

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PAMPA

RODRIGO MONTEIRO GUSMÃO

**PROJETO E CONSTRUÇÃO DE MODELOS MOLECULARES FLEXÍVEIS E
MODULARES PARA IMPRESSÃO 3D**

Bagé

2020

RODRIGO MONTEIRO GUSMÃO

**PROJETO E CONSTRUÇÃO DE MODELOS MOLECULARES FLEXÍVEIS E
MODULARES PARA IMPRESSÃO 3D**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal do Pampa, como requisito parcial para obtenção do Título de licenciado em Química em Área de Ciências e Tecnológicas.

Orientador: Paulo Henrique Guadagnini

Bagé

2020

Ficha catalográfica elaborada automaticamente com os dados fornecidos pelo(a) autor(a) através do Módulo de Biblioteca do Sistema GURI (Gestão Unificada de Recursos Institucionais).

G982p Gusmão, Rodrigo Monteiro

Projeto e construção de modelos moleculares flexíveis e modulares para impressão 3D / Rodrigo Monteiro Gusmão.
39 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Universidade Federal do Pampa, QUIMICA, 2020.

“Orientação: Paulo Henrique Guadagnini”.

1. Modelo molecular. 2. Impressão 3D. I. Título.

RODRIGO MONTEIRO GUSMÃO

**PROJETO E CONSTRUÇÃO DE MODELOS MOLECULARES FLEXÍVEIS E
MODULARES PARA IMPRESSÃO 3D**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal do Pampa, como requisito parcial para obtenção do Título de Licenciado em Química em Área de Ciências e Tecnológicas.

Trabalho de Conclusão de Curso defendido e aprovado em 04, dezembro de 2020.

Banca examinadora:



Prof. Dr. Paulo Henrique Guadagnini
Orientador
(Unipampa)



Prof. Dr. Márcio Marques Martins
(Unipampa)



Prof. Dr. Fernando Junges
(Unipampa)

Dedico este trabalho a minha família, por sua capacidade de acreditar e investir em mim.

AGRADECIMENTO

Gratidão pelos meus pais, sua presença e amor incondicional na minha vida sempre. Este trabalho é a prova de que os esforços deles pela minha educação não foram em vão e valeram a pena.

Ao meu orientador Paulo por acreditar no meu trabalho e pela paciência, apoio e ensinamentos ao longo dessa pesquisa.

Aos professores que me acompanharam ao longo de minha graduação e serviram de inspiração para me tornar um professor e continuar ajudando outras pessoas assim como me ajudaram.

A todos os colegas de curso que contribuíram e aguentaram minhas reclamações ao longo da graduação e em especial meu colega e amigo Luís pelas conversas e ajuda mútua. Juntos conseguimos avançar e ultrapassar os obstáculos.

Ao professor e amigo Marcio que sempre com grande atenção me escutou e motivou a continuar trabalhando e foi essencial para minha graduação.

“Conhecimento não é aquilo que você sabe, mas o que você faz com aquilo que você sabe”.

Aldous Huxley

RESUMO

Este trabalho nasce da inquietação da falta de modelos moleculares modulares de projeto livre para impressão 3D. Apesar da presença comercial de kits de modelos moleculares, modelos moleculares livres, que permitem a sua fabricação através de impressão 3D não são largamente disponíveis. O presente trabalho descreve o projeto e construção de um conjunto de arquivos digitais que podem ser utilizados para fabricação aditiva de modelos moleculares com sete peças (átomos e ligações) e um guia prático para impressão dos modelos. Os modelos personalizáveis permitem o ajuste de tamanho das peças, são modulares e flexíveis, permitindo a construção de moléculas em diferentes conformações espaciais, apresentam baixo custo de fabricação e são adaptáveis a qualquer impressora 3D. Os modelos produzidos apresentaram boa resistência mecânica durante o manuseio e permitiram a montagem de um conjunto de moléculas orgânicas. Acreditamos que o presente trabalho poderá contribuir para a construção de atividades didáticas nas quais a aplicação de modelos moleculares pode potencializar positivamente o aprendizado de conceitos abstratos como estrutura molecular e isomeria.

Palavras-Chave: Modelo molecular, Impressão 3D, Ensino de química.

ABSTRACT

This work arises from the concern about the lack of free-standing modular molecular models for 3D printing. Despite the commercial presence of molecular model kits, free molecular models, which allow their manufacture through 3D printing are not widely available. The present work studies the design and construction of a set of digital files that can be used for additive manipulation of molecular models with seven pieces (atoms and bonds) and a practical guide for printing the models. The customizable models allow the size adjustment of the pieces, are modular and flexible, allowing the construction of molecules in different spatial configurations, presenting low manufacturing cost and are adaptable to any 3D printer. The models available have good mechanical resistance during handling and allow the assembly of a set of organic molecules. We believe that the present work can contribute to the construction of didactic activities in which the application of molecular models can positively enhance the learning of abstract concepts such as molecular structure and isomerism.

Keywords: Molecular model, 3D printing, Chemistry teaching.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Processo de impressão FFF	18
Figura 2 – Fluxo de trabalho.....	21
Figura 3 – Modelagem da peça para o átomo de Hidrogênio com ligação simples no software Solidworks	22
Figura 4 –Impressoras (a) Creality 3D Ender-3 Pro e (b) Gtmax 3D core A3.....	22
Figura 5 – Modelo 3D para ligação simples	23
Figura 6 – Modelo 3D para o átomo de hidrogênio com Ligação simples.....	24
Figura 7 – Modelo 3D para ligação dupla.....	24
Figura 8 – Modelo 3D para oxigênio	25
Figura 9 – Modelo 3D para o nitrogênio	25
Figura 10 – Modelo 3D para carbono Sp^3	26
Figura 11 – Modelo 3D para carbono sp^2	26
Figura 12 – Hidrogênio no Ultimaker	27
Figura 13 – Átomos de hidrogênio com ligação simples no Ultimaker Cura	28
Figura 14 – Modelo molecular para o cis-2-buteno na escala de 50%(marrom) e 100%(preto).....	29
Figura 15 – Peças para montagem de modelos moleculares: Hidrogênio, Ligação simples, Ligação dupla, Carbono, Carbono sp^2 , Nitrogênio, Oxigênio	29
Figura 16 – Modelos moleculares para o cis-2-buteno e trans-2-buteno	30
Figura 17 – Modelos moleculares para o Etanol em duas conformações. Impressão feita em ABS	30
Figura 18 – Modelos moleculares para o ciclo-hexano seus confômeros: a) Cadeira b) Barco. Impressão feita em ABS com filamentos de diferentes cores.....	31

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tabela com tempo médio das peças com escala 100%.....	28
--	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

3D – Tridimensional

2D - Bidimensional

Unipampa – Universidade Federal do Pampa

FDM – Fused Deposition Modeling (modelagem por filamento fundido)

FFF- Fused Filament Fabrication (fabricação por filamento fundido)

ABS - Acrylonitrile Butadiene Styrene (acrilonitrila butadieno estireno)

PLA - Polylactic acid (ácido polilático)

STL - Stereolithography (estereolitografia)

PETG - Polyethylene terephthalate (Polietileno Tereftalato de Etileno Glicol)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
2	OBJETIVOS.....	14
2.1	Objetivo geral.....	15
2.1	Objetivo específico.....	15
3	CONCEITOS GERAIS E REVISÃO DE LITERATURA.....	15
3.1	Trabalhos Correlacionados.....	16
3.2	Modelos didáticos	16
3.3	Tecnologia de impressão 3D.....	17
3.4	Movimento maker.....	18
4	METODOLOGIA.....	20
4.1	Análise de software para modelagem 3D.....	21
4.2	Impressoras utilizadas no trabalho.....	22
5	APRESENTAÇÃO DA PESQUISA E ANÁLISE DOS RESULTADOS.....	23
5.1	Construção do modelo	24
5.2	Gerando o arquivo STL.....	26
5.3	Arquivo GCODE para a impressora 3D.....	27
5.4	Recursos do modelo.....	29
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	32
	REFERÊNCIAS.....	33
	APÊNDICES.....	36

1 INTRODUÇÃO

A tecnologia tem avançado e oportunizado novos recursos como a impressão 3D, que está mais acessível e tornando-se mais presente no nosso cotidiano, ou seja, com produtos feitos com essa tecnologia ou derivados dela.

Modelos tridimensionais (3D) são uma ferramenta pedagógica essencial para auxiliar educadores de química devido à sua capacidade de facilitar a visualização de moléculas em três dimensões. Devido à dificuldade de formar uma imagem mental correta da estrutura química em 3D a partir de representações de moléculas em papel no plano em 2D, torna-se importante a representação física da estrutura molecular através de modelos tridimensionais físicos e manipuláveis para auxiliar no processo de ensino-aprendizagem.

Os kits de modelos comerciais são amplamente utilizados, em particular pelos químicos orgânicos. Com sua natureza modular, os kits permitem que as moléculas sejam montadas, modificadas e desmontadas de acordo com a necessidade do usuário. Os modelos comerciais possuem um padrão de tamanho pequeno e sua utilidade como auxílio em algumas situações acaba por ser limitado, como para demonstrações para muitas pessoas. Modelos comerciais maiores para demonstrações e aulas são difíceis de encontrar e possuem um custo elevado. Outro problema de muitos dos kits comerciais é a falta de peças avulsas de reposição.

O usuário de uma impressora 3D pode escolher quantas peças de cada átomo ou ligação ele queira imprimir, desde que ele possua um arquivo em 3D configurado para sua impressora. É possível também imprimir quantas peças o usuário precisar, ainda com a possibilidade de personalização de escala.

Com fácil reposição e alta resistência conciliando a possibilidade de escolas, professores e estudantes fabricarem seus próprios modelos moleculares, torna-se uma realidade cada vez mais acessível com a tecnologia de impressão 3D e ainda com o filamento de PLA que é biodegradável e oferece uma excelente resistência mecânica e durabilidade além de possuir uma vasta gama de cores.

Os modelos comerciais possuem alto custo tanto os fabricados no Brasil como importados, dificultando o acesso para muitos educadores e instituições de ensino de adquirirem esses produtos e as impressoras 3D estão diminuindo o valor e o custo de produção tornando-se boa opção.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

O propósito deste trabalho é apresentar um produto educacional que consiste em um conjunto de modelos digitais para fabricação de modelos moleculares físicos com impressão 3D.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Criar um conjunto de arquivos para impressão 3D de átomos e de ligações que permitam a montagem de modelos moleculares com potencial para aplicação em atividades de ensino de química.

- b) Desenvolver um guia de impressão 3D para os arquivos gerados.

3 CONCEITOS GERAIS E REVISÃO DE LITERATURA

3.1 TRABALHOS CORRELACIONADOS

Muitos dos trabalhos sobre a impressão 3D de modelos moleculares buscam trabalhar com estrutura rígidas e com uma estrutura específica, como no trabalho de (Sá, Faria Maruyama, Bergamo e Viana 2016). Outros trabalhos utilizam esferas com diferentes encaixes em ângulos e com hastes que permitem representar geometria molecular e diferentes hibridizações. No modelo produzido por (Fazelpour e Fennell 2020), átomos podem girar em torno de suas ligações, tornando possível o desenvolvimento de atividades didáticas que evidenciam a isomeria conformacional de moléculas.

O trabalho de (Penny, Cao, Patel e et al 2017) apresentou um modelo em escala maior para apresentações para um grande número de pessoas e investigou a utilidade da impressão 3D no ensino de estereoquímica, isomerismo e hibridizações.

No trabalho de (Andrade 2019) foi utilizada a técnica de impressão 3D para trabalhar tópicos de geometria molecular, com esferas modificadas a partir de modelos encontrados no repositório Thingiverse e utilizando resinas especiais e polimento para dar acabamento melhorando aparência e aumentando durabilidade do modelo.

3.2 MODELOS DIDÁTICOS

Os modelos didáticos podem ser menores que os objetos em que eles querem representar ou maiores, os modelos são uma forma de representação podendo ser físicos ou digitais (GILBERT, 2004).

De acordo com Pietrocola (2002), o objetivo da Ciência é encontrar explicação para fatos reais a partir daquilo que se percebe ou se supõe existir, e para isso pode-se utilizar a construção de modelos como mecanismo para se gerar um modelo teórico. Assim, acredita-se que os modelos são ferramentas didáticas capazes de

sustentar a mediação entre ensino e aprendizagem, além de tornar as aulas de Ciências e Biologia mais dinâmicas.

Segundo Lima (2007) os modelos didáticos possuem o objetivo de auxiliar os estudantes através do uso de representações de modelos apresentados pela ciência, nos quais o aluno pode manusear e observar por vários ângulos o seu objeto de estudo e assim torna-se ferramenta mediadora entre o modelos científico e modelo elaborado pelo estudante.

Para Islãs e Pesa (2003), os modelos didáticos são elaborados pela comunidade educativa e são usados pelos docentes, em suas aulas para ajudar os estudantes a compreender os modelos científicos. Os modelos didáticos tem como objetivo a construção de modelos mentais adequados para a compreensão dos modelos científicos e por consequência a compreensão do mundo físico.

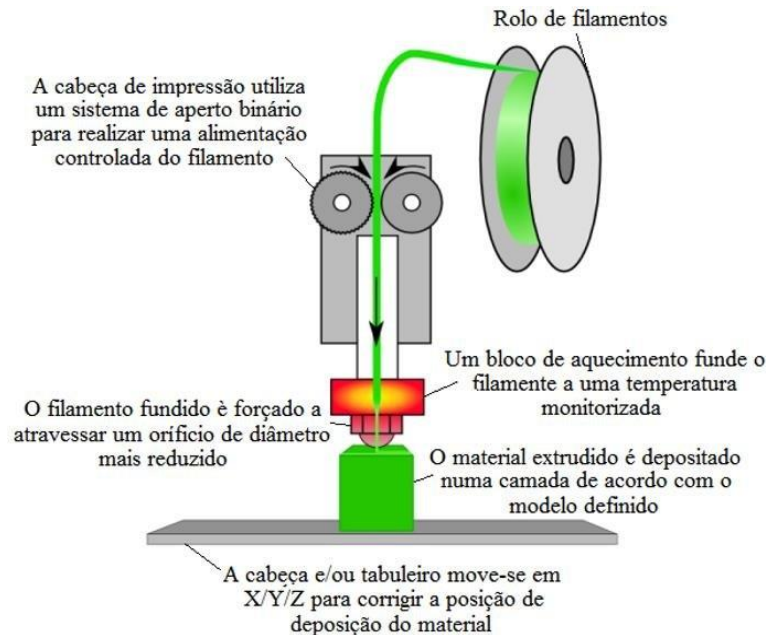
Os modelos didáticos também podem apresentar desvantagens, como por exemplo a interpretação equivocada por parte dos alunos tomando os modelos como um espelho do que é encontrado na natureza. E também ocorre segundo (Lima e Núñez, 2004) uma simplificação do significado modelo didático que para o professor e para os alunos não é a mesma, dessa forma os alunos memorizam o modelo e não adquirem o significado dele, fato que limita a relevância dos modelos como ferramenta de aprendizagem.

3.3 TECNOLOGIA DE IMPRESSÃO 3D

Impressão 3D consiste na construção automatizada de objetos sólidos, feitos camada por camada a partir de um arquivo digital com a imagem 3D do objeto, essa técnica conhecida como FDM (Modelagem por Filamento Fundido) ou FFF (Fabricação por Filamento Fundido) é uma das mais utilizadas por causa de fatores como custo baixo e fácil acesso aos materiais necessários.

Fabricação com Filamento Fundido (FFF) é uma manufatura aditiva que consiste no aquecimento do filamento que pode ser geralmente PLA ou ABS, até temperatura que permita que material funda saia através do bico extrusor. Essa extrusão irá formar camadas como na Figura 1 a partir da movimentação do extrusor nos eixos X,Y,Z.

Figura 1 Processo de impressão FFF



Fonte: Moreira, 2016

A impressão 3D teve início com o trabalho de Kodama (1981) que publicou um método de criar modelos plásticos pela solidificação de um fotopolímero utilizando raios ultravioleta. No seu trabalho, ele ressaltou que a técnica permitiu a construção de formas complexas e a criação de objetos com a sua estrutura interna de uma única vez, o que pode dispensar a tradicional etapa de montagem.

3.4 MOVIMENTO MAKER

O movimento maker é um termo usado para descrever o “faça você mesmo”, ou seja, que qualquer pessoa possa desenvolver com autonomia os mais variados projetos e objetos.

O evento Campus Party no Brasil é um dos principais exemplos de cultura maker que reuni milhares de jovens para um festival de inovação, criação, ciência, empreendedorismo e universo digital. Na educação, o movimento maker busca estimular a utilização de ferramentas para facilitar o ensino e aprendizagem, como com impressora 3D, cortadores a laser, robótica, placas de Arduino (Silveira, 2016).

As escolas públicas no Brasil vêm apropriando-se de ferramentas tecnológicas de forma lenta e quase sempre problemática, e a inserção dessas tecnologias nas

escolas enfrenta dificuldades financeiras e para construir o conhecimento de colaboração e do compartilhamento (CARVALHO, 2011).

Há um crescente interesse no movimento maker no Brasil, apesar de o termo maker ser pouco utilizado, como afirma Barbosa e Silva e Merkle (2016). Este autor ainda afirma que percebe-se que há pouco suporte financeiro e também pedagógico para que escolas possam desenvolver projetos maker.

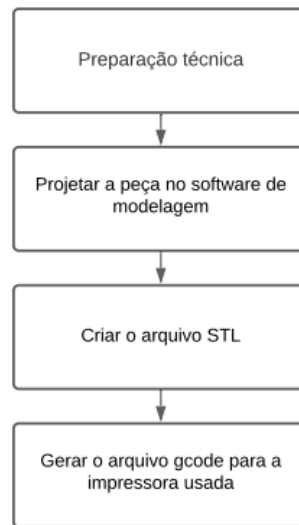
Uma alternativa são os FabLabs que são laboratórios de fabricação digital e oficinas, espaços criados para estimular a criatividade, conhecimento e o “faça você mesmo”. Os FabLabs fornecem acesso ao ambiente, as habilidades, aos materiais e à tecnologia avançada para permitir que qualquer pessoa em qualquer lugar do mundo faça (quase) qualquer coisa (FABFOUDATION, 2016).

Segundo Mandavilli (2006), os FabLabs são ambientes que possibilita as pessoas acesso tecnologia permite que pessoas produzam soluções para problemas, em locais com pouco acesso à educação ou a tecnologia.

4 METODOLOGIA

No processo de impressão é necessário que os arquivos estejam no formato gcode previamente prontos. Mas esse formato gcode depende especificamente da impressora que for ser utilizado e do material ao qual a impressora irá utilizar. A impressora pode utilizar filamentos do tipo: Ácido polilático (PLA), Polietileno tereftalato de etileno glicol (PETG) e Acrilonitrila butadieno estireno (ABS), a escolha do filamento pode depender de qual o material é suportado pela impressora 3D disponível. Um dos filamentos mais conhecidos e utilizados é PLA por ser um plástico biodegradável com boa resistência mecânica e pode ser utilizado tanto em impressoras abertas como fechadas por sua baixa temperatura de manipulação. Os filamentos possuem uma vasta gama de cores diferentes, e o filamento em PLA é fundido entre 195 a 220°C e a mesa em aquecida a 60°C, assim, o objeto vai sendo moldado camada por camada ao sair da impressora. O ABS e PETG são menos ecológicos e não recicláveis e tem que ser utilizados em impressoras fechadas sendo mais suscetíveis a deformações devido a variações de temperatura durante a impressão.

O desenvolvimento do conjunto de peças que compõem o kit molecular foi executado em algumas etapas, como pode ser visto na Figura 2. A preparação técnica que envolveu a escolha das ferramentas que seriam utilizadas, projetar a peça no software de modelagem que foi desenvolvimento no solidwoks, gerando o arquivo STL que consiste em converter a casca externa de um objeto em uma infinidade de triângulos para tornar o arquivo possível de ser impresso e gerar o arquivo gcode que corta o objeto em camadas e guia a impressora onde depositar o material, quanto de temperatura, velocidade e posição z,x,y o bico extrusor deve mover para impressora utilizada.

Figura 2 Fluxo de trabalho

Fonte: Autor

4.1 ANÁLISE DE SOFTWARES PARA MODELAGEM 3D

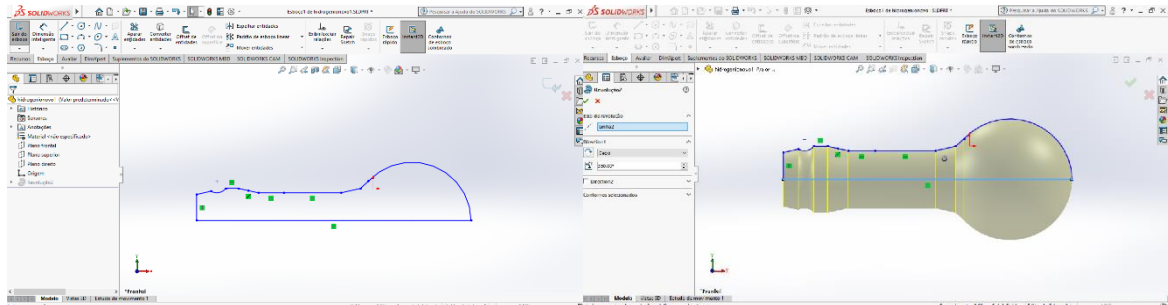
Primeiramente foi feita uma pesquisa sobre os principais softwares de modelagem 3D como Blender 3D, Google Sketchup, Solidworks. Na escolha do software foi levado em conta alguns aspectos como funções e familiaridade com o mesmo.

O escolhido para o desenvolvimento das peças do kit molecular foi Solidworks (DASSAULT, 2020) tanto por ser um dos softwares de modelagem 3D mais utilizados e também por ter licença de uso pela Universidade Federal do Pampa. Foi desenvolvido inicialmente pela Solidworks Corporation, mas em 1997 a empresa foi adquirida pela multinacional francesa Dassault Systemes S.A.

O software de modelagem 3D como o Solidworks cria o arquivo STL que possibilita ser gerado o arquivo final para impressão, que será o gcode. Mas é necessário ser utilizado mais um software pra ser gerado esse arquivo gcode, conhecidos como software de fatiamento que funciona dividindo o objeto em várias camadas de modo que oriente a impressora para confecção do objeto.

O Solidworks permite modelar a peça a partir de um perfil como no caso do hidrogênio na Figura 3, e rotacionar (completar o desenho pela linha do eixo x, em 360° como na Figura 3 a direita) para criar a estrutura básica.

Figura 3 Modelagem da peça para um átomo de hidrogênio com ligação simples no software Solidworks

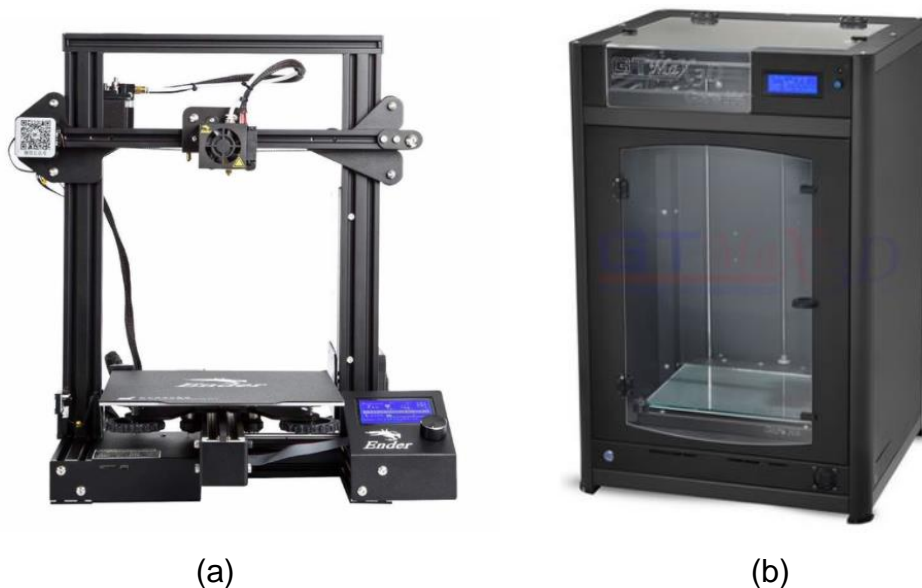


Fonte: Autor

4.2 Impressoras utilizadas no trabalho

Durante o trabalho foram utilizadas duas impressoras diferentes a Creality 3D Ender- 3 Pro como na Figura 4(a) com PLA por ser uma impressora aberta, possui um custo acessível e é um kit para ser montado pelo próprio usuário, sendo possível personalizar ela com peças impressas nela mesmo. A Gtmax 3D core A3 (Figura 4(b)) é uma impressora fechada e trabalha com alta temperatura e é compatível com o filamento ABS. Diferentemente da Ender, a impressora da Gtmax 3D possui um custo mais elevado, e vem montada e pronta para ser utilizada.

Figura 4 Impressoras (a) Creality 3D Ender -3 Pro e (b) Gtmax 3D core A3



Fonte: Autor

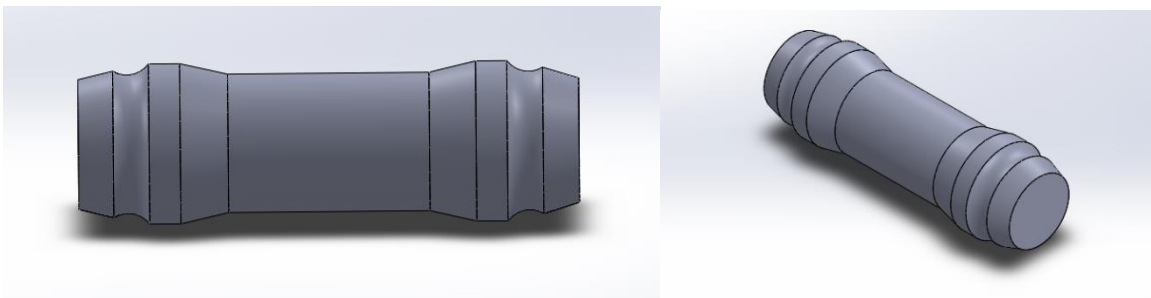
5 APRESENTAÇÃO DA PESQUISA E ANÁLISE DOS RESULTADOS

5.1 CONSTRUÇÃO DO MODELO

Começando pelo desenho da peça no software Solidworks, que cria um sólido em 3D permitindo então exportar o arquivo em STL para o próximo passo. A escolha dos átomos foi importante para saber qual seria a primeira peça a ser modelada para a construção do modelo, com carbono, nitrogênio, oxigênio e hidrogeno e também as ligações simples e também a dupla para esse modelo. Nesse processo inicial de criação os átomos deveriam estar em escala a partir do raio atômico para que o carbono por exemplo não fique com mesmo tamanho do hidrogênio, podendo confundir o usuário do modelo.

A ligação simples como podemos ver na Figura 5, foi a primeira peça a ser criada pois ela foi importante para desenvolver o encaixe entre os átomos. Esta peça possui quatro centímetros de comprimento, o padrão de encaixe foi feito a partir dele e foi utilizada como referência para as outras peças.

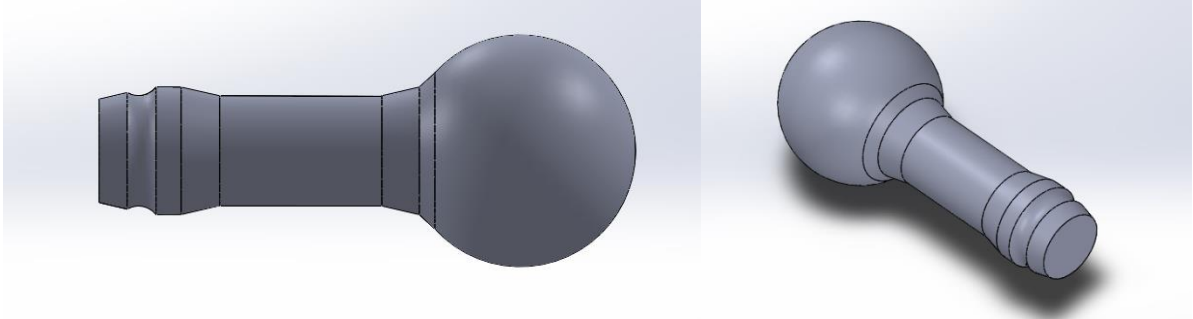
Figura 5 Modelo 3D para ligação simples



Fonte: Autor

O hidrogênio como na Figura 6 foi pensado para ser uma peça só para ficar mais fácil a impressão e foi feito sobre a base da ligação simples para manter o padrão tanto do encaixe como do tamanho da ligação. O hidrogênio possui 2cm de diâmetro para manter a escala com os outros átomos do modelo.

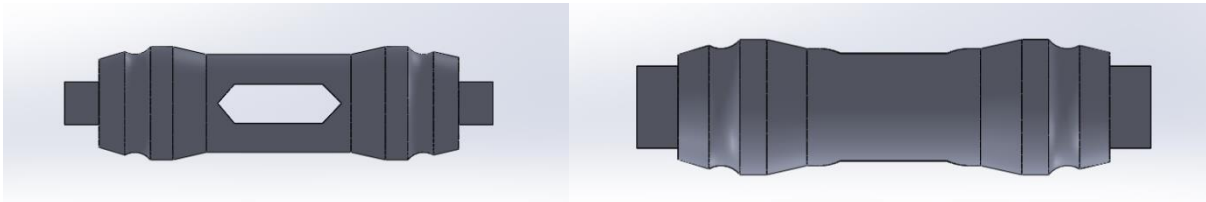
Figura 6 Modelo 3D para o átomo de hidrogênio com ligação simples



Fonte: Autor

A ligação dupla foi feita sobre a base da ligação simples mas ela necessita de detalhes que a diferencie da ligação simples e também a necessidade dela não oferecer rotação em torno de seu eixo. Para tal, foi feito um adicional no encaixe, como podemos ver na Figura 7 tanto o corte e o encaixe novo.

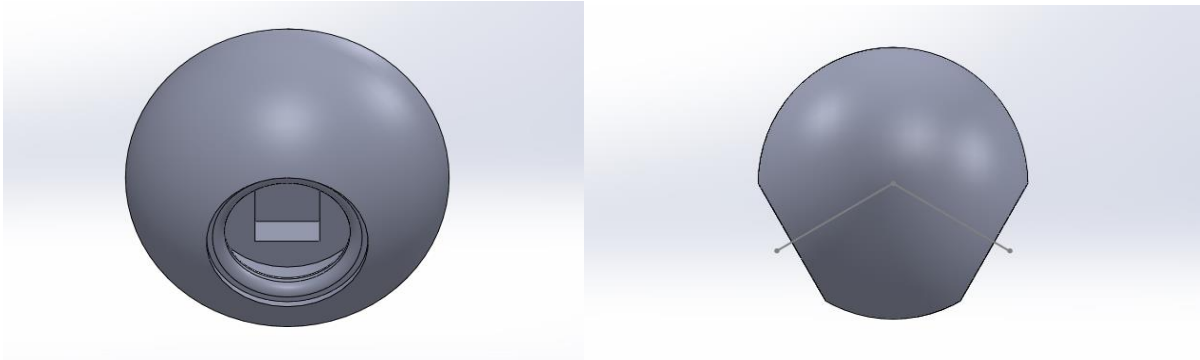
Figura 7 Modelo 3D para a ligação dupla



Fonte: Autor

O oxigênio foi o segundo átomo a ser feito e a outra parte do encaixe para ligar as peças, esse encaixe deveria permitir que houvesse a rotação da molécula, mas que mantenha a peça presa para poder manusear e além de aceitar as ligações tanto simples como do hidrogênio que são a mesma, mas também a dupla com seu encaixe extra como na Figura 8. O diâmetro um pouco maior do que o hidrogênio com a escala previamente definida e com duas opções de encaixe com uma geometria angular.

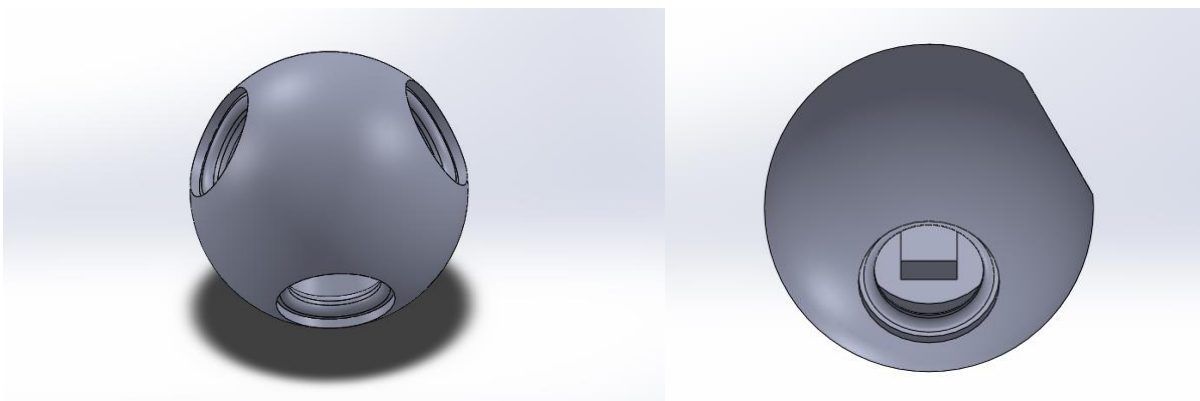
Figura 8 Modelo 3D para o oxigênio



Fonte: Autor

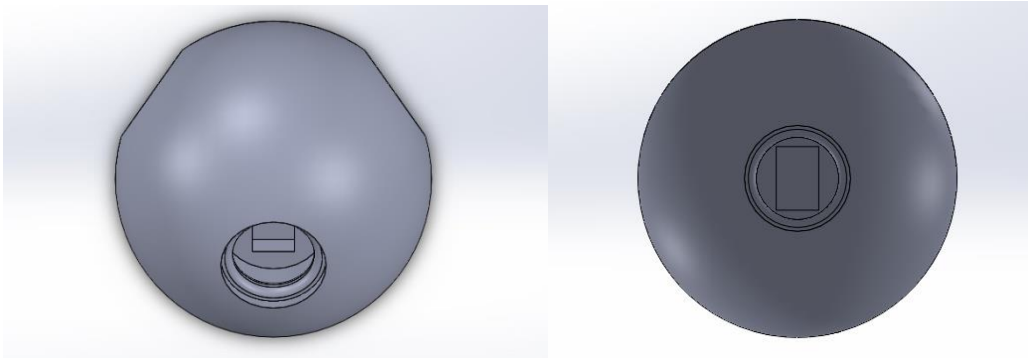
O nitrogênio utiliza o mesmo encaixe que o oxigênio suas principais diferenças foi o tamanho que é um pouco maior de acordo com a escala feita anteriormente e sua geometria angular. Somente um dos encaixes tem a opção de conexão com a ligação dupla, e os outros dois encaixes são para encaixes nas ligações simples. Na Figura 9 é apresentado o modelo do nitrogênio com seus três encaixes e com destaque para o que possui o extra da ligação dupla.

Figura 9 Modelo 3D para o nitrogênio

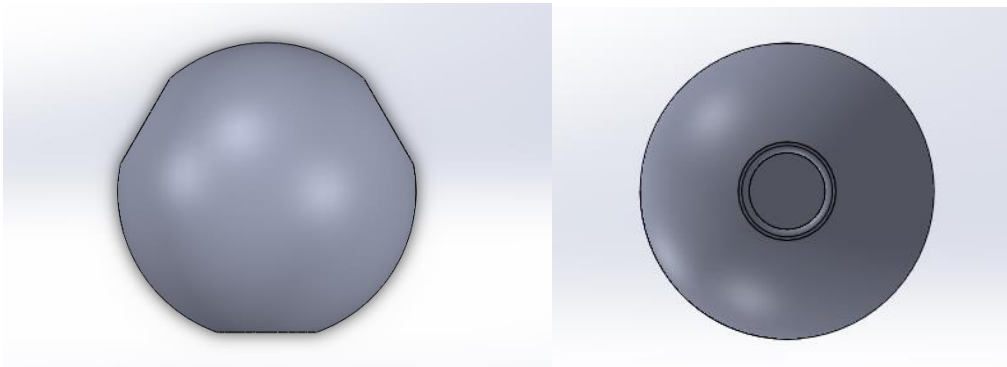


Fonte: Autor

O carbono primeiro foi feito com quatro encaixes como na Figura 10, novamente respeitando a escala e utilizando o mesmo padrão de encaixe das peças anteriores, mas ele possui os quatro encaixes com o extra da ligação dupla. A opção do carbono sp^2 também foi modelado para permitir ligações duplas, com três encaixes como na Figura 11 ele possui um encaixe com extra pra dupla e dois simples.

Figura 10 Modelo 3D para carbono sp^3 

Fonte: Autor

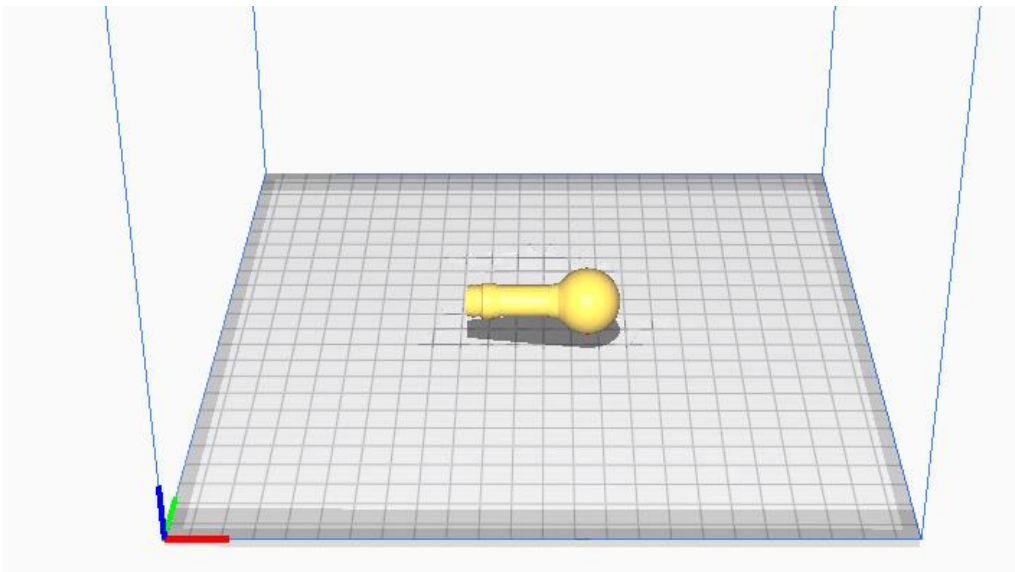
Figura 11 Modelo 3D para carbono sp^2 

Fonte: Autor

5.2 GERANDO O ARQUIVO STL

A peça que foi modelada no Solidworks ainda não está pronta para a impressora 3D, que necessita de um formato específico para poder imprimir. Mas o Solidworks permite criar o arquivo STL diretamente da peça que foi desenhada, que foi um dos recursos importantes para escolha desse software. Como na Figura 12 o arquivo do hidrogênio em STL que está aberto no software Ultimaker Cura (ULTIMAKER, 2020), que é um software de fatiamento que lê o arquivo STL e cria instruções para que a impressora possa criar o objeto camada por camada horizontais com base nas configurações que você escolher, convertendo em um GCODE. Cura é um software de código aberto sob a licença LGPLv3, pode ser utilizado para diversas impressoras e possui compatibilidade com muito software de modelagem 3D como Solidworks.

Figura 12 Hidrogênio no Ultimaker Cura



Fonte: Autor

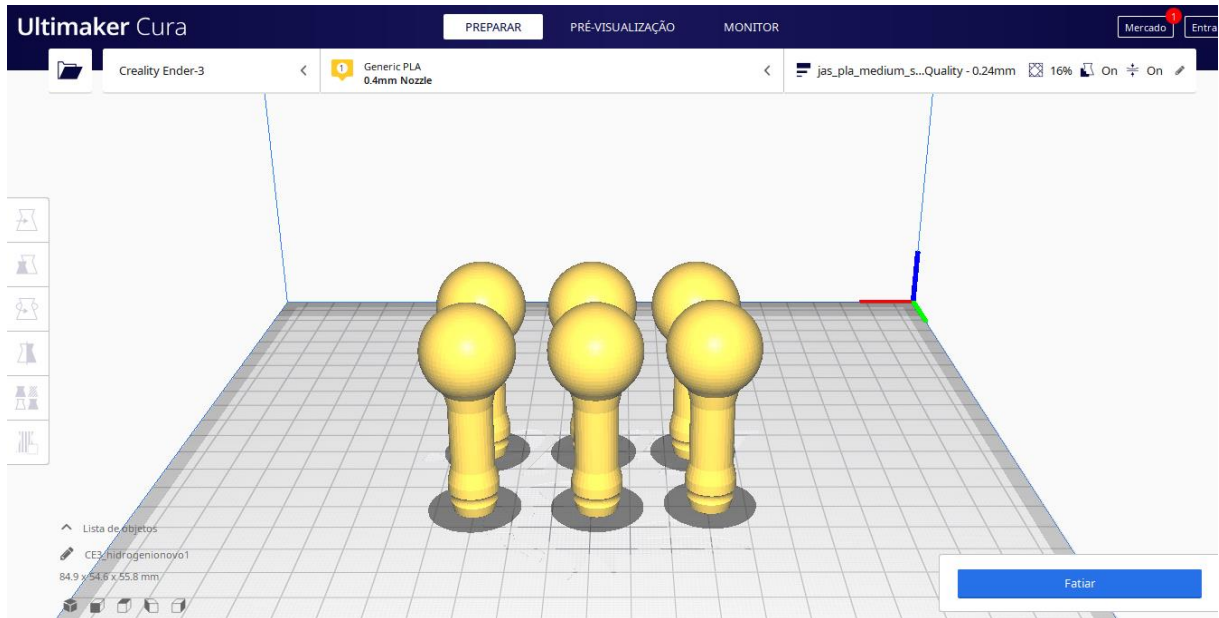
5.3 ARQUIVO GCODE PARA A IMPRESSORA 3D

Com os arquivos STL prontos temos que escolher um Software que leia o arquivo STL para o transformar em gcode que é o arquivo que as impressoras 3D podem ler. Mas o gcode é específico para cada impressora e material além de inúmeras configurações que podem ser feitas para impressão. Por isso os arquivos STL serão disponibilizados no presente trabalho.

Os arquivos em STL que são disponibilizados neste trabalho podem ser utilizados em qualquer software de fatiamento, o usuário necessita criar o arquivo gcode, esse processo necessita que o usuário configure suas preferências no software de fatiamento de sua escolha e posicione a peça da melhor maneira possível para gerar menos suportes (qualquer parte da peça com ângulo menor que 45° em relação a mesa de impressão irá necessitar de suporte para que o bico não imprima no ar) e com isso melhor qualidade para impressão.

O kit molecular foi testado no software de fatiamento Ultimaker Cura como podemos ver na Figura 13, configurado para impressora 3D Ender-e pro que foi utilizada para teste com filamento PLA .

Figura 13 Átomos de hidrogênio com ligação simples no Ultimaker cura



Fonte: Autor

O tempo de impressão depende da quantidade de peças que vai ser impressas por vez, como podemos ver na Tabela 1. A escala em 50% pode ser uma opção significativa para impressão rápida de peças, o tempo para imprimir um carbono em escala de 50% passa para 34 minutos. Mas em escala 200% tempo de impressão aumenta consideravelmente como de um carbono que passa para 9 horas 21 minutos.

Tabela 1 Tabela com tempo médio das peças com escala 100%.

Peça	Tempo de impressão 1 peça	Tempo de impressão 6 peças
Ligação simples	15 minutos	1 hora 37 minutos
Ligação dupla	22 minutos	2 horas 20 minutos
Hidrogênio	27 minutos	2 horas 50 minutos
Oxigênio	57 minutos	6 horas 22 minutos
Nitrogênio	1 hora 16 minutos	7 horas 48 minutos

Carbono	2 horas 10 minutos	13 horas 10 minutos
Carbono sp^2	1 hora 45 minutos	10 horas 37 minutos

5.4 RECURSOS DO MODELO

O modelo por ser modular e flexível permite vários recursos como a personalização de escala, como podemos ver na Figura 14 do cis-2-buteno, que o modelo em marrom foi feito em escala de 50% e o modelo em preto foi feito na escala de 100%.

Figura 14 Modelo molecular para o cis-2-buteno na escala de 50%(marrom) e 100%(preto)



Fonte: Autor

Figura 15 Peças para montagem de modelos moleculares: Hidrogênio, Ligação simples, Ligação dupla, Carbono, Carbono sp^2 , Nitrogênio, Oxigênio



Fonte: Autor

No total são sete peças modulares, apresentadas na Figura 15. Essas peças podem ser impressas independente uma da outra, mas em conjunto podem formar várias estruturas e demonstrar isomeria geométrica como do buteno na Figura 16.

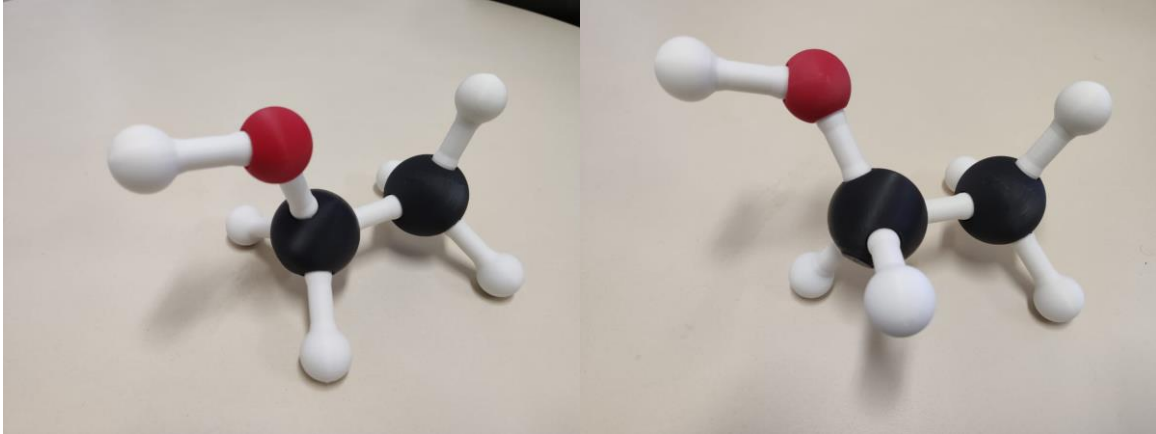
Figura 16 Modelos moleculares para o cis-2-buteno e trans-2-buteno



Fonte: Autor

A ligações simples permitem rotação, o que auxilia para demonstração de diferentes conformações como na Figura 17 do etanol.

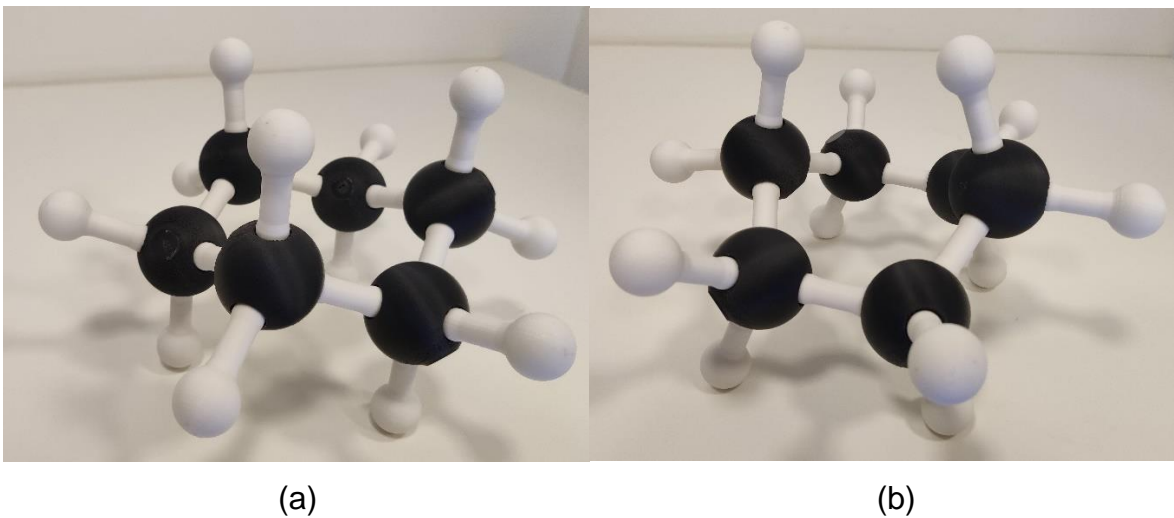
Figura 17 Modelos moleculares para o Etanol em duas conformações. Impressão feita em ABS com filamentos de diferentes cores



Fonte: Autor

O modelo permite demonstrar os diferentes confôrmeros do ciclo-hexano como o ciclo-hexano cadeira Figura 18(a) e o ciclo-hexano barco Figura 18 (b), o modelo não necessita ser desmontado para passar de uma conformação para ou outra, apenas alguns movimentos.

Figura 18 Modelos moleculares para o ciclo-hexano seus confôrmeros: a) Cadeira b) Barco. Impressão feita em ABS com filamentos de diferentes cores



Fonte: Autor

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os modelos produzidos neste trabalho permitiram a representação de várias estruturas moleculares, incluindo a possibilidade de representar estereoquímica nas estruturas e também diferentes conformações. O modelo possui um baixo custo de produção, uma vez que pouca quantidade de material utilizada por peça. O custo médio chega a ser um terço do custo de um modelo comercial por peça, e a possibilidade de ser mais baixo ainda conforme a tecnologia e a matéria prima vai ficando mais acessível.

O guia desenvolvido pode auxiliar na utilização dos arquivos gerados no trabalho e ajudar a melhorar a impressão 3D das peças.

Estando agora disponíveis os arquivos para serem utilizados em aulas de química e passa a ser mais uma ferramenta para auxílio na aprendizagem de conceitos que envolvem a geometria molecular.

REFERÊNCIAS

- ANDRADE, Neli Oliveira. **Modelos confeccionados em impressora 3D para o ensino de geometria molecular em Química**. Orientador Yuri Karaccas de Carvalho. Rio Branco, 2019. 62p. Dissertação – UFAC programa de Pós-graduação em ensino de Ciências e Matemática.
- BARBOSA E SILVA, R.; MERKLE, L. E. **Perspectivas educacionais FabLearn: conceitos e práticas maker no Brasil**. In: CONFERÊNCIA FABLEARN BRASIL, São Paulo, 2016. Disponível em: Acesso em 08 de novembro de 2020.
- CARVALHO, A. **Apropriação tecnológica, cultura digital e formação de professores nas licenciaturas a distância**. In: Revista da Associação Brasileira de Tecnologia. Ano 40, n. 195, 2011.
- DASSAULT SYSTÈMES S.A, **Solidworks**. 2020 Disponível em: <https://www.solidworks.com>. Acesso em: 10 agosto 2020.
- FAZELPOUR, Elham; FENNELL, Cristopher J. **Interactive Molecular Model Assembly with 3D Printing** Disponível em: <https://www.jove.com/pdf/61487/jove-protocol-61487-interactive-molecular-model-assembly-with-3d-printing> : acesso em : 01 de novembro de 2020.
- FOUNDATION, FabLab. **Homepage**: Disponível em: <https://fabfoundation.org/> : acesso em : 09 de novembro de 2020.
- GILBERT, J. K. **Models and Modelling: routes to more authentic science education**. Internacional Journal of Science and Mathematics Education, Netherlands, v. 2, 2004.
- KODAMA, H. **Automatic method for fabricating a three dimensional plastic model with photohardening polymer**. Review of Scientific Instruments, v. 52, n. 11, p. 1770-1773, 1981.

ISLAS, S. M.; Pesa, M. A. **Futuros docentes y futuros investigadores se expresan sobre el modelado em física**. Revista Brasileira de Ensino de Física, São Paulo, v.23, n.3, p. 319-328,2001.

LIMA, A. A. **O uso de modelos no ensino de química: Uma investigação acerca dos saberes construídos durante a formação inicial de professores de Química da UFRN**. Biblioteca Setorial do CCSA/UFRN. 250 f. Natal, 2007.

LIMA A.A.; NÚÑEZ, I. B. **As analogia no ensino de química: uma investigação dos saberes na formação inicial dos professores**. In: ENCONTRO NACIONAL DE DIDÁTICA E PRÁTICA DE ENSINO, 12. 2004. Curitiba: PUC, 2004.

MANDAVILLI, Apoorva. **Appropriate technology: Make anything, anywhere**. *Nature*, v. 442, n. 7105, p. 862-864, 2006.

Moreira R. M. D. **Conceção de um sistema de medição sem contacto da temperatura do polímero à saída do bico de uma impressora 3D FDM**. Dissertação de mestrado. U. PORTO p. 10, 2016.

PENNY, M R.; CAO, Z. J.; PATEL B.; SANTOS B. S.; ASQUITH C. R. M.; SZULC B. R.; RAO Z. X.; MUEAFFAK Z.; Malkinson J. P.; HILTON T. **3D Printing of a Scalable Molecular Model and Orbital Kit for Organic Chemistry Teaching and Learning**. *Journal of Chemical Education*, p 16, 2017.

PIETROCOLA, M. **Construção e realidade: o realismo científico de Mário Bunge e o ensino de ciências através de modelos**. *Investigações em Ensino de Ciências* – V4(3), pp. 213-227, 1999.

Sá, Bruno Carmo; Faria, Alexandre Geraldo Viana ;Maruyama, Gustavo Yoshio; Bergamo, Joselia Aparecida; Vianna, Paula. **Impressão em 3D do modelo didático para a representação de estruturas que contemplam as diferentes hibridações**. IN: XVIII Encontro Nacional de Ensino de Química (XVIII ENEQ) Florianópolis, SC, Brasil – 25 a 28 de julho de 2016.

SILVEIRA, F. **Design & Educação: novas abordagens**. In: MEGIDO, V. F. (Org.). A Revolução do Design : conexões para o século XXI. São Paulo: Editora Gente, 2016. p. 116-131.

ULTIMAKER BV. **Ultimaker cura 4.3**. Disponível em: <https://ultimaker.com/> acesso em 15 agosto 2020.

APÊNDICE A – GUIA DE IMPRESSÃO DO KIT MOLECULAR

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PAMPA

RODRIGO MONTEIRO GUSMÃO

GUIA DE IMPRESSÃO 3D DE PEÇAS PARA MODELOS MOLECULARES

**Bagé
2020**

1 INTRODUÇÃO

Este produto educacional foi produzido no trabalho denominado PROJETO E CONSTRUÇÃO DE MODELOS MOLECULARES FLEXÍVEIS E MODULARES PARA IMPRESSÃO 3D que foi desenvolvido como trabalho de conclusão do curso de Licenciatura em Química da Unipampa Campus Bagé.

O trabalho gerador desse produto educacional foi desenvolvido para auxiliar os professores e alunos a fabricar um kit molecular em impressora 3D, que pode ser personalizável tanto em quantidades como em tamanho das peças. Fornecendo arquivos STL de objetos 3D testados e que facilmente podem ser impressos em qualquer impressora 3D.

2 GUIA DE IMPRESSÃO 3D

Os arquivos disponibilizados neste guia são STL, e para a impressão será necessário um software de fatiamento de sua preferência, como por exemplo Simplify3D, Slic3r e Ultimaker Cura que são alguns dos mais conhecidos. Independente do software escolhido, o procedimento será praticamente o mesmo.

O kit molecular é composto de 7 peças que podem ser impressas independente uma da outra e podem ser impressas quantas forem necessárias.

O tempo de impressão depende da quantidade de peças que vai ser impressas por vez, como podemos ver na Tabela 1. Outro fator importante é a escala. Em 50% pode ser uma opção significativa para impressão rápida de peças, o tempo para imprimir um carbono em escala de 50% passa para 34 minutos. Mas em escala 200% tempo de impressão aumenta consideravelmente como de um carbono que passa para 9 horas 21 minutos.

Tabela 1 Tabela com tempo médio das peças com escala 100%.

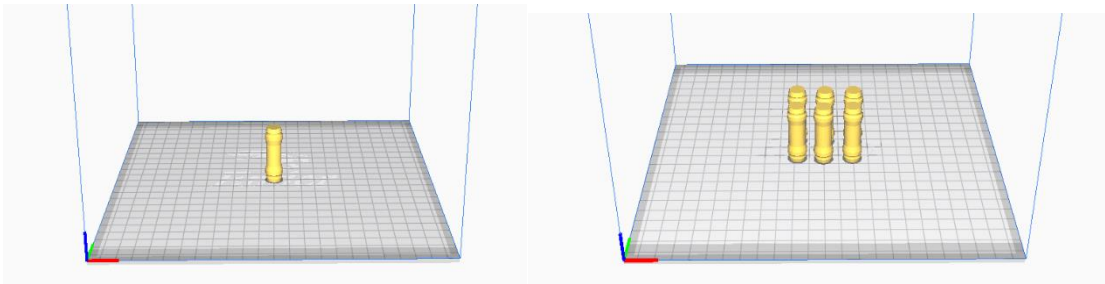
Peça	Tempo de impressão 1 peça	Tempo de impressão 6 peças
Ligação simples	15 minutos	1 hora 37 minutos
Ligação dupla	22 minutos	2 horas 20 minutos
Hidrogênio	27 minutos	2 horas 50 minutos

Oxigênio	57 minutos	6 horas 22 minutos
Nitrogênio	1 hora 16 minutos	7 horas 48 minutos
Carbono	2 horas 10 minutos	13 horas 10 minutos
Carbono sp2	1 hora 45 minutos	10 horas 37 minutos

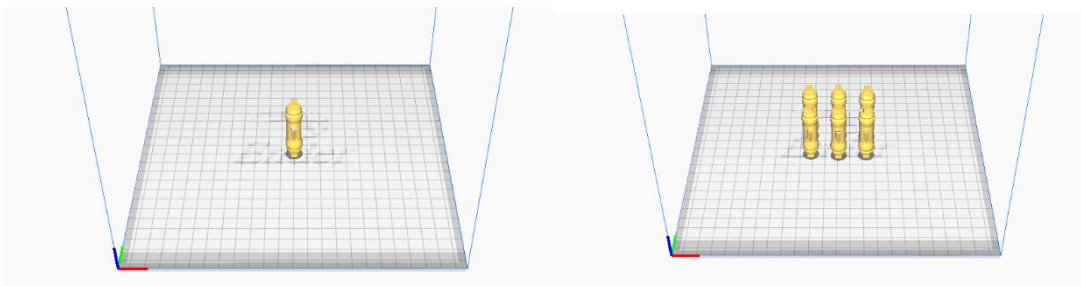
Abaixo segue uma sugestão para a orientação da impressão e também da quantidade de peças por vez, lembrando que quanto mais peças forem impressas por vez, maior o deslocamento e retração feito pela impressora, e com isso podem ficar fios de plástico entre as peças. Neste caso existe a possibilidade maior de acontecer erro, perdendo-se mais material. Não é aconselhável fazer impressão de escalas maiores de 100% com várias peças mesmo tempo.

Os links para download dos arquivos STL estão em cada uma das peças abaixo ou na tabela no fim do arquivo.

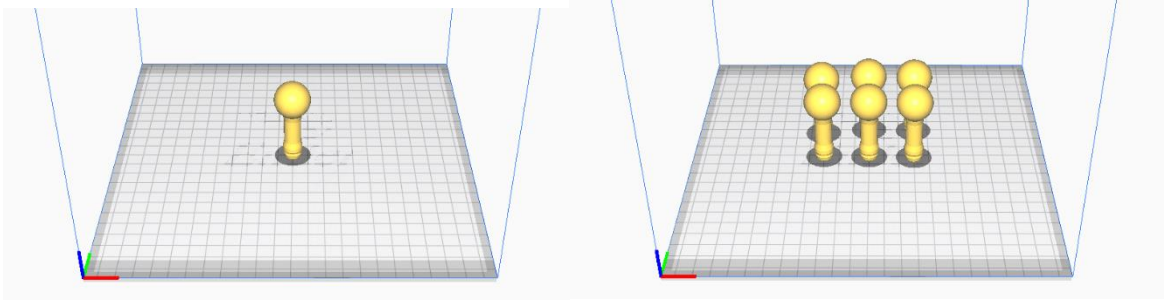
Peça 1 Ligação simples: [Ligacaosimples.STL](#)



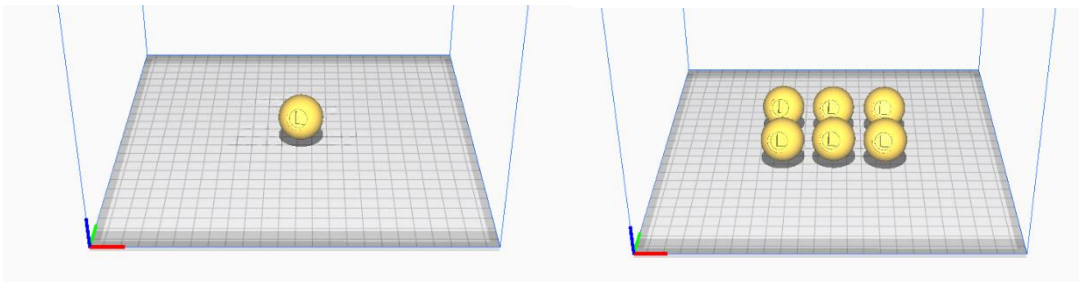
Peça 2 ligações Dupla: [Ligacaodupla.STL](#)



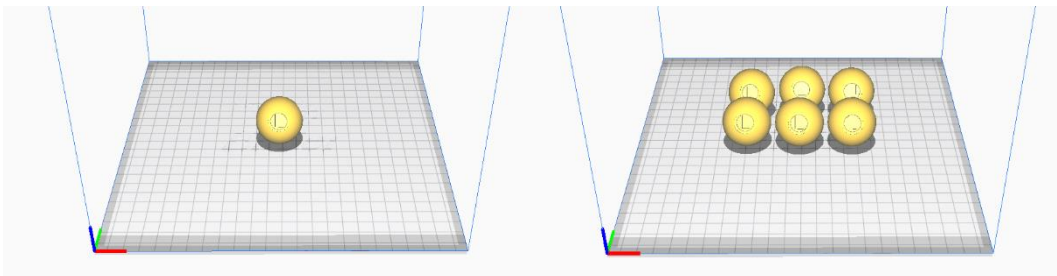
Peça 3 Hidrogênio: [Hidrogenio.STL](#)



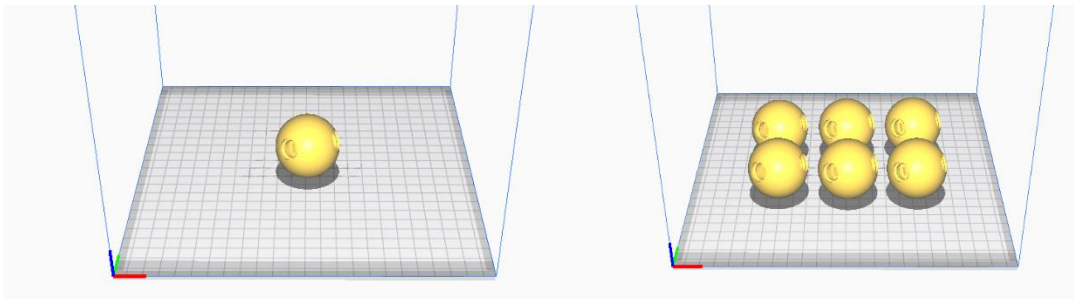
Peça 4 Oxigênio: [Oxigênio.STL](#)



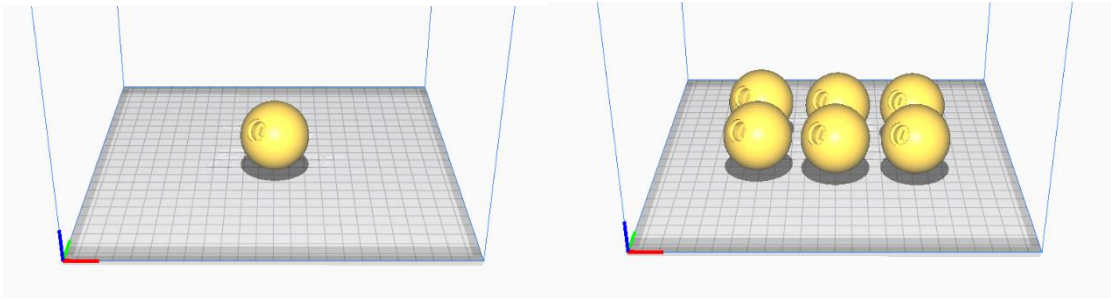
Peça 5 Nitrogênio: [Nitrogênio.STL](#)



Peça 6 Carbono: [Carbono.STL](#)



Peça 7 Carbono sp2: [Carbonosp2.STL](#)



3 ACABAMENTO DAS PEÇAS

As partes das peças com angulação menor que 45° em relação a mesa necessitam de suporte, e esse suporte tem q ser limpo (retirado), mas ele deixa marcas na peça ou até mesmo rebarbas que tem que ser limpas. Para limpar pode ser utilizado lixas de diferentes gramaturas até chegar no resultado esperado. Para peças feitas em ABS pode-se usar uma técnica de acabamento na peça com acetona, mas que exige cuidado pois há o risco de danificar a peça.

E possível imprimir cada peça com um filamento de cor diferente (tanto o PLA quanto o ABS possuem uma vasta gama de cores) e diferenciar as peças, mas se possuir apenas um único filamento e possível pintar as peças com tinta acrílica para artesanato. As cores podem ser escolhidas por sua preferência seguir algum padrão já utilizado.

Tabela com Arquivos STL

Nome Peça	Link Arquivo STL
Ligação simples	Ligacaosimples.STL
Ligação dupla	Ligacaodupla.STL
Hidrogênio	Hidrogenio.STL
Oxigênio	Oxigênio.STL
Nitrogênio	Nitrogênio.STL
Carbono	Carbono.STL
Carbono sp2	Carbonosp2.STL