumlik et al. (1964). Os átomos são metálicos.

Ainda em 1964, Larson propôs a construção de modelos moleculares do mesmo tipo acima, com a utilização de arames revestidos por uma película plástica, com cores diferentes para representar diferentes átomos (C, N, O).

He et al. propuseram em 1990, a construção de modelos tetraédrico, trigonal bipiramidal e outros em papel, pela montagem dos respectivos poliedros.



**Figura 8:** Modelo tetraédrico produzido em papel, por He et al. (1990).

A partir do ano de 1991, com a popularização das ferramentas computacionais, começam a ser publicados os primeiros trabalhos dando ênfase à utilização de softwares para a simulação de estruturas em 2D e 3D. Esses softwares eram inicialmente de acesso limitado, com algumas aplicações específicas, e com a evolução da informática e popularização de programas computacionais, as aplicações vão aumentando. Tendo-se hoje, modelos para simulação de praticamente qualquer transformação ou estrutura que se necessite para o Ensino de Química.

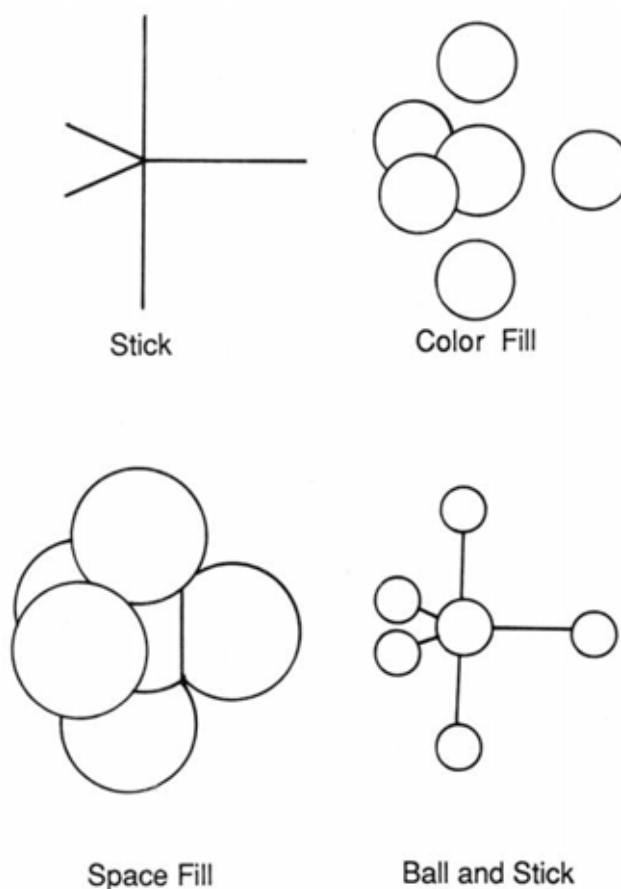
Em 1991, Aduldecha et al. relataram a utilização do *Software Desktop Molecular Modeller* (DTMM), um programa de modelagem molecular que podia ser utilizado para visualizar gráficos computacionais de moléculas, sua construção a partir de moléculas menores ou fragmentos, e a manipulação de estruturas moleculares. Os autores utilizaram o software para construção de moléculas orgânicas e inorgânicas simples, em sala de aula. Nas figuras 9 e 10, estão a interface do programa, e algumas estruturas desenhadas.

FILE	STYLE	VIEW	CALC	EDIT	UTIL
1 Load Molecule	1 Bonds Only	1 Define Window	1 Dist. & Angles	1 Break Bond	1 Fix Fragment
2 Load Fragment	2 Colour Line	2 Bond Project	2 Check Bond Len.	2 Delete Atom	2 Unfix All
3 Save Molecule	3 Stereo Line	3 Plane Project	3 Check Vd. W. Rad.	3 Delete Frag.	3 Set Monitor
4 Del. Mol. File	4 Quick Fill	4 Hide Fragment	4 Minimise Energy	4 Change Atom	4 Unset Monitor
5 Del. Frag. File	5 Sace Fill	5 Hide Hydrogen		5 Rotate Bond	5 Undelete
6 Set Directory	6 Ball and Stick	6 Show All		6 Change Bond	6 Compact Stereo.
7 Restart Prog.	7 Superim. Bonds			7 Make Bond	
				8 Add 1 Atom	
				9 Add 2 Hydro.	
				0 Add 3 Hydro.	

(b) Drop-Down Menu :

FILE	STYLE	VIEW	CALC	EDIT	UTIL
			1 Dist. & Angles		
			2 Check Bond Len.		
			3 Check Vd. W. Rad.		
			4 Minimise Energy		

**Figura 9:** Menu de opções do programa *Desktop Molecular Modeller* (DTMM). (Aduldecha, 1991).



**Figura 10:** Estilos de imagens gerados pelo programa DTMM (Aduldecha et al., 1991)



Bays (1992) faz uma comparação de preços e recursos de vários softwares de modelagem molecular que rodam em *Macintosh*. A maioria desses programas são disponíveis ainda hoje, em versões mais atuais, para *Windows* ou *Linux*. Já Casanova, em 1993, propôs a inclusão de atividades de modelagem molecular em computador nos currículos de química, para o cálculo de moléculas simples. Gasyna (1999) propôs um programa para um curso de Química Computacional no currículo de cursos de graduação em Química.

Nos últimos anos, diferentes exercícios de simulação computacional, estudando as mais diversas propriedades químicas foram propostos para aplicação em sala de aula, tanto de graduação quanto pós-graduação.

Atualmente, temos à disposição centenas de softwares, tanto para a construção de moléculas em duas dimensões, visualização em 3D, quanto para cálculos em química computacional. Entre os softwares mais utilizados, com certeza está o pacote *CHEMBIOFFICE* (CAMBRIDGESOFT), que inclui, programas para desenho de moléculas, visualização em 3D, cálculos de modelagem molecular, buscas em bancos de dados de moléculas, caderno de laboratório, gerenciamento de almoxarifado de produtos químicos, entre outras funções.

Mas com todo o avanço das novas tecnologias, e ferramentas computacionais disponíveis, cada vez mais observamos a necessidade, e o interesse dos estudantes por materiais mais simples, e concretos, que possam ser manuseados. Não apenas objetos virtuais, que são muito úteis no cálculo de equações matemáticas complexas, determinação de geometrias mais estáveis para moléculas, energia potencial de estados de transição, etc., mas que para estudantes iniciantes na química, na maioria das vezes não tem nenhum significado palpável.

Podemos concluir então, que com a evolução da informática, e o desenvolvimento de novas tecnologias, muitos recursos tornaram-se acessíveis, e estão disponíveis para utilização em sala de aula. Mas em determinadas situações, devemos lançar mão de recursos clássicos, sempre tendo como objetivo o melhor aprendizado de nossos alunos.

## Referências

- Aduldecha, S.; Akhter, P.; Field, P.; Nagle, P.; O'sullivan, E.; O'connor, K.; Hathaway, B. J. (1991). The use of the desktop molecular models software in the teaching of structural chemistry. *Journal of Chemical Education*, 68(7), 576-583.
- Anker, R. M. (1959). Construction of molecular models. *Journal of Chemical Education*, 36, (3), 138-139.
- Bays, J. P. (1992). So you want to do molecular modeling? A consumer's guide to desktop modeling programs for the Macintosh. *Journal of Chemical Education*, 69(3), 209-215.
- Black, C. E.; Dole, M. (1941). Molecular models with free rotation. *Journal of Chemical Education*, 18(9), 424-427.
- Brode, W. R.; Boom, C. E. (1932). Molecular models in the elementary organic laboratory, *Journal of Chemical Education*, 9(10), 1774-1982.
- Brumlik, G. C.; Barrett, E. J.; Baumgalten, R. L. (1964). Framework molecular orbital models. *Journal of Chemical Education*, 41(4), 221-223.

Cambridgesoft, ChemBioOffice Ultra 2008, disponível para *download* em <<http://www.cambridgesoft.com/software/ChemBioOffice/>>.

Campbell, J. A. (1948). Structural molecular models. *Journal of Chemical Education*. 25(4), 200-203.

He, F.-C.; Liu, L.-B.; Li, X.-Y. (1990). Molecular models constructed in an easy way. *J. Chem. Ed.*, 67(7), 556-558.

Casanova, J. (1993). Computer-based molecular modeling in the curriculum. *Journal of Chemical Education*, 70(11), 904-909.

Gasyana, Z. L.; Rice, S. A. (1999). Computational chemistry in the undergraduate chemistry curriculum: development of a comprehensive course formula. *Journal of Chemical Education*, 76(7), 1023-1029.

*Journal of Chemical Education*, disponível no endereço eletrônico: <<http://jchemed.chem.wisc.edu/>>, acessado em 14/09/2008.

Minné, N. (1929). Molecular models in organic chemistry. *Journal of Chemical Education*, 6(11), 1984-1985.

Larson, G. O. (1964). Atomic and molecular models made from vinyl covered wire, *Journal of Chemical Education*, 41(4), 219-220.

Pierce, J. B. (1959). Molecular models: a general chemistry exercise. *Journal of Chemical Education*. 36(12), 595.

Roque, N. F.; Silva, J. L. P. B. (2008). A Linguagem química e o ensino da química orgânica. *Química Nova*, 31(4), 921-923.

Solomons, T.W.G. (1996). *Química Orgânica*. 6 ed., Rio de Janeiro: LTC.

Tanaka, J. (1957). Inexpensive molecular models for use in the laboratory. *Journal of Chemical Education*, 34(12), 603.

Recebido em: 01/12/2009

Aceito em: 21/12/2009