

As figuras geométricas e modelos de moléculas

Roberto Ribeiro Paterlini 

Resumo

Neste texto descrevemos a significativa presença das figuras geométricas elementares (polígonos e poliedros) em modelos de moléculas usados na Química. Isso não deve nos surpreender, pois tanto a Matemática quanto a Química estudam a geometria das coisas. Algumas figuras geométricas, como o hexágono e o tetraedro, foram usadas como modelos de moléculas desde meados do século XIX. A partir disso, o desenvolvimento acelerado da Química mostrou-nos que, aparentemente, não existe limite para o uso de polígonos e poliedros como modelos moleculares. Veremos aqui um pouco dessa história, com a qual pretendemos incentivar a interdisciplinaridade entre a Química e a Matemática na Educação Básica. Em particular, o professor de Matemática poderá ilustrar suas aulas de geometria com belos desenhos e modelos de moléculas, demonstrando assim a aplicabilidade dos polígonos e poliedros.

Palavras-chave: Ensino de Geometria e de Química; interdisciplinaridade; modelos geométricos de moléculas.

Abstract

In this text we describe the significant presence of elementary geometric figures (polygons and polyhedra) in models of molecules used in Chemistry. This should not surprise us because both Mathematics and Chemistry study the geometry of things. Some geometric figures, such as the hexagon and tetrahedron, have been used as models of molecules since the mid-19th century. From this, the accelerated development of Chemistry showed us that, apparently, there is no limit to the use of polygons and polyhedra as molecular models. Here we will see a little of this history, with which we intend to encourage interdisciplinarity between Chemistry and Mathematics in Basic Education. In particular, the Mathematics teacher will be able to illustrate his geometry classes with beautiful drawings and models of molecules, thus demonstrating the applicability of polygons and polyhedra.

Keywords: Teaching Geometry and Chemistry; interdisciplinarity; geometric models of molecules.

1. O sonho de Kekulé e um modelo surpreendente: a forma hexagonal do benzeno.

Os hidrocarbonetos são uma classe especial de compostos orgânicos, formados exclusivamente por átomos de carbono e de hidrogênio. O benzeno pertence a essa família, e constitui a base dos hidrocarbonetos aromáticos. O benzeno tem um cheiro forte e é tóxico, inflamável e cancerígeno.

O benzeno tem esse nome devido a que, originalmente, era obtido por extração de uma árvore oriental, chamada benjoeiro. A goma do benjoin, como era chamado, foi descrita por Nostradamus

em 1555, e, posteriormente, por outros estudiosos. O benzeno propriamente dito foi descoberto em 1825 pelo cientista britânico Michael Faraday. A fórmula molecular do benzeno C_6H_6 foi determinada pelo químico alemão Eilhardt Mitscherlich em 1834.

Desde então a geometria do benzeno (isto é, a forma com que os seis átomos de carbono e os seis átomos de hidrogênio organizam-se no espaço) tornou-se um quebra-cabeça para os químicos, que fizeram várias tentativas para descrevê-la. Um deles foi o químico alemão Friedrich A. Kekulé. Esse estudioso propôs primeiramente a teoria da tetravalência do carbono e aventou a possibilidade de ligações múltiplas. Pensando no problema do benzeno, conta ele que teve um sonho no qual viu uma cobra abocanhando o próprio rabo. Interpretando esse sonho, ele propôs, em 1865, a forma hexagonal do benzeno, como está mostrado na Figura 1.

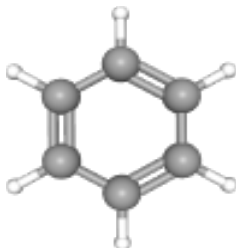


Figura 1: Modelo hexagonal do benzeno. Figura obtida de [10].

Nesse modelo os átomos de carbono ocupam os seis vértices de um hexágono, cujas arestas representam as ligações de cada átomo de carbono com seus dois vizinhos. Cada um dos seis átomos de hidrogênio liga-se a um dos átomos de carbono. Para completar a tetravalência do carbono, cada um desses átomos tem uma ligação dupla com outro átomo de carbono vizinho, de modo que as ligações duplas alternam-se nos seis lados do hexágono.

O modelo de Kekulé é hoje chamado *modelo estático do benzeno*. Esse modelo foi aperfeiçoado, pois se descobriu, mais tarde, o fenômeno da ressonância. Segundo essa propriedade, as ligações duplas “movimentam-se” ao longo do anel, mantendo sempre a alternância, e nunca se fixando em nenhuma das duas posições.

Observamos também que, mesmo no modelo estático, os seis átomos de carbono não formam um hexágono regular. As ligações duplas, da ordem de $1,30 \text{ \AA}$, são menores do que as simples, que são da ordem de $1,53 \text{ \AA}$ [1 \AA (angstrom) = 10^{-10} m]. Entretanto, para certas finalidades, podemos adotar como modelo o hexágono regular, por exemplo, na aplicação do método de Pólya-Redfield para contagem de isômeros de compostos que têm como esqueleto um anel benzênico C_6 .

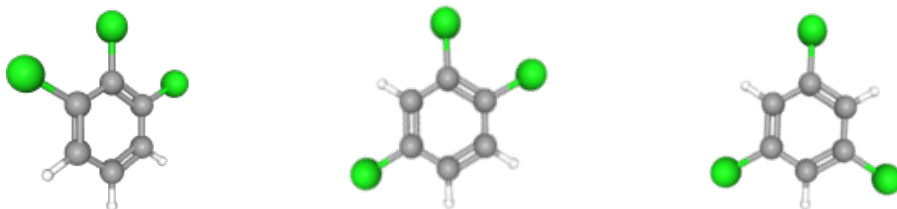


Figura 2: Da esquerda para a direita, representações do 1,2,3, do 1,2,4 e do 1,3,5-triclorobenzeno, respectivamente, os três compostos com fórmula $C_6H_3Cl_3$. Desenhos obtidos de [10].

Vemos, na Figura 2, os três compostos aromáticos com fórmula $C_6H_3Cl_3$. Outros desenhos, obtidos

por uma rotação ou reflexão do hexágono regular, são considerados representações repetidas.

2. Outras moléculas com geometria poligonal.

Os *alcanos cíclicos* constituem uma família de hidrocarbonetos com fórmula C_nH_{2n} na qual os átomos de carbono, ou parte deles, formam um polígono (simples, fechado). Exemplos são apresentados na Figura 3, em que vemos: o ciclopropano C_3H_6 , o ciclobutano C_4H_8 , o ciclopentano C_5H_{10} , o ciclohexano C_6H_{12} e o cicloheptano C_7H_{14} . Nos alcanos cíclicos as ligações entre os átomos de carbono são simples.

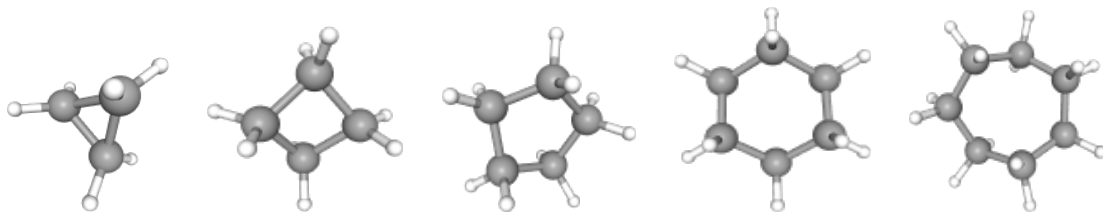


Figura 3: Modelos poligonais com fórmula C_nH_{2n} , $n = 3, \dots, 7$. Figuras obtidas de [10].

Observamos que toda molécula é um objeto tridimensional, e os ângulos entre as ligações, assim como seus comprimentos, nem sempre são representados com precisão nos desenhos. Em geral os ciclos (considerando apenas os átomos de carbono) não são polígonos regulares. As representações regulares e planares podem ser usadas para melhor ilustração das propriedades combinatórias ou para aplicação de técnicas de contagem de isômeros.

Modelos poligonais de hidrocarbonetos podem ter ligações duplas ou triplas, pelo que recebem outras denominações, como alcenos e alcinos cíclicos.

Ocorre também que modelos cíclicos podem conter outros átomos, não só os de carbono. São chamados heterocíclicos. Um exemplo é a pyridine C_5H_5N , na qual o anel hexagonal é constituído por cinco átomos de carbono e um de nitrogênio. Confira a Figura 4. A pyridine participa da fabricação de inúmeros compostos usados na agricultura e na medicina. Na mesma figura vemos o caprolactam $(CH_2)_5C(O)NH$, um composto usado para fabricar *nylon*, fibras e plásticos.

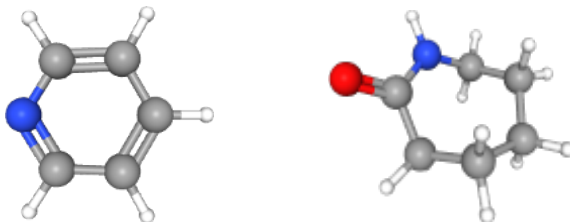


Figura 4: Da esquerda para a direita, modelo hexagonal da pyridine C_5H_5N e ilustração do caprolactam $(CH_2)_5C(O)NH$. Figuras obtidas de [10].

Modelos na forma de linhas poligonais (abertas e simples) podem ser observados em isômeros lineares dos *alcanos acíclicos*, com fórmula C_nH_{2n+2} . A Figura 5 apresenta alguns exemplos. As linhas poligonais são formadas pelos átomos de carbono. Temos, na Figura 5: o etano C_2H_6 , o propano C_3H_8 , o butano C_4H_{10} , o pentano C_5H_{12} e o hexano C_6H_{14} .

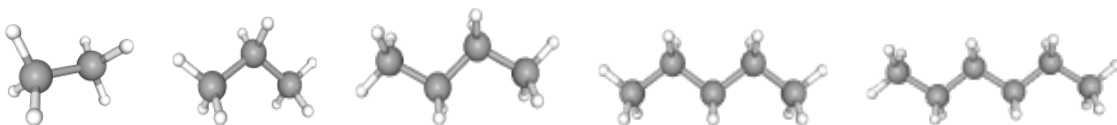


Figura 5: Modelos em linhas poligonais com fórmula C_nH_{2n+2} , $n = 2, \dots, 6$. Figuras obtidas de [10].

As moléculas de hidrocarbonetos (e também de outros compostos) podem ter ramificações, pelo que são mais bem modeladas por grafos. A Tabela 1 mostra alguns exemplos.

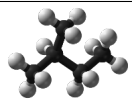
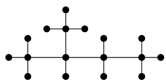
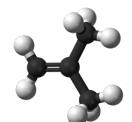
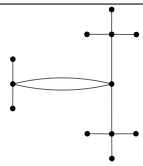
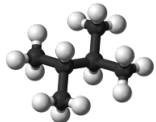
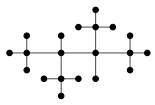
nome	modelo espacial	modelo como grafo
isopentano		
isobuteno		
2,3-dimetilbutano		

Tabela 1: Modelos espaciais e em grafos do isopentano C_5H_{12} , do isobuteno C_4H_8 e do 2,3-dimetilbutano C_6H_{14} . Figuras dos modelos espaciais obtidas de [12].

Tanto a fórmula C_nH_{2n} quanto a C_nH_{2n+2} dos alcanos cíclicos e acíclicos, respectivamente, são explicadas no artigo [9]. No artigo *Alkane* de [13] é apresentada uma lista de alcanos acíclicos até o heptacontane, de fórmula $C_{70}H_{142}$, destacando algumas propriedades físicas de cada um, assim como o número de isômeros.

As formas poligonais abertas e fechadas combinam-se de inúmeras maneiras. Na Figura 6 vemos o benzantracene $C_{18}H_{12}$, formado pela junção de quatro hexágonos, e o perhydroacenaphthene $C_{12}H_{20}$, formado pela junção de dois hexágonos e um pentágono. Vemos, na mesma Figura, um modelo do 1-hexyloxymethyl-cyclopropene $C_{10}H_{18}O$, formado pela junção de um triângulo com uma linha poligonal.

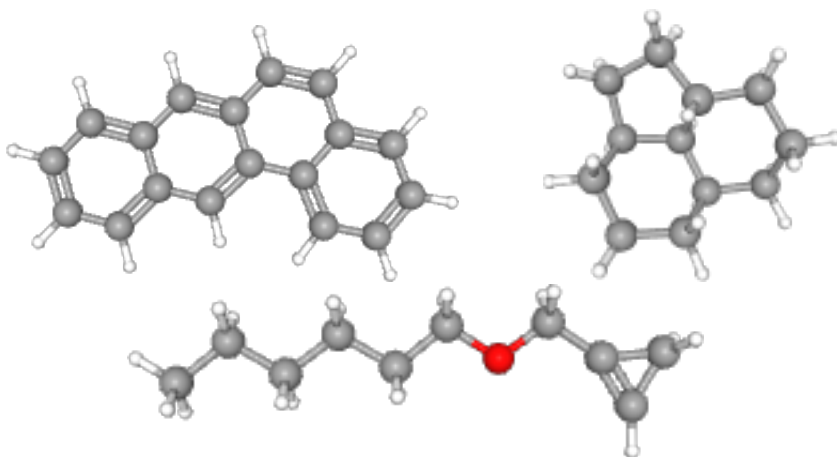


Figura 6: De cima para baixo e da esquerda para a direita, modelos do benzanthracene $C_{18}H_{12}$, do perhydroacenaphthene $C_{12}H_{20}$ e do 1-hexyloxymethyl-cyclopropene $C_{10}H_{18}O$. Figuras obtidas de [10].

Para encerrar esta seção, nada como apresentar o kekulene $C_{48}H_{24}$: 12 anéis benzêmicos concatenados, formando, por sua vez, um anel hexagonal. Confira a Figura 7. O kekulene, assim chamado em homenagem a Friedrich A. Kekulé, foi sintetizado em 1978.

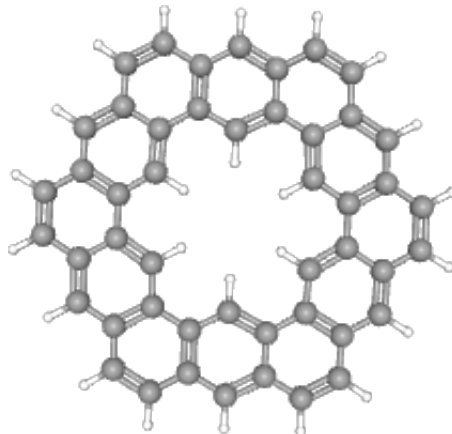


Figura 7: Os químicos e a natureza se divertem: a molécula kekulene $C_{48}H_{24}$. Figura obtida de [10].

Ao kekulene seguem-se o septulene, o octulene, quem sabe até qual.

3. O bom e velho amigo tetraedro.

O menor dos poliedros, o tetraedro, conhecido desde tempos antigos, não poderia deixar de comparecer como modelo molecular. Existem várias moléculas que o usam como modelo. Em alguns casos a molécula consiste de um átomo postado no interior do tetraedro, interligado com outros quatro átomos, que fazem o papel de vértices. Em outros casos não existe um átomo central, e a molécula é composta de quatro átomos ligados entre si, dispostos nos vértices de um tetraedro.

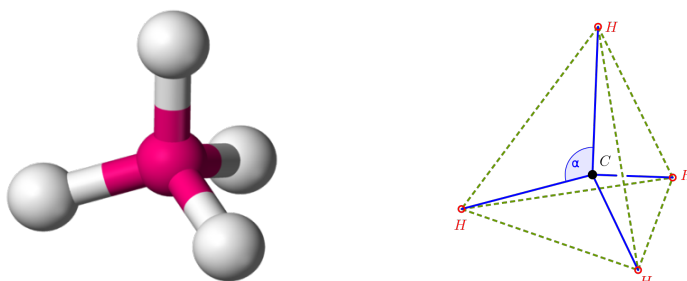


Figura 8: À esquerda, representação da molécula do gás metano CH_4 . Figura obtida de [13]. À direita, localização do átomo de carbono no centro do tetraedro regular e representação do ângulo tetraédrico α .

No modelo geométrico da molécula do gás metano, de fórmula CH_4 , os quatro átomos de hidrogênio estão dispostos nos vértices de um tetraedro, e o átomo de carbono ocupa seu centro. Confira a Figura 8, desenho da esquerda. Os quatro átomos de hidrogênio se repelem mutuamente de forma simétrica, de modo que se posicionam nos vértices de um tetraedro regular. As arestas do tetraedro são linhas virtuais, e não fazem parte do modelo da molécula, pois os átomos de hidrogênio não fazem ligações entre si. Por outro lado, os segmentos que ligam os vértices ao centro representam as ligações dos átomos de hidrogênio com o de carbono. Um esquema geométrico desse modelo pode ser visto na Figura 8, à direita. Em textos de Química, muitas vezes, é informado o ângulo tetraédrico, que é o ângulo α entre duas ligações hidrogênio-carbono. Seu valor é $\arccos(-1/3) \approx 109^\circ 28' 16'' \approx 109,5^\circ$. Detalhes sobre o cálculo geométrico desse ângulo podem ser obtidos a partir da pág. 290 de [7].

O modelo tetraédrico com um átomo central e outros quatro periféricos é aplicado a muitos outros compostos, como, por exemplo, o tetróxido de xenônio XeO_4 e o titânium tetracloreto TiCl_4 . Exemplos de íons com essa geometria são o perclorato ClO_4^- , o sulfato SO_4^{2-} e o fosfato PO_4^{3-} . Em vários casos pode ocorrer perda de simetria, e o tetraedro deixa de ser regular. Um exemplo diferente é a molécula de thiazyl trifluoride SNF_3 (confira a Figura 9, desenho da esquerda). Encontramos, no centro dessa molécula, um átomo de enxofre e, nos vértices, três átomos de flúor e um de nitrogênio. A ligação S – N é tripla.

Exemplos de modelos em que não comparece um átomo central são o tetrafósforo P_4 (confira a Figura 9, desenho central), e a amônia NH_3 (confira a Figura 9, desenho da direita). Na molécula da amônia, três dos cinco elétrons periféricos do átomo de nitrogênio se ligam a átomos de hidrogênio, e os outros dois permanecem separados, sem ligação, repelindo os outros três. O tetraedro formado não é regular, pois o ângulo H – N – H mede $106,7^\circ$, calculado a partir de imagens de microscópios eletrônicos, ou usando modelos teóricos que consideram as forças que agem na molécula. A forma geométrica da amônia também é dita ser piramidal, no caso uma pirâmide triangular, com o átomo de nitrogênio no vértice da pirâmide, e os três átomos de hidrogênio como vértices da base.

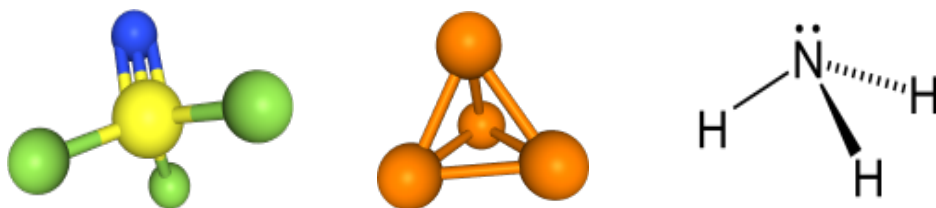


Figura 9: À esquerda, representação da molécula do thiazyl trifluoride SNF_3 . Ao centro, representação da molécula do tetrafósforo P_4 . À direita, representação da molécula de amônia NH_3 . Figuras obtidas de [10] e [13].

A forma tetraédrica serve de base de modelos geométricos de compostos mais complexos. Um exemplo é o modelo bitetraédrico do gallium trichloride Ga_2Cl_6 , confira a Figura 10, desenho da esquerda.

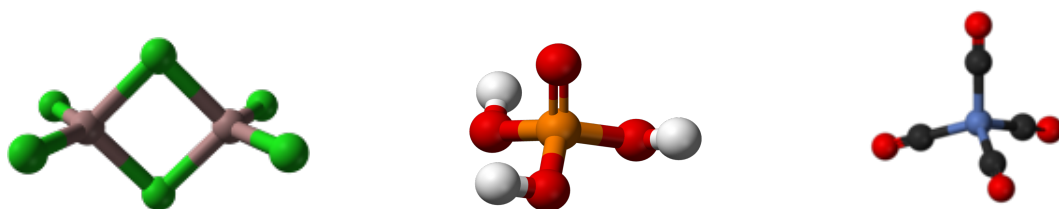


Figura 10: Da esquerda para a direita, representações das moléculas do gallium trichloride Ga_2Cl_6 , do ácido fosfórico H_3PO_4 e do níquel tetracarbonyl $\text{Ni}(\text{CO})_4$. Figuras obtidas de [13].

Dentre outras inúmeras possibilidades, chamamos a atenção para o ácido fosfórico H_3PO_4 e para o níquel tetracarbonyl $\text{Ni}(\text{CO})_4$, cujas moléculas estão representadas na Figura 10.

4. Os hidrocarbonetos platônicos.

Os cinco sólidos platônicos são, sem dúvida nenhuma, os poliedros mais famosos. Conhecidos na Grécia desde a antiguidade, foram, naquele tempo, associados a uma cosmogonia que procurava explicar o universo. De tempos em tempos essa ideia é retomada, e foi o que ocorreu com Kepler que, em uma publicação de 1597, associou medidas relativas desses sólidos às distâncias entre planetas do nosso sistema solar (sem muito sucesso). Um jeito mais moderno de retomar essas ideias é pensar nos sólidos de Platão como modelos de moléculas.

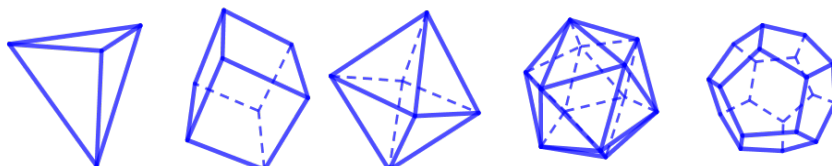


Figura 11: Os sólidos de Platão. Da esquerda para a direita: o tetraedro, o hexaedro, o octaedro, o icosaedro e o dodecaedro (todos regulares).

Examinando os sólidos de Platão, designados como os poliedros convexos regulares, vemos que o tetraedro, o cubo e o dodecaedro têm todos os vértices de índice 3, isto é, a cada vértice concorrem exatamente três arestas. Pensando nesses sólidos como possíveis modelos geométricos de moléculas, uma ideia seria que os vértices poderiam ser ocupados com átomos de carbono, e as arestas poderiam representar ligações entre eles. Para completar a tetravalência do carbono, átomos de hidrogênio poderiam ser ligados a cada um dos vértices ou, então, poderiam também serem consideradas ligações duplas. O octaedro, por sua vez, poderia igualmente ser um modelo de hidrocarboneto, mas sem a necessidade de completamento com átomos de hidrogênio ou ligações duplas, pois os átomos de carbono já teriam quatro ligações. Alguns autores chamam a essa ideia de *hidrocarbonetos platônicos hipotéticos*. Quanto ao icosaedro, como os vértices têm índice 5, poderiam ser considerados átomos com covalência maior do que ou igual a cinco, e não seriam hidrocarbonetos.

Os hidrocarbonetos correspondentes ao cubo e ao dodecaedro foram sintetizados, e são chamados respectivamente de *cubane* e *dodecaedrane*. Confira desenhos na Figura 12.

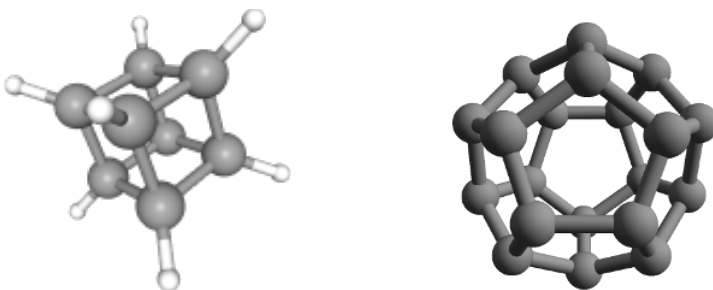


Figura 12: À esquerda, representação da molécula do cubane C_8H_8 , obtida de [10]. À direita, representação da molécula do dodecahedrane $C_{20}H_{20}$, obtida de [13], mostrando apenas os átomos de carbono.

O modelo geométrico do cubane consiste em colocar os 8 átomos de carbono nos vértices de um hexaedro, e olhar as arestas como as ligações entre esses átomos. Isso fornece três ligações para cada átomo de carbono. Para completar as quatro que são necessárias para sua estabilidade, a cada átomo de carbono é ligado um de hidrogênio. Inicialmente muitos químicos acreditavam que uma molécula como a do cubane não poderia ser estável, devido a que um ângulo de $\approx 90^\circ$ entre duas ligações parecia impossível de ocorrer. Mas, em 1964, Philip Eaton e Thomas Cole o sintetizaram. O cubane parece ser um elemento artificial, pois nunca foi observado na natureza.

O dodecaedrane foi sintetizado por Leo Paquette em 1982. Seu modelo geométrico consiste em colocar 20 átomos de carbono nos vértices de um dodecaedro, e olhar as arestas como as ligações entre esses átomos. Novamente são necessários outros 20 átomos de hidrogênio para completar as quatro ligações dos átomos de carbono. O dodecaedrane é muito reativo e, portanto, difícil de ser isolado.

Acrescentamos que o cubo e o dodecaedro regular não são modelos exatos do cubane e do dodecaedrane, pois os comprimentos das ligações não são sempre iguais. O cubo e o dodecaedro regular podem ser tomados como modelos quando interessa o uso de simetrias.

O *tetraedrane*, cuja fórmula seria C_4H_4 , é um hidrocarboneto platônico hipotético, pois ainda não foi sintetizado de forma isolada. Estudos teóricos indicam que a síntese é possível. Sua estrutura

tetraédrica é mostrada na Figura 13.

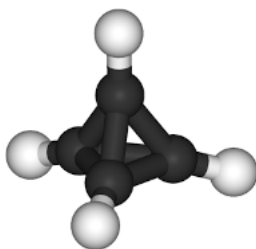


Figura 13: Representação da hipotética molécula do tetrahedrane C_4H_4 . Figura obtida de [13].

O octaedro parece não ser modelo de nenhum hidrocarboneto. Cálculos teóricos indicam que sua existência é improvável. Quanto ao icosaedro, como observamos, não pode ocorrer como hidrocarboneto, pois é preciso considerar átomos que tenham possibilidade de fazer cinco ligações ou mais.

Caixas de boro têm como modelo o cubo, o octaedro, o icosaedro e o dodecaedro. Para mais detalhes consulte [6], pág. 223, assim como [2]. Em particular, os clusteres $[B_6H_6]^{2-}$ e $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ são modelados pelo octaedro e pelo icosaedro, respectivamente, como se vê na Figura 14.

Quanto ao modelo tetraédrico, sem ser hidrocarboneto, já vimos o ácido fosfórico H_3PO_4 na Figura 10.

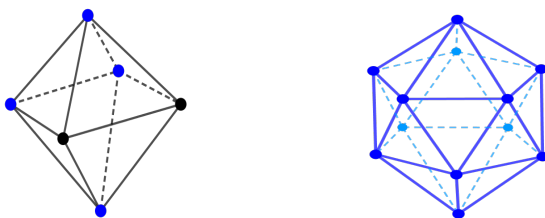


Figura 14: Da esquerda para a direita, representações das moléculas do 2,3 - $C_2B_4H_6$ e do $[B_{12}H_{12}]^{2-}$, mostrando apenas os átomos de Boro (cor azul) e Carbono (cor preta). Figuras adaptadas de [2].

Com isso encerramos nossa singela apresentação sobre a presença dos sólidos platônicos no mundo das moléculas. Mas não temos dúvida de que essa história continuará com novos descobrimentos.

5. Outras moléculas com geometria poliédrica.

Existem muitos modelos moleculares em forma de prisma. Um exemplo é o cubane, já mencionado na seção anterior. Outros exemplos de compostos com formato de hexaedros são o octafluorocubane, com fórmula C_8F_8 , e o dibromocubane $C_8H_6Br_2$, apresentados na Figura 15. A forma hexaédrica é constituída pelos átomos de carbono.



Figura 15: Representações do octafluorocubane C_8F_8 e do dibromocubane $C_8H_6Br_2$. Figuras obtidas de [10].

Hidrocarbonetos com geometria em forma de prisma são denominados *prismanes*. O [3]-*prismane*, também chamado *hexane*, é um hidrocarboneto com geometria prismática triangular e com fórmula C_6H_6 . Portanto, é um isômero do benzeno. Foi proposto teoricamente pelo químico alemão A. Ladenburg em 1869, e posteriormente sintetizado em 1973 por Thomas J. Katz e Nancy Acton. No modelo geométrico do [3]-prismane, os seis átomos de carbono formam um prisma triangular, como se vê na Figura 16.

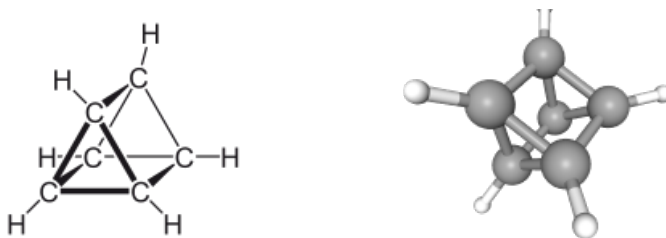


Figura 16: Duas representações do prismane C_6H_6 . Da esquerda para a direita, figuras obtidas de [13] e [10], respectivamente.

Existem muitos outros prismanes, como o pentaprismane $C_{10}H_{10}$ e o hexaprismane $C_{12}H_{12}$, com formato de prismas pentagonal e hexagonal, respectivamente. Confira a Figura 17. A fórmula do [n]-prismane é $C_{2n}H_{2n}$. O autor [11] apresenta desenhos de prismanes indo do triprismane até o decaprismane. Os prismanes, em geral, são estudados teoricamente através de aplicativos computacionais.

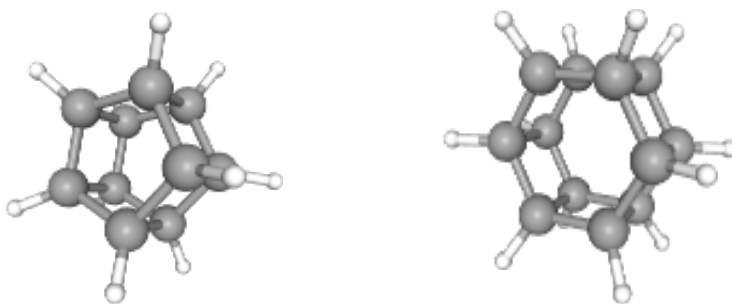


Figura 17: Representações do pentaprismane $C_{10}H_{10}$ e do hexaprismane $C_{12}H_{12}$. Figuras obtidas de [13].

Formas piramidais ou bipiramidais são bastante comuns na geometria das moléculas. Um exemplo clássico já foi comentado, trata-se da molécula da amônia NH_3 , da qual se diz ser piramidal trigonal. Confira a Figura 9.

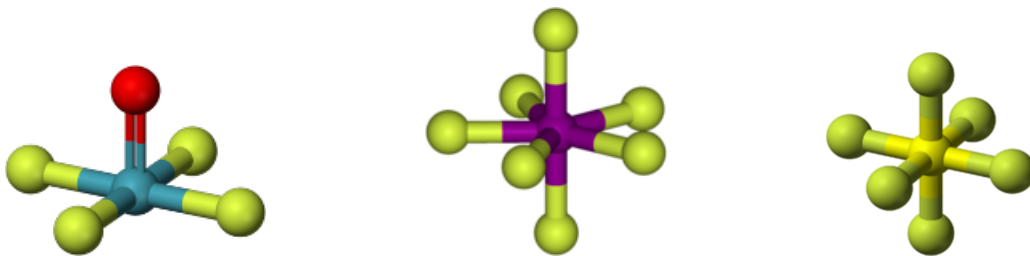


Figura 18: Representações do xenon oxytetrafluoride XeOF_4 , do iodine heptafluoride IF_7 , e do sulfuro hexafluoride SF_6 . Figuras obtidas de [13].

Em geral as moléculas piramidais ou bipiramidais têm um átomo central ligado a átomos periféricos. Unindo esses átomos periféricos com arestas virtuais se obtém a figura de uma pirâmide ou de uma bipirâmide. Alguns exemplos estão apresentados na Figura 18. Vemos o xenon oxytetrafluoride XeOF_4 , formando uma pirâmide quadrada (o átomo do vértice da pirâmide é o de oxigênio); o iodine heptafluoride, com fórmula IF_7 , formando uma bipirâmide pentagonal; o sulfuro hexafluoride SF_6 , formando uma bipirâmide quadrada, ou octaedro.

Um exemplo de molécula que tem como modelo o icosaedro é o ânion *Dodecaborate*12, com fórmula $[\text{B}_{12}\text{H}_{12}]^{2-}$. Foi sintetizado em 1960 por Hawthorne e Pitochelli. Um desenho desse ânion está estampado na Figura 19.

Não poderia faltar em nossa lista um modelo de antiprisma. Tal é o caso do *cluster* Bi_8^{2-} constituído por 8 átomos de bismuto em forma de antiprisma quadrado. Na Figura 19 vemos uma ilustração.

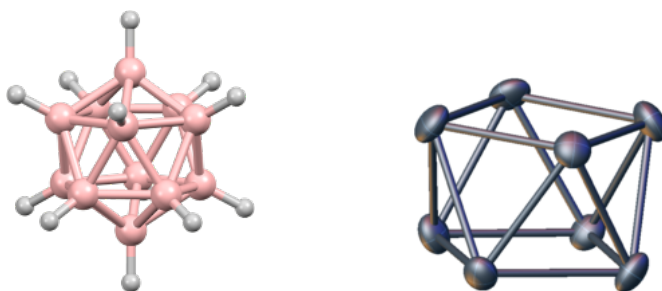


Figura 19: À esquerda, representação da molécula do ânion *Dodecaborate*12, com fórmula $[\text{B}_{12}\text{H}_{12}]^{2-}$. À direita, um antiprisma quadrado modelando um cluster de bismuto. Figuras obtidas de [13].

Uma família muito importante de modelos poliédricos de moléculas é a dos *fulerenos*. Do ponto de vista da Geometria, são poliedros convexos formados apenas por faces pentagonais ou hexagonais, e cujos vértices têm índice três, isto é, a cada um concorrem exatamente três arestas. Um fullereno com n vértices é anotado por C_n .

No artigo [8] está demonstrado que todo fulereno C_n tem exatamente 12 faces pentagonais. Para todo inteiro $p \geq 0$, com $p \neq 1$, existem fulerenos com p faces hexagonais. Ainda, existem fulerenos (geométricos) C_n para valores $n = 20$ e todo inteiro par $n \geq 24$.

Foi constatada a existência de muitos hidrocarbonetos que podem ser modelados por esses poliedros. Átomos de carbono ocupam os vértices desses poliedros. O menor deles (no sentido de ter menos átomos de carbono) é o dodecaedro $C_{20}H_{20}$, já apresentado na Figura 12. Mas o mais famoso é o C_{60} , batizado como buckminsterfulereno por seus descobridores, os químicos Robert Curl, Harold Kroto e Richard Smalley, que conseguiram sintetizá-lo em 1985. Por esse feito, esses pesquisadores ganharam o prêmio Nobel de Química em 1996. O modelo geométrico do buckminsterfulereno é o icosaedro truncado. A Figura 20 mostra uma representação, na qual se pode observar como se distribuem as ligações duplas nas arestas das faces hexagonais.

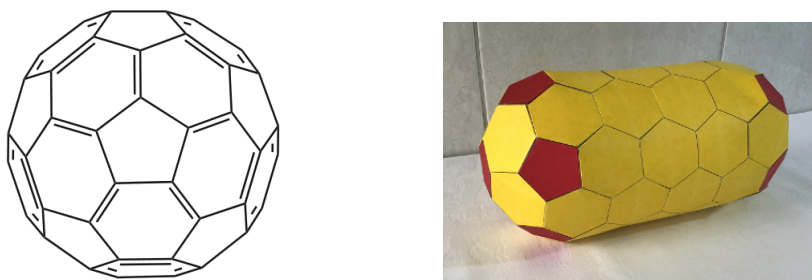


Figura 20: À esquerda, representação da molécula do buckminsterfulereno C_{60} . Figura obtida de [13]. À direita, modelo do fulereno-tubo C_{120} . Construído em papel cartão pelo autor. Foto do autor.

São igualmente famosos os fulerenos tipo tubo, também chamados nanotubos fechados. A parte cilíndrica do tubo é constituída de faces hexagonais não planas. O fechamento do tubo consiste, em cada ponta, de meio fulereno contendo 6 pentágonos. A Figura 20 mostra um modelo do fulereno-tubo C_{120} . Seu fechamento, em cada ponta, é feito por meio icosaedro truncado.

Os fulerenos, em geral, não têm faces regulares, com exceção do dodecaedro e do icosaedro truncado. Mas, mesmo nestes dois casos, as moléculas que os têm como modelos não guardam comprimentos uniformes em suas ligações carbono-carbono.

Observamos que, frequentemente, as moléculas que possuem uma geometria com propriedades simétricas se organizam em cadeias ou redes cristalinas. Um exemplo são os poliprismanes, que consistem de cadeias de prismanes. Uma ilustração pode ser vista na Figura 21. Vemos ainda na mesma figura uma célula cúbica do diamante, composta por 14 átomos de carbono, e uma rede cristalina formada por essas células.

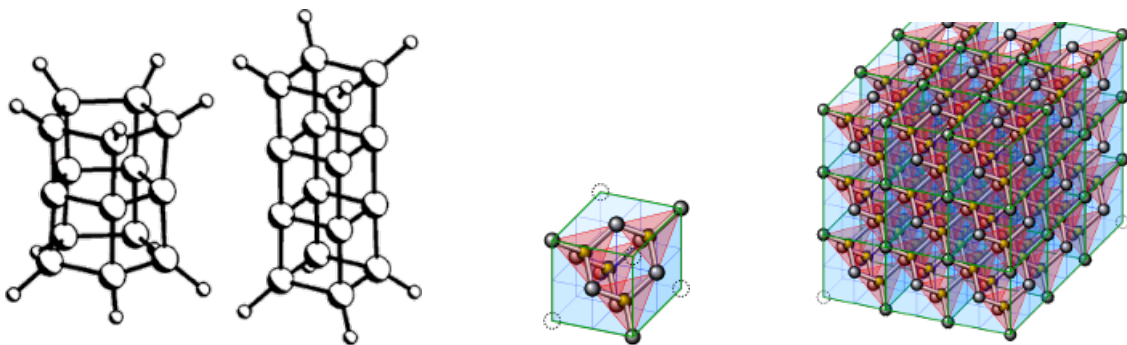


Figura 21: A partir da esquerda, representações do bi[5]prismane e do tri[4]prismane, da célula do diamante e de uma rede cristalina do diamante. Figuras obtidas de [13].

Outro exemplo bem conhecido de rede cristalina é a formada pelo cloreto de sódio. Sua molécula tem fórmula NaCl , e é constituída por um cátion de sódio Na^+ e um ânion de cloro Cl^- . Ao formar uma rede cristalina, os átomos de cloro e sódio se distribuem alternadamente em uma grade. Para entender a estabilidade da rede, observamos que um íon (cloro ou sódio) é rodeado por seis íons com carga oposta (sódio ou cloro, respectivamente), formando um octaedro regular. A Figura 22 ilustra essa distribuição octaédrica.

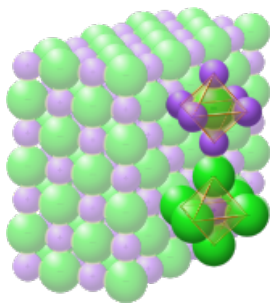


Figura 22: Rede cristalina do cloreto de sódio, mostrando as composições octaédricas dos dois átomos. As esferas maiores, de cor verde, representam átomos de cloro, e as menores, de cor púrpura, representam átomos de sódio. Figura obtida de [13].

Nas células de alguns cristais, como a perovskita, átomos de um elemento formam um cubo, átomos de outro elemento formam um octaedro inscrito no cubo, e outro átomo ocupa o centro. Tal é o caso da célula da perovskita tipo PLZT, como mostrado na Figura 23: os átomos dos vértices do cubo são chumbo Pb^{2+} ou Lantânio La^{3+} , nos vértices do octaedro temos oxigênio O^{2-} , e no centro um átomo de Zircônio Zr^{4+} ou de Titânio Ti^{4+} .

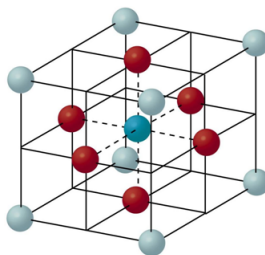


Figura 23: Representação da célula de cristal da perovskita tipo PLZT. Figura adaptada de [12].

6. Modelos geométricos “exóticos”.

Ao investigar a forma das coisas, às vezes nos deparamos com certas situações que nos deixam muito admirados. Tal é o caso da molécula do *pagodane*, um composto orgânico. Sua fórmula é $C_{20}H_{20}$, sendo, portanto, um isômero do dodecaedrane. O modelo do pagodane não é um poliedro, e sua forma geométrica é bastante singular. Assim como o dodecaedro, tem 12 faces pentagonais, 30 arestas e 20 vértices, conforme ilustrado na Figura 24. Entretanto, 8 de suas faces não são planas, e formam 4 pares de faces, cada par com duas arestas em comum. As faces não planas se parecem com telhados, como os que vemos em templos budistas, os chamados pagodes.

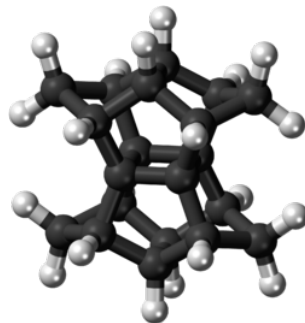
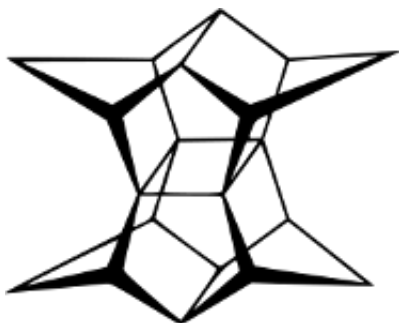


Figura 24: Representações da molécula do pagodane $C_{20}H_{20}$. Figuras obtidas de [13].

O pagodane não é encontrado na natureza, pelo que sabemos, e foi sintetizado por Horst Prinzbach e seus colegas em 1987. Ele é o primeiro composto de uma família cujos componentes têm a fórmula $C_{16+8s}H_{12+2s}$, e cujos esqueletos têm como base as duas caixas na forma de primas pentagonais.

Muito similares ao pagodane são as moléculas do composto sintético $[n]$ -asterane. São hidrocarbonetos constituídos por dois cicloalcanos iguais, dispostos paralelamente, formando uma caixa, sendo que as arestas correspondentes são unidas por um grupo metil CH_2 . A fórmula do $[n]$ -asterane é $C_{3n}H_{4n}$.



Figura 25: Representações de $[n]$ -asteranes, $3 \leq n \leq 7$. Figuras obtidas de [12].

7. Conclusão

Não sei quanto ao leitor, mas de minha parte confesso que fiquei muito feliz ao constatar que inúmeras formas geométricas, usadas correntemente na Matemática elementar, fazem parte de modelos moleculares adotados pela Química. Não me lembro de nenhuma figura geométrica, dentre as que são estudadas no ensino básico, que não faça parte desses modelos, de algum modo. Fazemos votos de que nossa apresentação proporcione aos professores elementos para que possam mostrar em suas aulas como a Matemática participa na construção de nosso conhecimento da natureza.

Constatamos ainda que, apenas em breves momentos, abordamos a relação da forma geométrica com as propriedades do composto químico. Ao ler livros de Química, um aspecto que nos chamou a atenção foi como um conjunto de simetrias que sejam adotadas de antemão no modelo geométrico auxiliam na compreensão das propriedades da molécula. Para o leitor que estiver interessado em estudar essa relação entre a Geometria e a Química sugerimos o livro [5] de Sidney F. A. Kettle.

Referências

- [1] Balaban, A. T. *Applications of Graph Theory in Chemistry*. J Chem. Inf. Comput. Sci. 1985, 25, 334-343.
- [2] Dash, B. P. et alii, *Polyhedral boron clusters in materials science*. New J. Chem., 2011, 35, 1955–1972 doi: 10.1039/c1nj20228f
- [3] Gan, L. H. *Theoretical investigation of polyhedral hydrocarbons (CH)_n*. Elsevier, Chemical Physics Letters 421 (2006) 305-308.
- [4] Griбанова, T. N.; Minyaev, R. M.; Minkin, V. I. *Quantum-chemical investigation of structure and stability of [n]-prismanes and [n]-asteranes*. Russian Journal of Organic Chemistry. 43 (8) (2007) 1144-1150. doi:10.1134/S107042800708009X.
- [5] Kettle, S. F. A. *Symmetry and Structure, Readable Group Theory for chemists*. 2nd Edition. N. York: John Wiley & Sons, 1995.
- [6] Michael J. McGlinchey, M. J. e Hopf, H. *Reciprocal polyhedra and the Euler relationship: cage hydrocarbons, C_nH_n and closo-boranes [B_nH_n]²⁻*. Beilstein J. Org. Chem. 2011, 7, 222-233. doi: 10.3762/bjoc.7.30
- [7] Paterlini, R. R. *Geometria Elementar, gênese e desenvolvimento*. Disponível em: <https://www.dm.ufscar.br/~paterlini/livros/livro_geo.html> Acessado em: 26 de outubro de 2022.
- [8] Paterlini, R. R. *A família dos poliedros fulerenos*. Professor de Matemática Online, Vol. 8, n. 4, págs. 470-489. doi: 10.21711/2319023x2020/pmo834 Disponível em: <<https://pmo.sbm.org>>

[br/wp-content/uploads/sites/5/sites/5/2021/10/art34_vol8_PMO_SBM_2020.pdf](https://wp-content/uploads/sites/5/sites/5/2021/10/art34_vol8_PMO_SBM_2020.pdf)> Acessado em: 26 de outubro de 2022.

- [9] Paterlini, R. R. e Rocha, R. C. F. *Os hidrocarbonetos e a teoria dos grafos*. Professor de Matemática Online v.9, n.4, 2021, p. 626-640 ISSN: 2319-023X doi: 10.21711/2319023x2021/pmo943 Disponível em: <https://pmo.sbm.org.br/wp-content/uploads/sites/5/sites/5/2021/11/art43_Vol9_PMO_SBM_FLUXO2021.pdf> Acessado em: 26 de outubro de 2022.
- [10] PubChem *Explore Chemistry*. Figuras e informações de elementos químicos. Disponível a partir de <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>> Acessado em outubro de 2022. As figuras são produzidas por um aplicativo e constituem cortesia da *National Library of Medicine* do governo dos Estados Unidos da América do Norte.
- [11] Salem, M. A. *Ab initio study of hydrocarbon prismanes and their substituted derivatives*. Chemical Physics 518 (2019) 25-29 doi: 10.1016/j.chemphys.2018.11.008
- [12] Wikimedia. Endereço base: <<https://commons.wikimedia.org/wiki/>> Desenho da célula da perovskita, adaptado; licenciada sob GNU Free Documentation License. Desenhos das moléculas [n]-asteranes: domínio público. Figuras do isopentano, do isobuteno e do 2,3-dimetilbutano: domínio público. Consultado em 23 de outubro de 2022.
- [13] Wikipedia. Figuras e informações nos itens: *Benzene. Tetrahedral molecular geometry. Methane. Ammonia. Phosphate. Tetrahedrane. Gallium trichloride. Cubane. Dodecahedrane. Platonic hydrocarbon. Dodecaborate. Pagodane. Square pyramidal molecular geometry. Pentagonal bipyramidal molecular geometry. Sulfur hexafluoride. Square antiprismatic molecular geometry. Diamond cubic. Cyclic compound. Alkane. Pyridine. Square planar molecular geometry. Linear molecular geometry. Sodium chloride*. Títulos disponíveis a partir do endereço base <<https://en.wikipedia.org/wiki/>> Consultado em outubro de 2022. As figuras usadas em nosso texto obtidas na Wikipedia são disponíveis como domínio público ou licenciadas sob GNU Free Documentation License ou Creative Commons Attribution-Share.

Roberto Ribeiro Paterlini
Universidade Federal de São Carlos
<paterlini@ufscar.br>

Recebido: 06/11/2022
Publicado: 27/02/2023