

ESTRUTURAS DE FULLERENOS: ESTABELECENDO INTERFACES NO ENSINO DE MATEMÁTICA E QUÍMICA EM NÍVEL SUPERIOR

Thiago H. B. Corrêa* e Joana D'arc da Silva Reis

Instituto de Ciências Exatas, Naturais e Educação, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, 38064-200 Uberaba – MG, Brasil

Recebido em 14/02/2017; aceito em 07/03/2017; publicado na web em 15/05/2017

STRUCTURES FULLERENES: ESTABLISHING INTERFACE IN MATHEMATICS EDUCATION AND CHEMISTRY IN HIGHER EDUCATION. The objective of this paper is to study fullerene geometry properties and attempt to establish a dialogue between the teaching of mathematics and chemistry concepts using hands-on cardboard geometric models, in classroom, in order to facilitate the understanding of fullerene structures. This approach to the study of such molecules represents a unique opportunity to explore a complex and rich array of concepts that are essential to the teaching of chemistry at university level and have to be applied by the students along their course. At the same time the study of fullerenes can also profit from a mathematics approach to it, especially from a geometry perspective as argued here. In our research, the use of paper-made geometric models has proven to help the students to visualize and understand such molecular structures, their chemical bonds and their physical-chemical properties. These models have also contributed to overcome representational constraints of such tiny structures, which often come close to a “quasi-abstract” dimension, in a scale that can be manually handled by the students and at the same time played into multiple possible variations that allow them to test concepts and compare different molecular structures and arrangements.

Keywords: fullerene; molecular geometry; higher education chemistry.

INTRODUÇÃO

Descoberto em 1985 pelo inglês Harold W. Kroto e os americanos Robert F. Curl e Richard E. Smalley, os fulerenos (chamados inicialmente de *buckminsterfullereno*, em homenagem ao arquiteto estadunidense Richar Buckminster Fuller (1895-1983), por seus trabalhos com cúpulas geodésicas) têm revelado ser um promissor campo de pesquisa e aplicação em diversas áreas da Química. Empregados no desenvolvimento de novos materiais, demonstrando, inclusive, atividade antioxidante, neuroprotetora, antimicrobiana e antirretroviral, o grupo de nanomoléculas esféricas constituídas apenas por átomos de carbono (C), figurou o Prêmio Nobel de Química de 1996.¹

Previstos desde 1966 por cálculos teóricos, a existência de “gaiolas” estáveis formadas exclusivamente por carbonos somente foi confirmada em 1990 pelo especialista em cromatografia Roger Taylor, o qual obteve amostras puras de C₆₀ e C₇₀. Foi também neste ano o desenvolvimento, por Krätschmer,² de um método para a síntese de C₆₀ em quantidades “macroscópicas”, representando uma etapa decisiva para o campo que se tornou, nos últimos 25 anos, um dos maiores temas da química contemporânea com reflexos importantes nas áreas de supercondutividade, biologia e ciência dos materiais.¹

Tema de nove entre dez artigos mais citados na área de Química, e de todos os dez em 1992, a terceira forma alotrópica do C - e a primeira molecular - vem despertando grande interesse de pesquisadores.³ Os trabalhos sobre fulerenos oportunizaram, também, o surgimento de novas técnicas de produção de nanotubos de ponta aberta, o que tem se tornado um novo campo de investigação.

Vale destacar que o estudo destes compostos exibe uma riqueza conceitual que pode ser explorada e utilizada no ensino de Química em nível superior. Além do mais, o presente trabalho vai ao encontro do exposto e evidencia a viabilidade de interlocução da Matemática e da Química na compreensão destas estruturas químicas regidas pela geometria (molecular).

Diante do apresentado, este artigo visa explorar a relação das

propriedades geométricas de fulerenos e apresentar um estudo introdutório sobre simetria molecular dos fulerenos a partir da manipulação de um material didático, assim como retratar uma experiência vivenciada na oficina *Geometria de Fulerenos*, ofertada aos estudantes do curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal do Triângulo Mineiro (UFTM - Uberaba/MG).

DESENVOLVIMENTO

A oficina supracitada foi idealizada no intuito de promover a introdução ao estudo dos fulerenos, priorizando a relação matemática-química das estruturas e discutindo, subsequentemente, a interpretação de suas propriedades sob a ótica da Geometria/Topologia.

A proposta inicia com a apresentação dos fulerenos, utilizando um material manipulável (modelo em anexo); os resultados do trabalho de Kroto⁴ em seu artigo ‘*The stability of the fullerenes C_n, with n=24, 28, 32, 36, 50, 60 and 70*’ publicado na revista científica *Nature*; e, como material de referência e consulta, o *An Atlas of Fullerenes*.⁵ Discutiremos a relação da estabilidade de fulerenos - C₂₄ até C₇₀ - a partir de um conjunto de regras químicas e sua estrutura geométrica.

Seguimos com a proposta de estudo e investigação sobre grupo de simetria pontual das moléculas de fulerenos e algumas de suas aplicações na química.

A fim de representar as estruturas citadas, utilizaremos o mesmo material empregado na oficina, o qual foi confeccionado com papel cartão e elásticos.

O material é de simples manuseio e barato, que permite investigar e representar as estruturas dos fulerenos.

EXPLORANDO AS ESTRUTURAS

Atualmente é utilizado por consenso o termo fullereno para toda a família de “gaiolas” compostas inteiramente por átomos de carbono sp² hibridizados, posicionados nos vértices de um poliedro formado por *h* hexágonos e 12 pentágonos, constituindo uma vasta família de nanomoléculas, formadas por número par de átomos de carbono C_{2n}.^{6,7}

*e-mail: correa.uftm@gmail.com

Cinco argumentos empíricos para justificar a relativa estabilidade dos fulerenos foram apresentados no estudo de Kroto, os quais serviram de objeto de análise na oficina tendo como aporte o material utilizado.

1. A estrutura estar em conformidade com os requisitos de valência habituais de carbono, cada átomo deve ser conectado a outros três outros átomos por uma ligação dupla e duas ligações simples. Existem várias possíveis estruturas, mas somente alguns casos são estáveis;
2. Hidrocarbono poliaromático (forma poligonal) com 5 e 6 “carbonos” são abundantes, com três e quatro “lados” são bastante instáveis e com sete “lados” são raros. Isto sugere que a estrutura seja formada por Hidrocarbono poliaromático com 5 e 6 “lados” somente;
3. As estruturas em que todas as faces pentagonais estão isoladas uma da outra é um requisito para maior estabilidade de uma molécula de fulereno. Este argumento foi usado para os tipos das fusões de pentágonos e relacionado a variação dos graus de tensão e sua instabilidade;
4. A estrutura geodésica poderia favorecer maior simetria do isômero, além de resistência devido ao formato esférico e aos triângulos que compõem sua estrutura. Qualquer força aplicada no domo se distribui igualmente até sua base;
5. Para fechar qualquer rede esférica consistindo de h hexágonos, exceto para $h=1$, são necessários 12 pentágonos.

Investigação I: a piramidalização e o C_{60}

Foi proposto aos estudantes que utilizassem somente as peças hexagonais do material para montar uma estrutura totalmente fechada, na forma de um poliedro. O mesmo foi proposto para o caso de usar somente as peças pentagonais. Posteriormente, foi sugerido que estes descrevessem suas observações a respeito das experiências.

Os pentágonos são importantes na estrutura do fulereno, pois os grupos formados somente por hexágonos são sempre planos - como um piso ladrilhado - inclusive na estrutura cilíndrica. Nota-se que a cada pentágono adicionado, a forma adquire curvatura, o que é possível ser visualizado manipulando o material. Ao incluir os 12 pentágonos, a “bola” se fecha completamente, uma vez que estes são responsáveis pela mudança de ângulo das ligações e, conseqüentemente, pela forma tridimensional da estrutura.

A medida do ângulo interno (a_i) de um polígono regular pode ser calculada do seguinte modo: $a_i = 180(n - 2)/n$, sendo n o número de lados do polígono.

Assim, a medida de um ângulo interno do pentágono regular é 108° e do hexágono regular 120° , conforme observado no material da Figura 1.

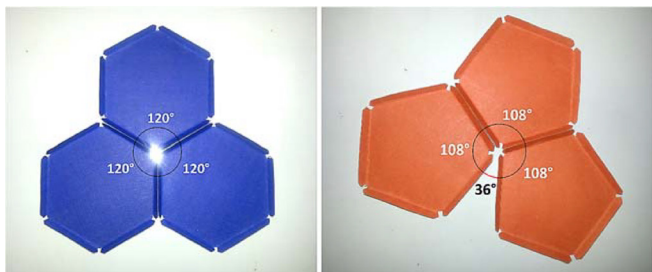


Figura 1. Representação dos ângulos internos dos polígonos (hexágonos e pentágonos) a partir do material da oficina

Como é possível perceber, a curvatura e as propriedades especiais dos fulerenos devem-se muito à presença dos pentágonos.⁷ A tensão associada à piramidalização dos átomos é a razão da alta reatividade

do C_{60} - o mais abundante e representativo dos fulerenos - quando comparado a outras formas de carbono, de modo que, ao reagirem, estes átomos passam a ser sp^3 (Figura 2).

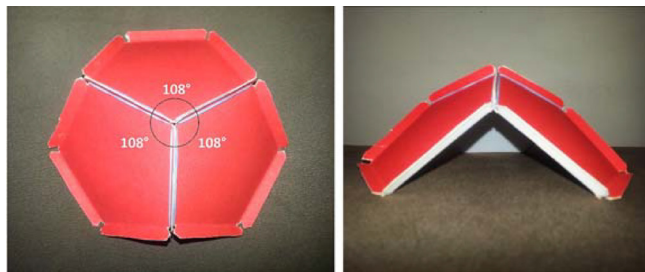


Figura 2. Demonstração da piramidalização

Investigação II: regra do pentágono isolado

Nesta etapa da oficina, foi proposto que os estudantes usassem as peças pentagonais e hexagonais do material para montar uma estrutura totalmente fechada, na forma de um poliedro convexo, em que todas as faces pentagonais estão isoladas uma da outra, de modo que todo pentágono fique rodeado por um “anel” de faces hexagonais.

A regra do pentágono isolado, conhecida por seu acrônimo em inglês IPR (*Isolated Pentagon Rule*), afirma que os fulerenos mais estáveis são aqueles que não apresentam pentágonos adjacentes, ou seja, cada um dos 12 pentágonos está rodeado de hexágonos.

Usando os dois tipos de peças (pentagonais e hexagonais), na oficina apareceram duas estruturas C_{80} e C_{60} . Ambas totalmente fechadas, nas quais todas as faces pentagonais estão isoladas uma da outra, de modo que todo pentágono fique rodeado por um “anel” de faces hexagonais.

O C_{80} aparece como resultado devido à escolha das arestas que são compostas por peças pentagonais e hexagonais. Entretanto, o C_{60} , representado na Figura 3, é a menor estrutura que cumpre esta regra.



Figura 3. Demonstração do C_{60}

Foram necessárias exatamente 12 peças pentagonais e 20 peças hexagonais para fechar a estrutura, sendo descrito apenas um modo de montar o C_{60} com todos os pentágonos separados.

O princípio é uma consequência da característica de Euler-Poincaré, que é um invariante topológico e pode ser calculado usando $V - A + F = 2$, sendo V o número de vértices, A o número de arestas e F o número de faces do poliedro convexo. Com base nesta teoria, estabelecemos que para fechar qualquer rede esférica consistindo de h hexágonos, exceto para $h = 1$ são necessários doze pentágonos. O menor fulereno observado foi o C_{20} , composto apenas por doze pentágonos e zero hexágonos.

Como cada uma das arestas está ligada a dois vértices e em cada vértice do fulereno há um encontro de três arestas, temos que: $V = 2A/3$. Substituindo em $V + F - A = 2$, obtemos $F = A/3 + 2$. Sabemos

que $F = F_5 + F_6$, isto é, o total de faces (F) é soma do número de pentágonos (F_5) e hexágonos (F_6).

Como cada aresta do poliedro é compartilhada por arestas de duas faces, $A = (5F_5 + 6F_6)/2$. Substituindo-se $F = F_5 + F_6$ e $A = (5F_5 + 6F_6)/2$ em $F = A/3 + 2$, temos: $F_5 = 12$ (exatamente 12 pentágonos). Portanto, $F = 12 + F_6$.

Quanto aos vértices, como $V = 2A/3$, então $A = 3V/2$. Substituindo-se $A = 3V/2$ e $F = 12 + F_6$ em $V + F - A = 2$, obtém-se $V = 20 + 2F_6$.

Vale destacar que para fulerenos menores que o C_{60} não podemos aplicar a regra do pentágono isolado, sendo a estabilidade dos diferentes isômeros dada pela regra da penalidade do pentágono adjacente, também conhecida como PAPR (*Pentagon Adjacency Penalty Rule*), que afirma que entre os possíveis isômeros na regra dos pentágonos isolados, o mais estável é o que minimiza o número de arestas comuns entre pentágonos, ou seja, aquele com o menor número de ligações pentágono-pentágono.⁸

Podemos afirmar, então, que fulerenos do tipo C_n , com $n < 60$, com todos os pentágonos isolados não existe. Nesse caso, Kroto argumenta que a estabilidade está relacionada com o isômero de menor número de fusões de pentágonos e maior simetria para cada um desses fulerenos. Para discutir a afirmação, os estudantes foram incitados a utilizar o material para encontrar e representar a estrutura do menor fulereno C_n que possa existir sem a fusão de pentágono do tipo III ou fusão sequencial dos pentágonos, isto é, o tipo I e II são suficientes.

Outro resultado que não é observado de imediato, mas depois de dicas e algumas tentativas podemos chegar, é que o menor fulereno sem a fusão de pentágono do tipo III, ou fusão sequencial dos pentágonos é o C_{50} - formado por 12 peças pentagonais e 15 peças hexagonais (Figura 4).



Figura 4. Demonstração do C_{50}

O C_{60} possui seis subunidades, denominadas piracelênicas, constituídas por dois pentágonos e dois hexágonos, sendo que é nesta parte da molécula que ocorrem as reações, geralmente na posição 1, 2² (Figura 5).

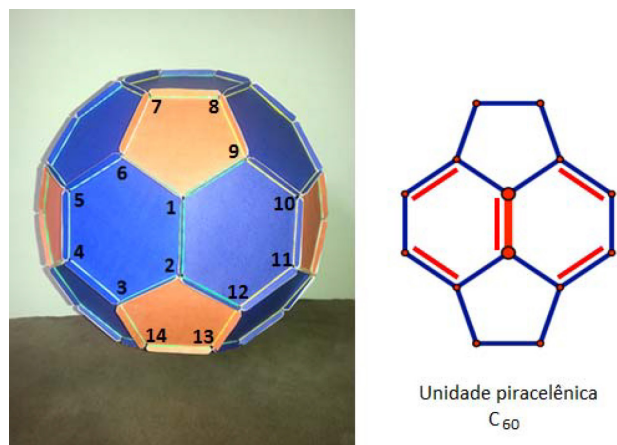


Figura 5. Demonstração da unidade piracelênica do C_{60}

A maioria dos autores não consideram o C_{60} uma molécula aromática, pois seus carbonos não possuem um ângulo de 120° com carbonos usuais sp^2 [$C = C$], porém, são ligeiramente piramidalizados de forma que a molécula não contém superfícies planares, o que, por sua vez, impede a existência de correntes anelares. Outro aspecto a ser considerado é que o fulereno não apresenta reações típicas de arenos, como adições eletrofílicas. Estes reagem de forma análoga à olefinas deficientes de elétrons, sendo passível de ataques nucleofílicos, radiculares e até mesmo reações de cicloadições. Acredita-se que a força motriz para a alta reatividade reside na tensão resultante de seus carbonos piramidalizados, que passa a ser aliviado após as transformações deles em carbono sp^3 [$C - C$].³

Harold Kroto decidiu pôr a terminação *eno* no nome do C_{60} (Buckminsterfulereno), por analogia com benzeno (C_6H_6), dada a existência de ligações π alternadas, as quais poderiam conferir ao C_{60} algum carácter aromático. É evidente que, dada a esfericidade deste, os orbitais p - não envolvidos na hibridação sp^2 - não serão exatamente paralelos (como acontece no benzeno), o que não propicia uma boa junção para garantir ligações π fortes e também não propicia uma deslocalização eficiente, o que deve se refletir no fato de, no C_{60} , existir uma fraca aromaticidade. Isto pode ser confirmado pelas distâncias internucleares entre os átomos de carbono: enquanto numa camada de grafite, em que a deslocalização é perfeita, todas as ligações têm o mesmo comprimento (1,42 Å), no C_{60} existem dois valores para o comprimento da ligação carbono-carbono: 1,455 Å, para as ligações $C-C$, e 1,391 Å para as ligações $C=C$.⁹

Sabe-se que a molécula de C_{60} , embora rica em elétrons, se comporta como uma espécie eletronegativa capaz de aceitar reversivelmente de um até seis elétrons, formando os ânions correspondentes. O carácter eletrônico deficitário deste fulereno foi comprovado por cálculos teóricos e atribuído aos orbitais moleculares LUMO não-ligantes, que estão em um patamar de energia muito baixo.¹ O excesso de densidade de carga negativa se acumula principalmente nos pentágonos, já que é a zona mais "piramidalizada" da estrutura esférica.⁶

Investigação III: a exceção do C_{22}

Com o material da oficina, foi requerido aos estudantes a construção de uma estrutura fechada na forma de um poliedro convexo utilizando 12 peças pentagonais e uma hexagonal, em que se verificou a não existência do fulereno C_{22} . O emprego do material pode colaborar nesta investigação, pois permitiu aos estudantes demonstrar que o poliedro sugerido não é possível, uma vez que a estrutura não fecha (I). Pode-se constatar, ainda, que a partir do C_{24} , este retoma o formato de "gaiolas" (II) - (Figura 6).

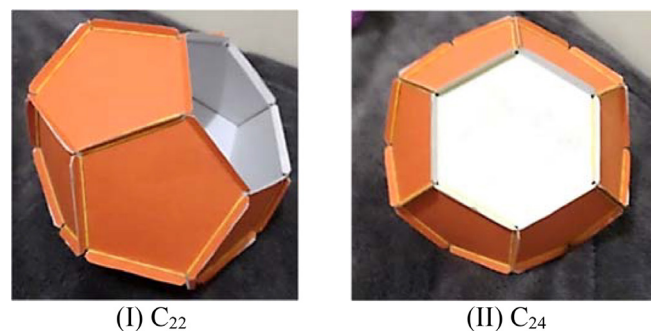


Figura 6. Demonstração do C_{22}

Com base nesta investigação, estabelecemos que podemos fechar qualquer rede esférica consistindo de 12 pentágonos e F_6 hexágonos, exceto para $F_6 = 1$.

$V=20+2F_6$. Com $F_6=0$, obtemos $V=20$, menor fulereno observado (C_{20}), composto apenas por doze pentágonos e zero hexágono.

Assim, com n vértices, um fulereno C_n existe para todo $n \geq 20$ e $n \neq 22$ e $F_6=n/2-10$.

Investigação IV: o C_{70}

Nesta investigação foi pedido aos estudantes que usassem as peças pentagonais e hexagonais do material para representar a estrutura totalmente fechada do C_{70} de modo que todas as faces pentagonais ficassem isoladas.

Conforme demonstrado matematicamente na investigação II, já era previsto que, para representar o C_{70} , seriam necessárias 12 peças pentagonais e 25 peças hexagonais.

Não é óbvio de imediato, mas assim como no caso do C_{60} , também existe apenas um isômero do C_{70} que mantém a regra de todos os pentágonos isolados (Figura 7). Para montar, basta acrescentar um "anel" com 5 peças hexagonais na parte que divide o C_{60} em dois hemisférios. Este argumento foi usado para explicar a predominância do C_{60} e C_{70} , apresentado por Kroto.



Figura 7. Demonstração do C_{70}

Investigação V: C_{36} , C_{32} , C_{28} , C_{26} , C_{24}

De acordo com o argumento 3 descrito na introdução deste artigo, utilizamos o material para representar e comparar os fulerenos C_{24} ; C_{26} ; C_{28} ; C_{32} ; e, C_{36} . Na oficina, os estudantes foram conduzidos a construir as estruturas, considerando os tipos de fusão de pentágonos⁴ (Figura 8), seguindo as seguintes orientações:

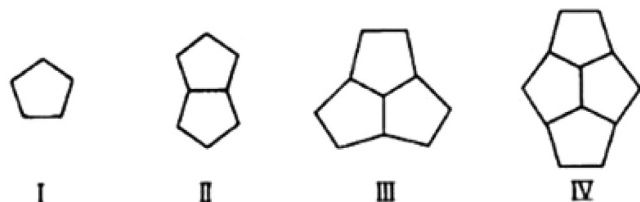


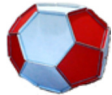

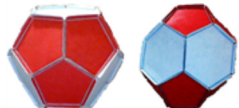


Figura 8. Tipos de fusão de pentágonos

- C_{36} que possa existir sem a fusão de pentágonos do tipo II.
- C_{32} que envolva apenas duas configurações de fusão de pentágonos do tipo III e outras fusões de ordem menor que o tipo III.
- C_{30} que possa existir sem a fusão de pentágonos do tipo IV.
- C_{28} (os dois casos existentes).
- C_{26} e C_{24} .

Comparar os resultados obtidos com o recurso disponível na Web,¹⁰ fornecido e mantido por David Tomanek e Nick Frederick, do *Michigan State University Computational Nanotechnology Lab*.

Segue uma tabela para apresentar os resultados desse trabalho investigativo. Usamos C_n para designar o fulerenos de n vértices (átomos de carbono) e F_6 o número de hexágonos necessários para construção dos casos de fulerenos investigados (Tabela 1).

Tabela 1. Resultados da investigação V

C_n	F_6	Resultados do trabalho investigativo
C_{36}	8	 Dentre os 15 isômeros possíveis do C_{36} , encontramos apenas um que existe sem a fusão de pentágonos do tipo III. Resultado obtido após visualização dos isômeros do fulereno C_{36} , disponibilizados por David Tomanek e Nick Frederick.
C_{32}	6	 Dentre os 6 isômeros possíveis do C_{32} , encontramos apenas um que existe e que envolve apenas duas configurações do tipo III. Resultado que pode ser confirmado após visualização dos isômeros do fulereno C_{32} , disponibilizados por David Tomanek e Nick Frederick.
C_{30}	5	Dentre os três isômeros possíveis do C_{30} , não existem isômeros sem a inclusão de configurações de alta tensão do tipo IV. Todos os casos foram investigados e representados somente com auxílio do material manipulável.
C_{28}	4	 Os dois isômeros possíveis representados possibilitaram a visualização das diferentes configurações de fusão de pentágonos. No primeiro caso, encontramos apenas configurações do tipo II e do tipo III. No segundo caso, encontramos configurações de alta tensão do tipo IV. Os dois casos foram investigados e representados somente com auxílio do material manipulável.
C_{26}	3	 O único caso do fulerenos C_{26} representado e obtido somente com auxílio do material manipulável.
C_{24}	2	 O único caso do fulerenos C_{24} representado e obtido somente com auxílio do material manipulável.

FULERENOS E SEU GRUPO PONTUAL DE SIMETRIA

A Matemática é uma ciência que fornece ferramentas para a construção de muitos conceitos científicos. Além disso, é possível observar na natureza, um recorrente padrão geométrico que alicerça e influi em arranjos espaciais, desde o formato de um favo de mel até a disposição de um cristal de gelo, todos tendendo a variações hexagonais.

Para entender tais variações, precisamos identificar a geometria das formas, que agem, desde seu nível mais básico, buscando a solução mais eficiente em termos de espaço e energia. No nível submicroscópico, o mundo também é estruturado em torno de leis geométricas, tendo a Química muitos exemplos: estruturas cristalinas, redes de Bravais, nanocompostos e *clusters*.

Na Química, a simetria é deveras importante para determinar as propriedades físicas de compostos; orientar como as reações podem ocorrer; justificar os orbitais híbridos que são possíveis em

determinadas moléculas; construir diagramas de energia de orbitais moleculares; discutir a estrutura eletrônica; discutir vibrações moleculares e atribuir transições em espectroscopia eletrônica. O estudo da simetria não deixa de ser relevante nos fulerenos, os quais têm a sua estabilidade, assim como muitas propriedades, associada à simetria das estruturas.¹

Seguimos com a proposta de estudo e investigação sobre grupo de simetria das moléculas de fulerenos e algumas de suas aplicações na Química. Para isso, introduzimos o assunto de forma oral e expositiva e utilizamos, como meio de referência e consultas, o recurso da Web fornecido por Nick Frederick na *Michigan State University Computational Nanotechnology Lab*.¹⁰ Para representar as estruturas, utilizou-se o mesmo material empregado nas atividades anteriores e um espelho plano.

Elementos e operações básicas de simetria

O tipo de simetria para o qual uma molécula pertence é conhecida como seu grupo pontual. O grupo pontual de qualquer molécula é o conjunto das operações de simetria que consiste em mover um corpo de tal maneira que sua posição final, após o movimento, seja equivalente à inicial. Um elemento de simetria é uma entidade geométrica (ponto, reta ou plano) com relação a qual se efetua uma ou mais operações de simetria. As operações de simetria estão baseadas em elementos de simetria, e ambos (operações e elementos) são condições necessárias para definir simetria. No estudo de sistemas finitos, tais como moléculas, aglomerados moleculares, etc., existem somente quatro tipos de operações (Tabela 2). Em um cristal, as operações de translações também devem ser incluídas.

Grupos pontuais de simetria

Um grupo pontual é representado por um conjunto de operações de simetria. Para esta atividade os estudantes utilizaram o material proposto na oficina e um espelho. Segue um esquema bastante difundido nos textos didáticos para classificar a molécula (Figura 9).

Após a apresentação deste estudo introdutório de forma expositiva, continuamos com a investigação proposta a seguir.

Tabela 2. Resumo dos elementos e das operações de simetria

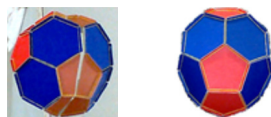
Elementos de simetria	Operações de simetria
Eixos de rotação (C_n)	C_n : uma ou mais rotações $2\pi/n$ rad. ao redor do eixo próprio (C_n).
Planos σ : σ_h - reflexão horizontal σ_v - plano de reflexão vertical σ_d - plano de reflexão diagonal	σ : a reflexão em um plano de simetria σ gera uma imagem geométrica da molécula no espelho.
Centros de simetria (i) (ou centro de inversão)	i : Inversão. Inversão de todos os átomos através de um centro.
Eixo Rotação-reflexão (S_n)	S_n : sequência de rotação-reflexão no eixo impróprio (S_n).

Investigação VI:

A proposta foi explorar a página da Web¹⁰ construída e mantida por Frederick para auxiliar na visualização e na escolha de isômeros do fulereno que representem exemplos dos grupos de simetria apresentados. O material manipulável foi utilizado para representá-los. Seguem as tabelas com os resultados deste trabalho investigativo.

I) Grupos de baixa simetria (Tabela 3)

Tabela 3. Resultados da investigação VI - I

Grupo pontual de simetria	Elementos de simetria	Operações de simetria	Exemplo de fulereno para representar o grupo
C_1	Também é um elemento de simetria	E (identidade)	Muitos representantes
C_s	1 plano σ	E e σ_h	C_{34} (C_s) 
C_i	1 centro	E e i ($S_2=C_i$)	Nenhum representante

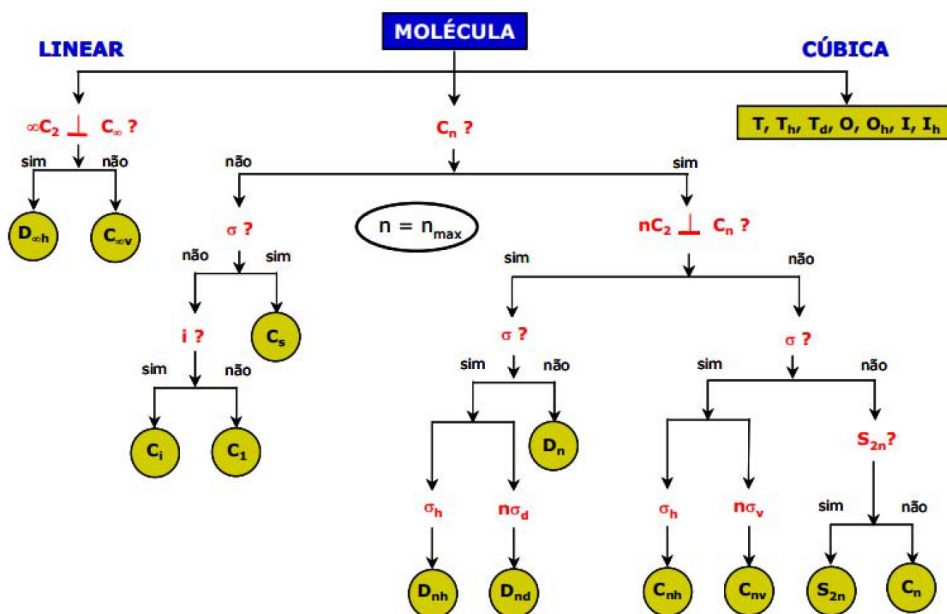
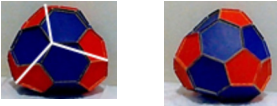




Figura 9. Fluxograma para classificação do grupo de simetria de moléculas¹¹

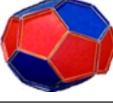
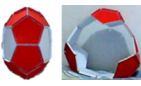

II) Grupos com um único eixo de simetria (Tabela 4)

Tabela 4. Resultados da investigação VI-II

Grupo pontual de simetria.	Elementos de simetria	Operações de simetria	Exemplo de fulereno C_{34} (C_s) para representar o grupo
C_n ($n=3$)	eixos C_3	E, C_3 e C_3^2	C_{46} (C_3) 
C_{nh} ($n=2,3,\dots$)	1 eixo C_n e 1 plano σ_h	$E, \sigma_h, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}$ e S_n . Se n é par, existe i .	Nenhum representante
C_{nv} ($n=3$)	um eixo de rotação C_n e n planos verticais σ_v	$E, 2C_3, 3\sigma_v$	C_{34} (C_{3v}) 
S_n ($n=4$)	1 eixo impróprio (S_n)	E, S_4, C_2 e S_4^3	C_{44} (S_4) 

III) Grupos com um eixo C_n e n eixos C_2 (Tabela 5)

Tabela 5. Resultados da investigação VI-III

Grupo pontual de simetria.	Elementos de simetria	Operações de simetria	Exemplo de fulereno C_{34} (C_s) para representar o grupo
D_n ($n=2,3,4,\dots$)	eixos C_2 e C_n	$E, 2C_3$ e $3C_2$	C_{32} (D_3) 
D_{nh} ($n=3$)	1 eixo C_n , n eixos C_2 e 1 plano (\perp) ao eixo C_n . O eixo C_n é também um eixo S_n .	$E, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2S_6$ e $3\sigma_v$	C_{32} (D_{3h}) 
D_{nd} ($n=2,3,4,\dots$)	1 eixo C_n , n eixos C_2 e n planos contendo eixo C_n . São planos diagonais σ_d .	$E, 2C_3, 3C_2, i, 2S_6$ e $3\sigma_d$	C_{32} (D_{3d}) 

IV) Grupos de alta simetria (Tabela 6)




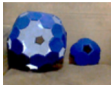
Estes grupos estão relacionados com as propriedades de simetria dos poliedros regulares (poliedros platônicos): tetraedro, cubo, octaedro, dodecaedro e icosaedro.

Simetria, polaridade e moléculas quirais

As aplicações de simetria estão relacionadas à polaridade e à quiralidade das moléculas.

Uma molécula com centro de inversão é apolar, sendo que a inversão implica na distribuição de carga igual em todos os pontos

Tabela 6. Resultados da investigação VI-IV

Grupo pontual de simetria	Elementos de simetria	Operações de simetria	Exemplo de fulereno C_{34} (C_s) para representar o grupo
T_d	Possuem os mesmos elementos de simetria que um tetraedro regular.	$E, 8C_3, 3C_2, 6S_4$ e $6\sigma_d$	C_{28} (T_d) 
T	$T=T_h$, sem reflexões e sem rotações impróprias.	$E, 4C_3, 4C_3^2$ e $3C_2$	C_{44} (T) 
I_h	Possuem os mesmos elementos de simetria que um icosaedro ou dodecaedro regular	$E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2, i, 12S_{10}, 12S_{10}^3, 20S_6$ e 15σ	C_{60} (I_h) 
I	$I=I_h$, sem reflexões e sem rotações impróprias.	$E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2$	C_{140} (I) 

opostos diametralmente a um centro (i). Assim, moléculas polares não apresentam centro de inversão.

O momento dipolo não pode estar perpendicular aos planos de reflexão e também não pode estar perpendicular ao eixo de rotação, pois moléculas que possuem C_2 perpendicular a um eixo C_n ou σ_h perpendicular a um eixo C_n tem a resultante do momento dipolo igual a zero, ou seja, são apolares. Assim, uma molécula não pode ser polar se ela pertencer a qualquer dos grupos D e seus derivados, os grupos cúbicos T e O , o grupo icosaédrico I e suas modificações.

Uma molécula quiral não pode ser sobreposta na sua imagem de reflexão e é opticamente ativas quando observadas. Uma molécula quiral e sua imagem (reflexão) são chamados enantiômeros. Os pares de enantiômeros giram o plano da luz polarizada na mesma magnitude, mas para lados opostos. Para ser quiral uma molécula não pode ter S_n . Os grupos que apresentam S_n são D_{nh} , D_{nd} e os grupos T_d , O_h e I_h . Para os eixos S_n disfarçados ($\sigma=S_1$; $i=S_2$), moléculas com um plano de reflexão ou com um centro de inversão não podem ser quirais.

POTENCIALIDADES DO MATERIAL E O APELO TEMÁTICO DOS FULERENOS

Como se pode perceber, todos os conteúdos das atividades da oficina foram trabalhados a partir do material apresentado. Este foi empregado de modo a demonstrar elementos da estrutura de fulerenos que estão limitados à abstração do conteúdo químico. Em outras palavras, o material revelou um expressivo valor para o ensino de Química no que diz respeito a “materialização” de conceitos, ajudando o estudante a compreender estruturas químicas rígidas pela geometria [molecular], e assumindo a Matemática como uma indispensável ferramenta no estudo de fulerenos,¹² estudo este que demonstrou riqueza conceitual e apelo frente à atualidade do tema em importantes pesquisas de Química. Além do mais, o material auxiliou na compreensão dos artigos selecionados na oficina, o que aproximou os estudantes à esfera da pesquisa, e, conseqüentemente, da escrita científica.

Pontuamos, ainda, que o desenvolvimento da habilidade de representar mentalmente um objeto que não está ante os olhos, depende da exploração de modelos, programas computacionais ou materiais que possibilitem ao estudante a construção de imagens mentais. Em consonância, o material utilizado contribuiu para a percepção do arranjo espacial dos fulerenos, permitindo o desenvolvimento da noção da tridimensionalidade, assim como o diálogo e a inter-relação de diferentes áreas do conhecimento, numa rede de comunicação, isto é, num saber unificado.

Em suma, não podemos descartar o fato de que transformar artigos científicos em recursos didáticos - em especial nos cursos de graduação - pode ser uma forma de socializar a produção científica, favorecendo o processo de ensino e a proposição de metodologias. Embora algumas iniciativas sobre a utilização dos artigos científicos no ensino superior de Química sejam relatadas na literatura internacional, o Brasil ainda carece de trabalhos pautados nesta prática.¹³

CONCLUSÃO

Ao contrário do que se pode imaginar, os fulerenos não são objetos de estudo exclusivos da Química ou da Física, mas dão lugar a problemas puramente matemáticos. Neste artigo buscamos explorar as propriedades básicas destas moléculas sob o ponto de vista matemático, demonstrando a riqueza conceitual deste tema, além da possibilidade de utilização para o ensino superior, tecendo, em especial, um diálogo com a Química sob o enfoque geométrico. Ressaltamos, inclusive, as potencialidades de um material de fácil acesso que demonstrou contribuir para o estudo dos fulerenos e a superação das limitações representacionais relacionadas à abstração exigida. Assim, o material apresentado foi uma valiosa ferramenta/estratégia que possibilitou a materialização de conceitos matemáticos e químicos.

Como é possível notar, a visão geométrica das moléculas – garantida pelo material utilizado na oficina – é fundamental para a compreensão das estruturas, das ligações químicas e das propriedades físico-químicas dos fulerenos.

REFERÊNCIAS

1. Santos, L. J.; Rocha, G. P.; Alves, R. B.; Freitas, R. P.; *Quim. Nova* **2010**, *33*, 680.
2. Krätschmer, W.; Lamb, L. D.; Fostiropoulos, K.; Huffman, D. R.; *Nature* **1990**, *347*, 354.
3. Rodrigues, S. B. V.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal de Minas Gerais, Brasil, 2011.
4. Kroto, H. W.; *Nature* **1987**, *329*, 529.
5. Fowler, P. W.; Manolopoulos, D. E.; *An atlas of fullerenes*, Dover Publications: New York, 2007.
6. Alegret, N.; Rodríguez-Forteza, A.; Poblet, J. M.; *An. Quim.* **2014**, *110*, 121.
7. Dias, G. H. M.; *Quim. Nova* **1995**, *18*, 592.
8. Gan, L.; Zhao, J.; Hui, Q.; *J. Comput. Chem.* **2010**, *31*, 1715.
9. <http://www.spq.pt/magazines/BSPQ/631/article/30001382/pdf>. Acessada em dezembro de 2016.
10. <http://www.nanotube.msu.edu/fullerene/fullerene-isomers.html>. Acessada em julho de 2016.
11. http://www.lqes.iqm.unicamp.br/images/vivencia_lqes_index_classificacao_moleculas.pdf. Acessada em julho de 2016.
12. Reis, J. D. S.; Corrêa, T. H. B.; *Resumos do XVIII Encontro Nacional de Ensino de Química*, Florianópolis, Brasil, 2016.
13. Massi, L.; Santos, G. R.; Ferreira, J. Q.; Queiroz, S. L.; *Quim. Nova* **2009**, *32*, 503.