

# Construção de modelo molecular a partir da reutilização de garrafas PET: propostas para o ensino de química

**Paulo H. Fabri, Laís S. Oliveira, Lara S. Ribeiro, Larissa C. Crespo, Aline E Siqueira e Rosana Giacomini**

Descreve-se neste artigo um procedimento passo a passo para a construção de um modelo molecular de tamanho grande a partir da reutilização de garrafas PET de refrigerantes. Esse modelo molecular possui medidas adequadas para apresentações em turmas médias e grandes e tem demonstrado excelente estabilidade manipulativa e também ser uma ferramenta eficiente para atrair a atenção dos alunos. O modelo mostrou versatilidade e pode ser usado para trabalhar um grande número de tópicos, como análise conformacional, vários tipos de isomeria, geometria molecular, grupos funcionais, conceitos de ressonância (teoria da ligação de valência) e teoria orbital molecular.

► análise conformacional, estereoquímica, estrutura molecular ◀

Recebido em 14/05/2022, aceito em 03/09/2022

Os modelos moleculares são ferramentas úteis como auxílio e guia para ajudar os alunos no processo de aprendizagem. Eles contribuem na visualização de alguns conceitos de difícil compreensão. Existem diferentes tipos de modelos moleculares, os quais são projetados com o foco direcionado para um determinado conceito que se deseja estudar (Francoeur, 1997; Charbonneau, 2013). Por exemplo, se o principal interesse é mostrar os raios de Van der Waals, seriam necessários modelos de preenchimento de espaço. Para abordar problemas de geometria molecular ou de conformação, recomenda-se a utilização de modelos de bola e bastão. Por outro lado, modelos de estrutura de arame mais rigorosos podem ser usados para enfatizar distâncias e ângulos de ligação. Existem modelos alternativos com abordagem mista, mostrando, por exemplo, a estrutura atômica e também incluindo a visualização de ligações  $\pi$ . No caso específico de ligações múltiplas, elas não são necessariamente representadas nos modelos moleculares usuais, mas podem ser inferidas a partir da geometria de cada átomo envolvido na ligação. Para uma representação mais didática das ligações  $\pi$ , alguns modelos usam conectores

diferentes para átomos com geometria híbrida  $sp^2$  ou  $sp$ , e outros usam ligações dobradas (“banana-bonds”) para átomos híbridos  $sp^3$ .

A visualização da estrutura espacial e a compreensão completa do porquê as formas dessas moléculas são afetadas

por arranjos eletrônicos geralmente são difíceis para os estudantes de química (Dori e Barak, 2001). Modelos moleculares de tamanho grande podem mostrar resultados ainda melhores em relação à percepção de um aluno trabalhando no modo operacional concreto de pensar (Battino, 1983). O uso de

modelos moleculares tangíveis e animações computadorizadas ajuda a facilitar essa compreensão e os alunos geralmente acham mais fácil transformar representações 2D em 3D e vice-versa. A utilização de uma dessas ferramentas não descarta ou substitui a outra. Em vez disso, o uso de ambas simultaneamente tem um efeito sinérgico e melhora significativamente a percepção do modelo e o entendimento da estrutura espacial das moléculas orgânicas (Dori e Barak, 2001; Abraham *et al.*, 2010; Al-Balushi e Al-Hajri, 2014).

Vários materiais podem ser usados para construir modelos moleculares tridimensionais. Para citar apenas alguns deles,

**A visualização da estrutura espacial e a compreensão completa do porquê as formas dessas moléculas são afetadas por arranjos eletrônicos geralmente são difíceis para os estudantes de química (Dori e Barak, 2001).**



destacam-se aqueles construídos com fios (Hernandez *et al.*, 1996), papel (He *et al.*, 1990), impressoras 3D (Scalfani e Vaid, 2014), tampas de garrafas (Siodłak, 2013), bolas de isopor (Birk e Foster, 1989), canudos (Mak *et al.*, 1997) e balões (Williams, 2005). Neste artigo, descreve-se a montagem de um *kit* de modelo molecular a partir de garrafas PET e dois exemplos explorando seu uso. Embora esse modelo tenha sido descrito anteriormente em outros trabalhos (Mateus e Moreira, 2007; Passoni *et al.*, 2012), aqui descreve-se um guia detalhado para sua construção, incluindo carbonos hibridizados  $sp^2$  e outras modificações que não são observadas nos trabalhos anteriores. O uso de materiais recicláveis para construir ferramentas didáticas não é apenas barato, mas também uma prática ecológica. O compromisso com o meio ambiente é destacado pelo uso de garrafas PET em alguns procedimentos experimentais, como a síntese de MOF e a despolimerização de PET (Kaufman *et al.*, 1999; Roy *et al.*, 2013).

### Descrição da construção e montagem

O bloco de construção para todos os átomos é o topo de uma garrafa PET de dois litros de refrigerante. A melhor opção são as incolores e hemisféricas de formato arredondado. Garrafas pontiagudas ou de tamanhos menores ou maiores que as de dois litros não são ideais para a confecção dos modelos, pois não se consegue um encaixe adequado entre elas para a construção dos módulos. Os materiais e as quantidades necessárias para a montagem de um *kit* completo

são: tesoura, estilete, régua, tinta a óleo nas cores preta, azul e vermelha, pincel para pintura, furadeira com broca número 5, 63 rebites, alicate rebitor manual, 57 garrafas PET, 4 tampas vermelhas, 1 tampa azul, 14 tampas brancas, 12 tampas pretas e 6 condutores elétricos flexíveis de PVC (conduítes) de 15 centímetros cada.

Corte as garrafas a cerca de 10 centímetros do topo com um estilete e uma tesoura (Figuras 1a e 1b). São necessárias quatro garrafas para construir um módulo representando um átomo tetraédrico e três para construir um módulo representando um átomo planar trigonal. Pinte a parte interna das peças das garrafas cortadas com tinta a óleo (Figuras 1c, 1d e 1e) usando a convenção de cores CPK: preto para carbono, vermelho para oxigênio, azul para nitrogênio e branco para hidrogênio (Figura 1f) (Corey e Pauling, 1953). Deixe secar e verifique se há áreas que não estejam completamente cobertas pela tinta. Aplique uma segunda camada, se necessário. Monte um átomo tetraédrico juntando quatro peças, colocando-as uma dentro da outra de forma que haja espaços idênticos entre os bicos (Figuras 1g, 1h, 1i e 1j). Use uma furadeira elétrica para perfurar o meio de cada uma das três partes superpostas e insira um rebite para configurar a estrutura (Figuras 1g, 1h e 1i). Quatro rebites são usados para construir um átomo tetraédrico (Figura 1j) e três para um átomo planar trigonal (Figura 1k). As tampas brancas são usadas para representar átomos de hidrogênio e as coloridas para caracterizar elétrons não ligantes. As tampas também são usadas para denotar ligações simples entre dois átomos. Coloque duas tampas de cabeça para baixo, fure-as ao meio

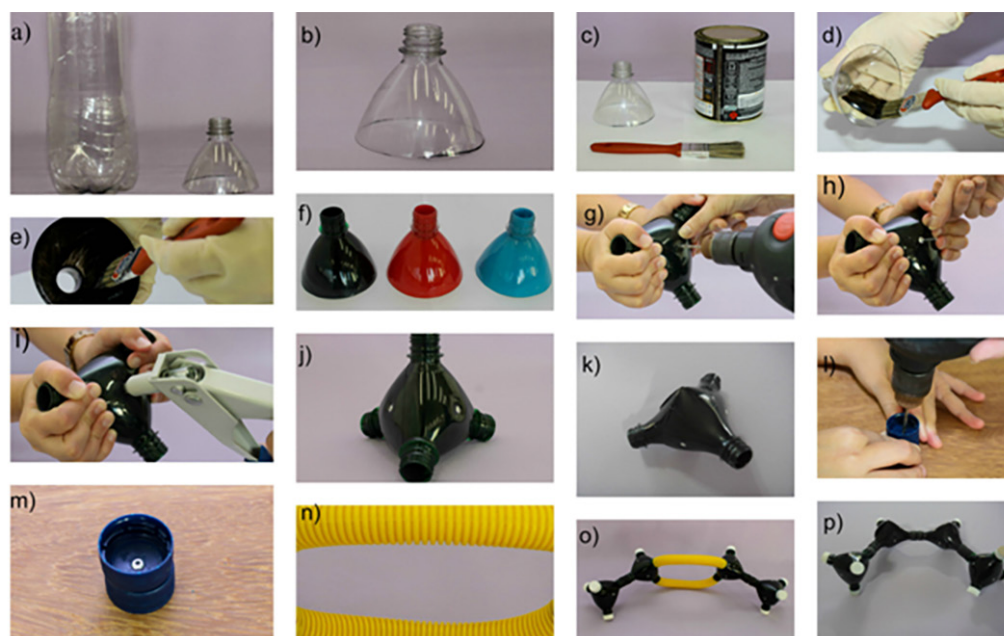


Figura 1: Etapas para a construção de modelos moleculares feitos de uma garrafa PET: (a) corte 10 cm do topo da garrafa; (b) a parte da garrafa usada para construir os átomos; (c) materiais de pintura; (d) / (e) pintar o interior da garrafa; (f) garrafas pintadas e secas usando a convenção de cores CPK; (g) perfurar um lado do tetraedro com a broca; (h) / (i) adição do rebite no furo; (j) átomo tetraédrico pronto; (k) átomo planar trigonal pronto; (l) perfurar as tampas; (m) ligação simples pronta montada a partir das tampas unidas; (n) um par de condutores elétricos flexíveis de PVC; (o) (cis) 2-buteno mostrando a representação de ligações simples em C – C e C – H usando as tampas, bem como para ligações duplas em C = C usando os conduítes; (p) representação do (cis) 2-buteno usando átomos com hibridações  $sp^3$  e  $sp^2$ . Nesse caso, as ligações  $\pi$  podem ser inferidas diretamente a partir da geometria e hibridação de cada átomo de carbono envolvido na ligação.

com furadeira elétrica e junte-as com um rebite (Figuras 1l e 1m). Do ponto de vista de conveniência e didática, as ligações duplas podem ser representadas por condutores elétricos flexíveis de PVC (Figura 1n). Assim, uma ligação dupla pode ser representada por duas peças com cerca de 15 centímetros de conduíte (Figura 1o). Caso contrário, as ligações poderiam ser inferidas diretamente da geometria de cada átomo de carbono envolvido na ligação (Figura 1p).

Recomenda-se, para desenvolver atividades gerais, um *kit* contendo no mínimo: seis átomos de carbono  $sp^3$ , seis átomos de carbono  $sp^2$ , dois átomos de oxigênio  $sp^3$ , um átomo de oxigênio  $sp^2$ , um átomo de nitrogênio  $sp^3$ , quatro tampas vermelhas, uma tampa azul, quatorze tampas brancas, seis conectores pretos para conexões simples e três pares de conduítes para representar ligações duplas. A principal vantagem desses modelos em relação aos comerciais é a possibilidade de construção de diversos kits com baixo custo, pois são feitos de materiais reutilizados e de fácil obtenção. Além disso, o uso desses modelos permite uma excelente interação e visualização pelos alunos, por serem leves, de tamanho relativamente grande e apresentarem módulos com grande estabilidade.

Os modelos se aplicam em todos os níveis de ensino e podem ser construídos pelos próprios alunos na forma de projetos. Como sugestão, pode-se reservar de uma a duas semanas para a coleta das garrafas e dos materiais necessários, uma semana para o corte e pintura das garrafas e uma semana para a perfuração e rebitação dos módulos, totalizando de três a quatro semanas de projeto. Segundo Hageman (2010), o fato de os alunos construírem seus próprios modelos moleculares e manipulá-los pode contribuir de forma significativa na compreensão de conceitos químicos e bioquímicos, pois aumenta o envolvimento e o interesse do aluno pelas atividades realizadas, além de desenvolver a criatividade e habilidades manuais, resultando em melhor aprendizado.

Como todo modelo, este também apresenta limitações. No caso, podemos exemplificar a de não expressar proporcionalmente o tamanho das ligações simples e duplas, uma vez que as ligações duplas são menores que as simples. Conforme pode ser visto na Figura 1o, a ligação dupla representada pelos conduítes é maior que a ligação simples representada pelas tampas. Esse fato se deu em função de, ao conectar os módulos por meio das tampas para fazer as ligações simples, permite-se ao aluno girá-lo tal qual ocorre nos átomos unidos por essas ligações. No entanto, ao realizar a ligação dupla por meio de tampas, por exemplo, em um módulo de carbono  $sp^2$  (Figura 1k), a ligação fica representada da mesma forma que uma ligação simples, não permitindo ao aluno diferenciá-las. Além disso, dessa maneira os módulos giram em torno da ligação dupla, o que poderia induzir o aluno a uma concepção errônea sobre a rigidez desse tipo de ligação. A fim de contornar essa limitação, optou-se por utilizar os conduítes, pois dessa forma não é possível girar os módulos em torno do eixo das ligações duplas. Somado a isso, o uso dos conduítes em tamanhos maiores proporciona

mais firmeza na montagem da estrutura molecular, o que não se aplica ao usar conduítes de tamanhos menores, os quais se desmontavam ao serem manuseados. Outra vantagem a ser destacada com o uso dos conduítes é a possibilidade de montar estruturas muito rígidas como, por exemplo, o ciclopropeno.

Obviamente, há muitos assuntos que poderiam ser abordados usando esse modelo nas aulas de química. Dois exemplos de conteúdo são apresentados abaixo para ilustrar e comparar o uso desse modelo molecular com outros comerciais. Muitos outros tópicos podem ser trabalhados com a ajuda de um modelo desse tipo. Cabe aos educadores usar a criatividade para desenvolver novas possibilidades de trabalho na sala de aula.

### Exemplo de conteúdo: Análise Conformacional

A análise conformacional pode ser examinada considerando os alcanos simples. A rotação sobre ligações simples C – C pode ser facilmente realizada por esse modelo molecular. Comparações entre conformações eclipsadas e escalonadas de etano (Figura 2a), ou conformações de cadeira e barco (Figuras 2b e 2c) de ciclo-hexano, foram bem compreendidas pelos alunos. A substituição de dois hidrogênios em etano por dois grupos metil para gerar n-butano (Figura 2d), que agora permite várias disposições distintas entre esses grupos maiores (antiperiplanar, anticlinal, sinclinal e sinperiplanar de acordo com a nomenclatura de Klyne-Prelog), também foi amplamente compreendida por eles. As Figuras 2e a 2h mostram essas disposições grupais e os alunos foram capazes de rastrear a rotação em torno da ligação C2 – C3 de butano, fazendo facilmente uma correlação precisa entre conformação, ângulos diédricos e suas nomenclaturas. Vale ressaltar que a maioria das questões conformacionais explicadas usando a projeção de Newman foi prontamente seguida pelos estudantes que usavam esse modelo molecular. Eles também mostraram uma clara percepção das posições equatorial e axial na conformação cadeira do ciclohexano (Figura 2c) e o impedimento estérico causado pelas interações 1,3-diaxiais.

### Exemplo de conteúdo: Isomeria e Estereoquímica

Conceitos de isomeria, geometria molecular, grupos funcionais, quiralidade e configuração absoluta são abordados diretamente usando este modelo molecular. O conceito de isomeria cis e trans pode ser introduzido usando exemplos mostrados nas Figuras 3a e 3b, nos quais os alunos podem interagir com estruturas montadas (por exemplo, girar, traduzir, etc.) e ver por si mesmos que a ligação dupla C = C não é capaz de girar. Os alunos também alcançaram total compreensão usando esse modelo em tópicos como isomeria estrutural e estereoquímica de compostos orgânicos. A isomeria em cadeia (Figuras 3c e 3d), bem como a tautomeria posicional, funcional, foram claramente percebidas pelos alunos nas aulas. Exemplos trabalhados de vários grupos funcionais são exibidos nas Figuras 3e a 3l e o uso desse modelo



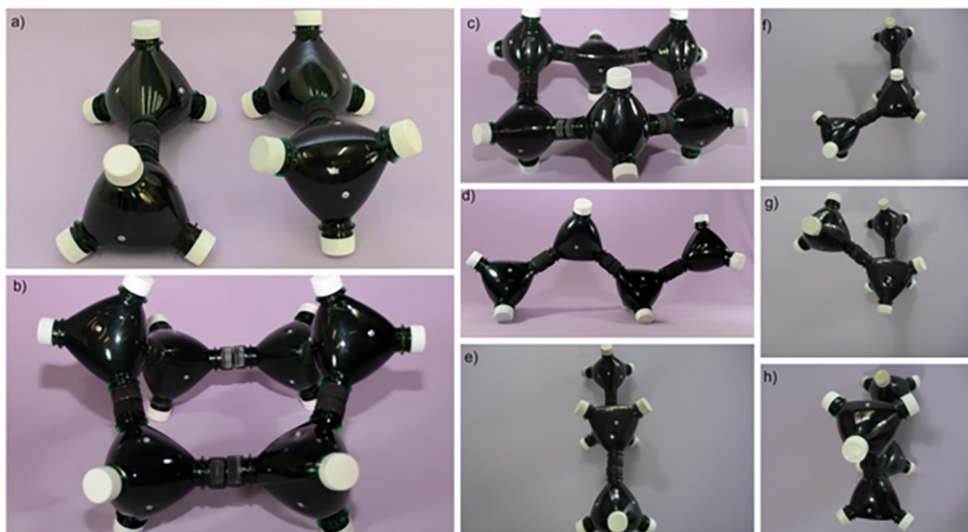


Figura 2: Exemplos de modelo molecular de PET cobrindo análise conformacional: (a) conformações eclipsadas e escalonadas de etano; (b) conformação por barco de ciclohexano; (c) conformação da cadeira de ciclohexano; (d) n-butano e suas diferentes conformações observadas através da ligação C2 – C3; (e) antiperiplanar; (f) anticlinal; (g) sinclinal; (h) sinperiplanar.

molecular torna a compreensão desse tópico mais interessante e acessível aos alunos. Eles foram capazes de identificar grupos funcionais e nomear compostos (Figuras 3e a 3l), reconhecer vários tipos de isomeria e inferir propriedades moleculares, como polaridade e capacidade de ligação de

hidrogênio, manipulando as estruturas. Da mesma forma, as atribuições de quiralidade para moléculas orgânicas foram facilitadas pelo uso do modelo molecular quando ambos os enantiômeros foram mostrados e vistos ao longo de uma ligação específica no centro estereogênico (Figura 3m). Os

4

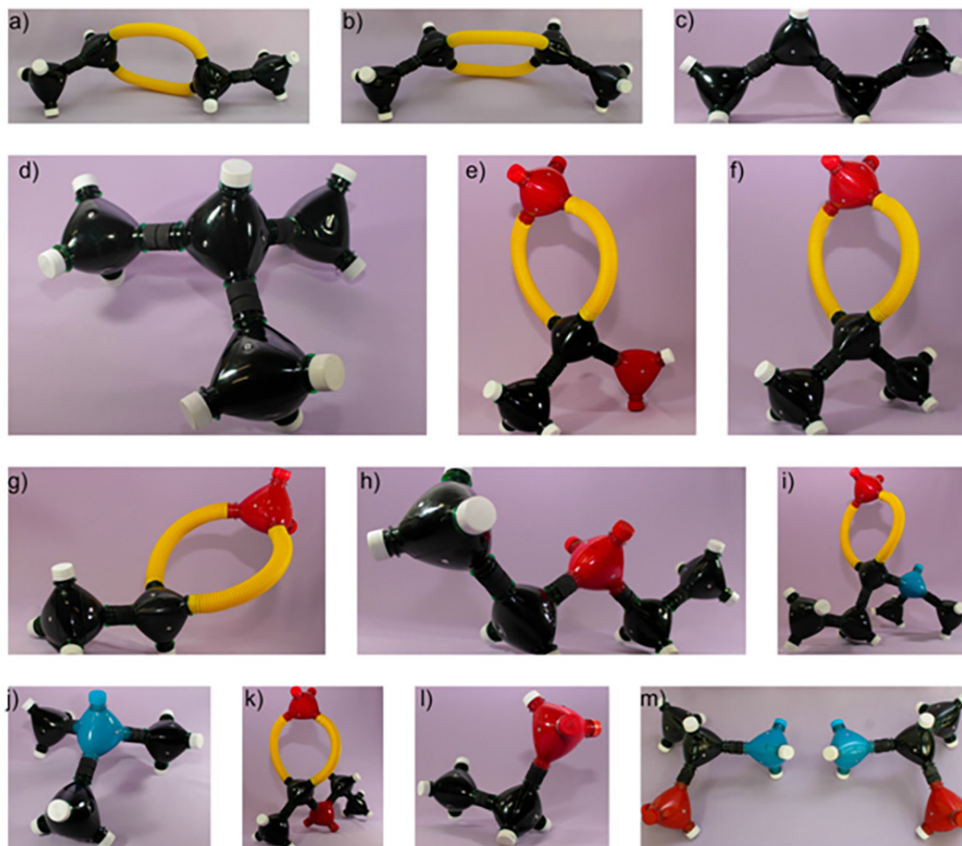


Figura 3: Exemplos de modelo molecular de PET cobrindo grupos orgânicos funcionais, isomeria e estereoquímica. Isomeria geométrica exibida por (a) (trans) 2-buteno e (b) (cis) 2-buteno. Isomeria de cadeia exibida por (c) butano e (d) 2-metilpropano. Exemplos trabalhados de grupos funcionais / compostos orgânicos considerados nas classes: (e) ácidoacético; (f) 2-propanona; (g) acetaldeído; (h) éterdietílico; (i) N, N-dimetilpropanamida; (j) trimetilamina; (k) acetato de etila e (l) etanol. Isomeria conformacional apresentada pelos (m) isômeros R e S do 1-aminoetanol.

alunos foram capazes de identificar a prioridade de cada substituinte no formalismo de Cahn-Ingold-Prelog (CIP) e usá-lo para nomear os compostos corretamente. Mais uma vez, eles manipularam as estruturas e compreenderam o conceito de enantiômeros R e S, assim como a impossibilidade de interconversão e sobreposição desses enantiômeros.

Outros tópicos comuns podem ser facilmente abordados por esse modelo molecular, permitindo também o uso nas aulas de química geral. A geometria de moléculas ou íons simples, como nitrônio (Figura 4a), nitrito (Figura 4b) ou tetrametilamônio (Figura 4c), pode ser avaliada por essa ferramenta e usada para explicar arranjos lineares, curvados ou piramidais. As formas canônicas do ânion nitrito podem ser facilmente interconvertidas, abordando o conceito de ressonância (Figuras 4b e 4d). O professor também pode enfatizar que átomos de nitrogênio e oxigênio transportam pares solitários de elétrons. Assim, o íon nitrito é uma base de Lewis e é um nucleófilo ambidentado em relação a um eletrófilo, doando um par de elétrons de átomos de nitrogênio ou oxigênio. Se o professor pretende abordar o conceito de orbitais moleculares, o mesmo ânion nitrito poderá ser montado usando um átomo de nitrogênio  $sp^2$  e dois átomos de oxigênio  $sp^2$ . Nesse caso, as ligações  $\pi$  devem ser inferidas diretamente da geometria de cada átomo envolvido no arranjo, como já visto nos casos (trans) e (cis) de 2-buteno.

## Conclusão

Foi descrita a construção passo a passo de um modelo molecular a partir de garrafas PET de refrigerante. Seu

tamanho grande permite que seja facilmente visualizado por turmas numerosas e provou ser uma ferramenta eficiente para atrair a atenção dos alunos e facilitar a compreensão de conceitos abstratos na química. Na prática, esses modelos mostraram versatilidade e podem ser usados para trabalhar um número de tópicos bem diversificados. Uma vez montados, os modelos mostraram excelente estabilidade ao ser manipulado pelos alunos. O uso desses modelos portáteis nas aulas de química enfatiza os conceitos 3D para os alunos e facilita o vínculo entre as representações 2D e 3D. A representação de ligação dupla pode ser feita por duas estratégias diferentes, dependendo da escolha do professor: (i) uma representação didática usando conduítes elétricos flexíveis como conectores (“representação de ligação dobrada”); ou (ii) inferido a partir da geometria e hibridação dos átomos conectados. Finalmente, o uso de materiais recicláveis para construir ferramentas didáticas não é apenas de fácil acesso, mas também uma prática ecológica que deve ser amplamente recomendada.

## Notas

Os autores declaram não ter interesse financeiro concorrente.

## Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES), do PPGCN da Universidade Estadual do Norte Fluminense – Darcy Ribeiro e da FAPERJ.

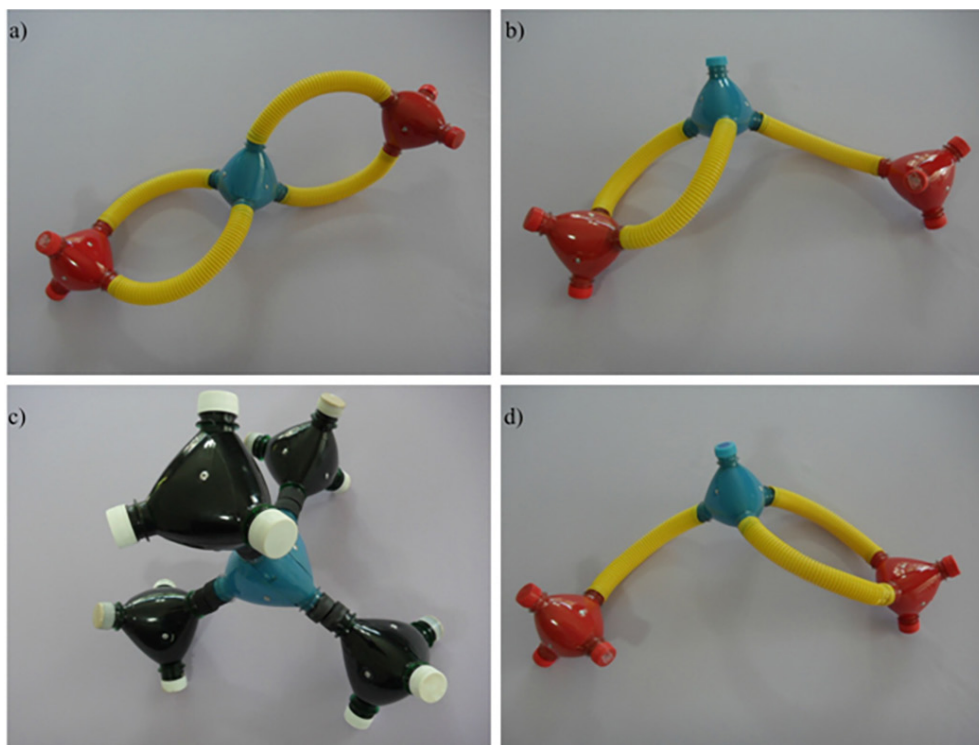


Figura 4: Exemplos de modelo molecular de PET cobrindo a geometria molecular e o conceito de ressonância: (a) íon nitrônio; (b) íon nitrito; (c) íon tetrametilamônio; e (d) a outra forma canônica de íon nitrito.

Os autores são devedores de Jason G. Taylor pela discussão perspicaz e pela revisão do manuscrito.

**Paulo Henrique Fabri** (fabri.paulohenrique@gmail.com), licenciado e bacharel em Química, com habilitação em Química Industrial, pela Universidade Federal de Ouro Preto, mestre em Ciências Naturais, na área de Ensino de Ciências, pela Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro. Alegre, ES – BR. **Lais Stoller Oliveira** (laisstoller@gmail.com), licenciada em Ciências, habilitação em Química, pelo Instituto Federal Fluminense, mestre em Ciências Naturais pela Universidade Estadual Norte Fluminense Darcy Ribeiro. São Fidélis, RJ – BR.

## Referências

ABRAHAM, M.; VARGHESE, V. e TANG, H. Using molecular representations to aid student understanding of stereochemical concepts. *Journal of Chemical Education*, v. 87, n. 12, p. 1425-1429, 2010.

AL-BALUSHI, S. M. e AL-HAJRI, S. H. Associating animations with concrete models to enhance students' comprehension of different visual representations in organic chemistry. *Chemistry Education Research and Practice*, n. 15, p. 47-58, 2014.

BATTINO, R. Giant atomic and molecular models and other lecture demonstration devices designed for concrete operational students. *Journal of Chemical Education*, v. 60, n. 6, p. 485-488, 1983.

BIRK, J. P. e FOSTER, J. Molecular models for the do-it-yourselfer. *Journal of Chemical Education*, v. 66, n. 12, p. 1015-1018, 1989.

CHARBONNEAU, M. The cognitive life of mechanical molecular models. *Studies in History and Philosophy of Biological and Biomedical Sciences*, n. 44, p. 585-594, 2013.

COREY, R. B. e PAULING, L. Molecular models of amino acids, peptides, and proteins. *The Review of Scientific Instruments*, v. 24, n. 8, p. 621-627, 1953.

DORI, Y. J. e BARAK, M. Virtual and physical molecular modeling: fostering model perception and spatial understanding. *Educational Technology and Society*, v. 4, n. 1, p. 61-74, 2001.

FRANCOEUR, E. The forgotten tool: the design and use of molecular models. *Social Studies of Science*, v. 27, n. 1, p. 7-40, 1997.

HAGEMAN, J. H. Use of molecular models for active learning in biochemistry lecture courses. *Journal of Chemical Education*, v. 87, n. 8, p. 291-293, 2010.

**Lara Santos Ribeiro** (lararibeiro535@gmail.com), licenciada em Química e mestra em Ciências Naturais pela UENF. São João da Barra, RJ – BR. **Larissa Codeço Crespo** (lcodeco@iff.edu.br), licenciada em Química, mestra e doutora em Ciências Naturais, na linha de pesquisa de Ensino de Ciências, pela Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro. Campos dos Goytacazes, RJ – BR. **Aline Escocard Siqueiraicenci** (aline\_escocard@hotmail.com), licenciada em Química pela Universidade Estadual do Norte Fluminense e especialista em Educação Ambiental pelo Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Fluminense. Campos dos Goytacazes, RJ – BR. **Rosana Giacomini** (rosanag@uenf.br), farmacêutica, bacharel e licenciado em Química pela Universidade Estadual de Londrina, mestra e doutora em Química pela Universidade Estadual de Campinas. Goytacazes, RJ – BR.

HE, F. C.; LIU, L. B. e LI, X. Y. Molecular models constructed in an easy way. *Journal of Chemical Education*, v. 67, n. 8, p. 650-652, 1990.

HERNANDEZ, S. A.; RODRIGUEZ, N. M. e QUINZANI, O. An easily constructed and versatile molecular model. *Journal of Chemical Education*, v. 73, n. 8, p. 748, 1996.

KAUFMAN, D.; WRIGHT, G.; KROEMER, R. e ENGEL, K. "New" compounds from old plastics: recycling PET plastics via depolymerization. *Journal of Chemical Education*, v. 76, n. 11, p. 1525-1526, 1999.

MAK, T. C. W.; LAM, C. N. e LAU, O. W. Drinking-straw polyhedral models in structural chemistry. *Journal of Chemical Education*, v. 54, n. 7, p. 438-439, 1997.

MATEUS, A. L. e MOREIRA, M. G. *Construindo com PET: como ensinar truques novos com garrafas velhas*. São Paulo: Livraria da Física, p. 67-78, 2007.

PASSONI, L. C.; VEGA, M. R. G.; GIACOMINI, R.; BARRETO, A. M. P.; SOARES, J. S. C.; CRESPO, L. C. e NEY, M. R. G. Relatos de experiências do Programa Institucional de Bolsa de Iniciação à Docência no curso de Licenciatura em Química da Universidade Estadual do Norte Fluminense. *Química Nova na Escola*, v. 34, n. 4, p. 201-209, 2012.

ROY, P. K.; RAMANAN, A. e RAJAGOPAL, C. Post consumer PET waste as potential feedstock for metal organic frameworks. *Materials Letters*, n. 106, p. 390-392, 2013.

SCALFANI, V. F. e VAID, T. P. 3D Printed molecules and extended solid models for teaching symmetry and point groups. *Journal of Chemical Education*, n. 91, p. 1174-1180, 2014.

SIODŁAK, D. Building molecular models using screw-on bottle caps. *Journal of Chemical Education*, v. 90, n. 9, p. 1247-1249, 2013.

WILLIAMS, K. R. Balloon – toy of many colors. *Journal of Chemical Education*, v. 82, n. 10, p. 1448-1449, 2005.

**Abstract:** *Molecular model construction from PET bottles: a proposal for chemistry teaching.* This article describes a step-by-step procedure for constructing a large size molecular model from PET bottles. This molecular model is suitable for medium and large classroom presentations and has demonstrated excellent manipulative stability as well as being an efficient tool to attract students' attention. The model has shown versatility and can be used in the teaching of a large number of topics such as conformational analysis, various types of isomerism, molecular geometry, functional groups, resonance concepts (valence bonding theory) and molecular orbital theory.

**Keywords:** conformational analysis, stereochemistry, molecular structure.