



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

**Centro Acadêmico do Agreste
Núcleo de Formação Docente
Curso de Química - Licenciatura**



KAYO FERNANDO DA SILVA

**ESTRATÉGIA PARA O ENSINO DE QUÍMICA QUÂNTICA BASEADO
EM UM ESTUDO DE CASO ENVOLVENDO COMPLEXOS DE
MOLIBDNÊNIO**

Caruaru-PE

2017

KAYO FERNANDO DA SILVA

**ESTRATÉGIA PARA O ENSINO DE QUÍMICA QUÂNTICA BASEADO
EM UM ESTUDO DE CASO ENVOLVENDO COMPLEXOS DE
MOLIBDÊNIO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Colegiado de Química-Licenciatura do Centro Acadêmico do Agreste da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Química.

Orientador: Dra. Juliana Angeiras Batista da Silva

Co-orientador: Dr. José Ayrton Lira dos Anjos

CARUARU

2017

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Simone Xavier - CRB/4 - 1242

S586e Silva, Kayo Fernando da.
Estratégia para o ensino de química quântica baseado em um estudo de caso envolvendo complexos de molibdênio./ Kayo Fernando da Silva. - 2017.
75f.; il.: 30 cm.

Orientadora: Juliana Angeiras Batista da Silva.
Coorientador: José Ayrton Lira dos Anjos.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, Licenciatura em Química, 2017.
Inclui Referências.

1. Química – Estudo e ensino. 2. Química quântica. 3. Espectroscopia vibracional.
4. Mapas conceituais. I. Silva, Juliana Angeiras Batista da (Orientadora). II. Anjos, José Ayrton Lira dos (Coorientador). III. Título.

371.12 CDD (23. ed.)

UFPE (CAA 2017-483)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
Núcleo de Formação Docente Centro Acadêmico do Agreste
Colegiado do Curso de Química - Licenciatura

FOLHA DE APROVAÇÃO DO TCC

KAYO FERNANDO DA SILVA

**“ESTRATÉGIA PARA O ENSINO DE QUÍMICA QUÂNTICA
BASEADO EM UM ESTUDO DE CASO ENVOLVENDO COMPLEXOS
DE MOLIBDÊNIO”**

Relatório final apresentado a Universidade Federal de
Pernambuco, como parte das exigências para a obtenção
do título de graduado em Química-Licenciatura.

Caruaru, 13 de Dezembro de 2017.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dra. Juliana Angeiras Batista da Silva (NICEN-CAA)
(Orientadora)

Prof. Dra. Roberta Pereira Dias (NICEN-CAA)
(Examinadora 1)

Prof. Dr. Roberto Araújo Sá (NFD-CAA)
(Examinador 2)

RESUMO

A aprendizagem de Química Quântica é fundamental para o entendimento de diversos processos presentes no nosso cotidiano, desde à compressão de fenômenos químicos e físicos relacionados às cores da natureza ao nosso redor, até a utilização de recursos tecnológicos em áreas de saúde, engenharia, astronomia etc. Entretanto, além dos problemas bastante relatados na literatura relacionados ao ensino de Química associados à utilização de estratégias de ensino monótonas e tradicionalistas, a Química Quântica perpassa por problemas associados aos graus elevados de abstração e complexidade matemática. Portanto, faz-se necessário a utilização de metodologias que desmistifiquem o ensino da Química Quântica e a tornem atrativa, visto que o ensino desta área da Química é de extrema relevância, pois permite que os mesmos tenham compreensão necessária para acompanhar os avanços tecnológicos atuais. Assim, este trabalho de pesquisa buscou investigar os impactos no processo de ensino e aprendizagem ao se utilizar a estratégia de ensino estudo do caso, com o caso intitulado “Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxodiperoxo de molibdênio” para o ensino do modelo do oscilador Harmônico, conteúdo da disciplina Química Quântica no ensino superior. A avaliação da aprendizagem foi realizada por meio da análise de mapas conceituais construídos pelos alunos da disciplina de Introdução à Química Quântica do Curso de Química-Licenciatura na UFPE-CAA, dos quais 19 estudantes participaram da atividade, que buscou responder à pergunta focal “Como o modelo do oscilador Harmônico Quântico se relacionam com o espectro vibracional?” por meio dos mapas. Os resultados obtidos mostram que a metodologia proposta favoreceu a clareza conceitual necessária à representação do conhecimento científico, que pôde ser constatada em termos das relações entre os conceitos e da organização hierárquica das ideias, que levaram à responderem a pergunta. 84% dos estudantes conseguiram responder à pergunta focal, mesmo que em diferentes níveis, sendo que 58% dos estudantes responderam completamente à pergunta, fato que anteriormente era muito difícil de ser alcançado por um grande número de discentes em uma turma por meio de estratégias de ensino tradicionais. Assim, essa proposta permitiu explorar o conteúdo de Química Quântica, de maneira mais prática, conceitual e contextualiza, tornando a sua aprendizagem mais significativa, dinâmica e atrativa. Espera-se também que ambas estratégias: ensino a partir do Estudo de Caso e mapa conceitual, como ferramenta de avaliação, possam despertar os discentes, que serão professores, para novos conhecimentos metodológicos, bem como para a pesquisa científica.

Palavras-chave: Química Quântica. Estudo de Caso. Espectroscopia Vibracional. Mapas Conceituais.

ABSTRACT

The learning of quantum chemistry is fundamental for the understanding of several processes present in our daily life, from the compression of chemical and physical phenomena related to the colors of nature around us, to the use of technological resources in health, engineering, astronomy etc. However, in addition to the problems reported in the literature related to the teaching of chemistry associated to the use of monotonous and traditionalist teaching strategies, Quantum Chemistry runs through problems associated with high degrees of abstraction and mathematical complexity. Therefore, it is necessary to use methodologies that demystify the teaching of Quantum Chemistry and make it attractive, since the teaching of this area of Chemistry is extremely relevant, since it allows them to have the necessary understanding to follow the current technological advances. Thus, this research work aimed to investigate the impacts on the teaching and learning process when using the teaching strategy case study, with the case entitled "Attribution of the vibrational spectrum of coordination compounds of oxo-diperoxo molybdenum type" to the teaching of the harmonic oscillator model, contents of the Quantum Chemistry course in higher education. The evaluation of the learning was carried out through the analysis of conceptual maps constructed by the students of the course of Introduction to Quantum Chemistry of the Chemistry at UFPE-CAA, of which 19 students participated in the activity, which aimed to answer the focal question "How the quantum harmonic oscillator model relate to the vibrational spectrum?" using conceptual maps. The results show that the proposed methodology favored the conceptual clarity necessary to the representation of scientific knowledge, which could be verified in terms of the relations between the concepts and the hierarchical organization of the ideals, which led to the answer to the question. 84% of the students were able to answer the focal question, even though at different levels, with 58% of the students answering the question completely, which was previously very difficult to achieve by a large number of students in a class through traditional teaching. Thus, this proposal allowed to explore the content of quantum chemistry in a more practical, conceptual and contextual way, making its learning more meaningful, dynamic and attractive. It is also hoped that both strategies: teaching from the Case Study and conceptual map, as an evaluation tool, can awaken the students, who will be teachers, for new methodological knowledge, as well as for scientific research.

Keywords: Quantum Chemistry. Case Study. Vibrational Spectroscopy. Conceptual Maps.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	(a) Modelo dos oscilador harmônico contendo uma massa infinita e uma mola. (b) Representação do modelo de moléculas diatômicas em que ligações químicas podem ser representados por um sistema massa mola ideal.....	17
Figura 2	Representação da variação do potencial de interação internuclear de uma molécula diatômica (linha sólida) com o potencial do oscilador harmônico (linha tracejada).....	20
Figura 3	Os níveis de energia de um oscilador harmônico mecânico-quântico	22
Figura 4	Geometria otimizada do complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol})(\text{H}_2\text{O})]$	29
Figura 5	Espectro na região do infravermelho calculado no nível B3LYP/LanL2DZ/6-31G* para o complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol},\text{eq})(\text{H}_2\text{O},\text{ax})]$	29
Figura 6	Mapa conceitual mínimo construído em conjunto pelo pesquisador e pela orientadora desse trabalho para responder à pergunta focal.....	40
Figura 7	Mapa conceitual construído pelo aluno A1.....	44
Figura 8	Mapa conceitual construído pelo aluno A2.....	46
Figura 9	Mapa conceitual construído pelo aluno A3.....	47
Figura 10	Mapa conceitual construído pelo aluno A4.....	48
Figura 11	Mapa conceitual construído pelo aluno A5.....	48
Figura 12	Mapa conceitual construído pelo aluno A6.....	50
Figura 13	Mapa conceitual construído pelo aluno A7.....	51
Figura 14	Mapa conceitual construído pelo aluno A8.....	51
Figura 15	Mapa conceitual construído pelo aluno A9.....	52
Figura 16	Mapa conceitual construído pelo aluno A10.....	52
Figura 17	Mapa conceitual construído pelo aluno A11.....	53
Figura 18	Mapa conceitual construído pelo aluno A12.....	53

Figura 19	Mapa conceitual construído pelo aluno A13.....	54
Figura 20	Mapa conceitual construído pelo aluno A14.....	54
Figura 21	Mapa conceitual construído pelo aluno A15.....	55
Figura 22	Mapa conceitual construído pelo aluno A16.....	55
Figura 23	Mapa conceitual construído pelo aluno A17.....	56
Figura 24	Mapa conceitual construído pelo aluno A18.....	56
Figura 25	Mapa conceitual construído pelo aluno A19.....	57
Figura 26	Distribuição de conectividades para os sítios analisados: oscilador (a), vibração (b) e espectro (c).....	61

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Frequências vibracionais selecionadas (cm^{-1}) com suas correspondentes intensidades (km/mol) obtidas com diferentes esquemas de cálculo (diferentes funcionais da densidade) para o complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol},\text{eq})(\text{H}_2\text{O},\text{ax})]$	30
Tabela 2	Elucidação dos mais diversos tipos de mapas conceituais de acordo com Tavares 2007.....	33
Tabela 3	Etapas que guiarão a aplicação da metodologia proposta nesse projeto.....	37
Tabela 4	Análise das unidades semânticas formadas a partir das proposições apresentadas no mapa da figura 7.....	44
Tabela 5	Análise das unidades semânticas formadas a partir das proposições apresentadas no mapa da figura 8.....	46

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	OBJETIVOS	13
2.1	Objetivo Geral.....	13
2.2	Objetivos Específicos.....	13
3	REVISÃO DA LITERATURA	14
3.1	Espectroscopia.....	14
3.1.1	Fundamentos da espectroscopia vibracional – problema do oscilador harmônico.....	16
3.2	Estudo de caso no ensino de química.....	25
3.2.1	O caso: Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio.....	27
3.3	O ensino de química quântica.....	30
3.4	Mapa Conceitual.....	32
4	METODOLOGIA	35
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	38
5.1	Estudo de Caso.....	38
5.2	Aulas sobre como construir mapas conceituais.....	39
5.3	Construção do mapa conceitual espelho a partir da pergunta proposta nesse trabalho.....	40
5.4	Análise dos mapas conceituais construídos pelos discentes.....	41
5.5	Uma extensão da análise: Estatística de redes complexas.....	58
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	62
	REFERÊNCIAS	65
	APÊNDICE A: Estudo do Caso: Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio.....	69
	APÊNDICE B: Slide de parte da aula sobre a construção de mapas conceituais.	72

1

INTRODUÇÃO

A aprendizagem de Química Quântica em cursos de Química de nível superior é de extrema importância para a compreensão de diversos fenômenos químicos e físicos cotidianos, desde a compreensão das cores da natureza ao nosso redor, até ao entendimento de técnicas amplamente utilizadas para caracterização de compostos, diagnósticos médicos, dispositivos eletônicos, materiais funcionalizados, composição das estrelas e do universo como um todo. Portanto, faz-se necessário desmistificar o ensino da Química Quântica, visto que o ensino desta área da Química é de extrema relevância para que permita que os mesmos tenham compreensão para acompanhar os avanços tecnológicos atuais, oriundos do sucesso desta teoria. Assim, o ensino de conceitos relacionados a Química Quântica tanto no Ensino Médio quanto no Ensino Superior não carece de uma justificativa elaborada, tendo em vista a importância já reconhecida desta na sociedade, devendo ser realizado de forma a favorecer a compreensão dos alunos e, possivelmente estimulá-los a trabalhem futuramente essa temática em pesquisas científicas, tanto na área fundamental quanto na área de ensino, ambas de grande importância para o progresso da ciência no País.

Entretanto, além dos problemas já bastante relatados na literatura com relação à estratégias monótonas tradicionalistas adotadas no ensino de Química, em particular, para o ensino dessa disciplina, o aprendizado perpassa por um nível elevado de abstração e complexidade matemática, o que torna o ensino de tal conteúdo muitas vezes desconexo e descontextualizado. Ainda para agravar esse contexto, a aprendizagem de conceitos relacionados à Química Quântica durante o Ensino Médio, tais como números quânticos, orbitais, hibridização, distribuição eletrônicas nos átomos, ligação química etc., ocorre por meio de um processo que contém várias falhas, cujo resultado final são estudantes que não compreendem a origem de tais conceitos, suas utilidades e como contextualizá-los. Além

disso, a maioria dos professores não foram preparados para o ensino de tal conteúdo e os mesmos não o compreendem, e não conseguem realizar uma adequada transposição didática destes conceitos, que reflete em falhas na aprendizagem dos alunos (CASTRO, 2015; GRECA; MOREIRA, 2001); e também os livros didáticos não contribuem para a melhoria desse cenário (CASTRO, 2015)

Assim, a proposição e a utilização de estratégias diferenciadas de ensino visando uma maior compreensão conceitual do assunto abordado e integrado ao contexto tecnológico e social em uma disciplina de química quântica pode ser de grande valia. Nesse sentido, destaca-se a Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC), que visa melhorar a autonomia e o desenvolvimento do aluno e também seu senso crítico, além de possibilitar o mesmo na introdução de metodologias de pesquisa.

Motivados pelas dificuldades supracitadas e pelos relatos de estudantes da Universidade Federal de Pernambuco do Centro Acadêmico do Agreste sobre as dificuldade de se entender essa área da ciência e da falta de uma relação com os seus cotidianos, este trabalho de conclusão de curso visou a proposição e aplicação de uma Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC) para a aprendizagem de Química Quântica, intitulado “Atribuição do Espectro Vibracional de Complexos Oxo-diperoxo de Molibdênio”. Buscou-se, com isso, propor uma abordagem diferenciada que pudesse contextualizar tal conteúdo e melhorar este cenário, com o intuito de tornar a aprendizagem mais significativa, buscando sempre que o aluno faça descobertas, ajudando-o a definir por ele mesmo conceitos já elucidados.

Os discentes matriculados na disciplina Introdução à Química Quântica do curso de Química-Licenciatura do Centro Acadêmico do Agreste da Universidade Federal de Pernambuco no semestre 2017.2 foram os sujeitos da pesquisa. Esta disciplina possui carga horária de apenas 30 h, e, portanto, pouco contato em sala de aula com um conteúdo novo, abstrato, denso e bastante complexo, o que agrava ainda mais os problemas relatados. Assim, novas formas de explorar o conteúdo, de maneira mais prática e conceitual podem tornar sua aprendizagem mais significativa, dinâmica e atrativa.

Também se tornou evidente que é necessário uma forma de avaliar que se diferenciasse do modo tradicional, que apenas foca na memorização. Assim, neste trabalho, foi utilizado o mapa conceitual como uma forma de avaliar qualitativamente essa aprendizagem, visto que tal recurso permite analisar o desenvolvimento do aluno ao logo da utilização do estudo de caso. Ambas estratégias: ensino a partir do Estudo de Caso e mapa conceitual, como ferramenta de avaliação, também foram utilizados com o intuito de

despertar nos discentes, que serão professores, em um futuro próximo, para novos conhecimentos metodológicos.

Vale ressaltar que o tema proposto tem relação com os projetos de iniciação científica desenvolvidos ao longo do curso de graduação pelo pesquisador orientador deste trabalho, a Prof. Dra. Juliana Angeiras Batista da Silva, e pelo discente autor deste trabalho de conclusão de curso, Kayo Fernando da Silva, motivado para a compreensão mais aprofundada de fenômenos relacionados à Química Quântica e para o desenvolvimento de metodologias de ensino que proporcionassem uma melhor compreensão de tal conteúdo.

Também esperava-se, com o desenvolvimento desse trabalho, que fosse despertado o interesse dos discentes de disciplinas correlatas para o desenvolvimento de pesquisas básicas e/ou aprofundamento nos conteúdos, e para o conhecimento dos projetos de pesquisa desenvolvidos dentro desta Universidade, visto que a mesma, além de ter o dever de transmitir conhecimento, que se dá principalmente em sala de aula, também deve produzi-lo. Com isso, os estudantes poderão se tornar profissionais de nível superior formados não só a partir de conhecimentos já sedimentados, mas também dos conhecimentos que estão na vanguarda da sua área de formação. Dentro da Universidade, essas duas atividades, ensino e pesquisa, são indissociáveis, e o estudante deve se beneficiar dessa característica para a sua formação plena. Além disso, espera-se também que o uso de tal estratégia possa motivá-los a trabalhar com metodologias no ensino de química que levem em consideração a formação de estudantes antenados com os avanços da ciência, interdisciplinaridade e que saibam relacionar os conteúdos aprendidos com seus cotidianos.

Nos capítulos seguintes estão descritos os objetivos geral e específicos deste trabalho. No capítulo 3, uma breve fundamentação teórica, envolvendo ensino de química quântica, sua importância e seus principais desafios; estratégia de ensino estudo de caso; espectroscopia e modelo do oscilador harmônico; e mapa conceitual, deve permitir uma compreensão da metodologia proposta para que os objetivos desse projeto sejam alcançados. No capítulo 4 será detalhada a metodologia e no capítulo 5 estão descritos os principais resultados obtidos nesse trabalho.

2

OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Investigar os impactos no processo de ensino e aprendizagem ao se utilizar a estratégia de ensino do estudo do caso “Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio” para o ensino do modelo do oscilador Harmônico, conteúdo da disciplina Química Quântica no ensino superior.

2.2 Objetivos Específicos

- Investigar como o caso “Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio” contribui para o ensino de Química Quântica, por meio da análise de mapas conceituais construídos pelos alunos da disciplina.
- Analisar por meio de mapas conceituais que estratégias metacognitivas os alunos desenvolvem ao aprendizado do conceito de espectroscopia vibracional.

3

REVISÃO DE LITERATURA

3.1 Espectroscopia

Muito do nosso atual conhecimento acerca da estrutura da matéria é baseado em investigações espectroscópicas (ALCANTARA, 2002). A simples compreensão de fatos como a cor que percebemos ao nosso redor, tais como em folhas e flores, bem como a percepção do aquecimento de materiais, incluindo nossa pele, quando estão sob efeito da luz solar; e também a ausência desse fenômeno à noite, é atribuída à espectroscopia (DE OLIVEIRA, 2001). Quando radiação de determinado comprimento de onda entra em contato com a matéria, ocorrerá algum fenômeno espectroscópico. Os fenômenos vão depender da grandeza da energia da radiação: transições eletrônicas estão associadas às cores da natureza que nos cerca; transições vibracionais estão associadas ao calor emanado pelas substâncias, que estão sofrendo vibrações moleculares, referentes a movimentos dos núcleos dos átomos que compõem as moléculas, etc. A espectroscopia tem como fundamento básico revelar o efeito da interação da radiação com a matéria, estando esta no estado gasoso, líquido ou sólido, que torna possível a identificação de compostos químicos por meio de suas características distintas em suas assinaturas espectroscópicas.

De acordo com o valor de energia da radiação eletromagnética que interage com a matéria, as transições entre os estados ocorrem diferenciadamente. As principais são as transições eletrônicas, vibracionais e rotacionais. Nas transições eletrônicas, ocorre a passagem de um elétron de um estado de menor energia para um estado de maior energia, através da absorção da radiação, mas praticamente não há mudança da posição dos núcleos da molécula. Normalmente envolvem energias situadas na faixa do ultravioleta ou do visível.

Nos demais tipos de transição ocorre uma mudança da posição relativa dos átomos na molécula devido ao efeito da radiação eletromagnética, de menor energia que nos casos de transições eletrônicas. O movimento dos núcleos dá origem ao espectro vibracional, cuja energia necessária para tal fenômeno está situada na faixa da radiação eletromagnética do infravermelho. As transições entre estados rotacionais envolvem energia bem menores e podem ser observadas por espectroscopia na região de microondas ou, para moléculas leves, no infravermelho distante. Além delas, temos também as transições translacionais, cujas energias são ainda menores (SALA, 2008).

A obtenção dos comprimentos de onda de linhas espectrais permitem a determinação de níveis de energia de sistemas atômicos e moleculares. A intensidade da linha é proporcional à probabilidade de transição, que mede quão fortemente dois níveis de uma transição molecular (ou atômica) estão acoplados. Com relação ao espectro molecular, a energia total de excitação de uma molécula pode ser descrita, com boa aproximação, como a soma das energias de excitações parciais dos níveis eletrônico, vibracional e rotacional, $E = E_{el} + E_{vib} + E_{rot}$, em que os subscritos el, vib e rot significam eletrônica, vibracional e rotacional, respectivamente.

As transições obedecem a regras de seleção específicas. Dentre elas, podem ser classificados três tipos de espectros ópticos: rotacionais, associados à transições entre níveis rotacionais de um dado nível vibracional em um estado eletrônico particular; rotacionais-vibracionais, associados à transições dos níveis rotacionais de um certo estado vibracional para os níveis rotacionais de um outro estado vibracional no mesmo termo eletrônico, mantendo o estado de excitação eletrônico inalterado (ALCANTARA, 2002).

Os graus de liberdade molecular definem a quantidade de movimentos que podem ser efetuados pelos átomos que compõem uma determinada molécula. Uma molécula composta por N átomos disposta no espaço tridimensional, apresenta, portanto, $3N$ graus de liberdade. Três desses modos estão associados aos movimentos translacionais (nas direções dos eixos x , y e z do sistema de coordenadas cartesianas), 3 modos rotacionais (rotação em torno dos eixos x , y e z) e os restantes $3N - 6$, modos vibracionais. Para o caso de moléculas lineares, se considerarmos o eixo z como sendo o eixo no qual a molécula está alinhada, existem apenas 2 modos rotacionais, e, portanto, $3N - 5$ modos vibracionais.

O foco desse trabalho é a interação da radiação eletromagnética com a matéria que altere a posição dos núcleos dos átomos, devido a mudanças das distâncias de ligação ou nos ângulos de ligação, ou seja, a espectroscopia vibracional. A seguir serão brevemente

detalhadas características da espectroscopia vibracional e os modelos mais utilizados para a previsão de propriedades espectroscópicas vibracionais.

3.1.1 Fundamentos da Espectroscopia Vibracional – O Problema do Oscilador Harmônico

Toda a fundamentação teórica dos conceitos físicos-químicos que estão apresentados a seguir tomam como base, em sua maioria, os livros: Físico-Química, de ATKINS e PAULA, Vol. 1. 8. ed. LTC, do ano de 2010, e *Physical chemistry: a molecular approach*, de MCQUARRIE e SIMON, Ed. University Science Books, 1997.

Quando radiação eletromagnética na região do infravermelho interage com uma molécula, para que o movimento vibracional possa ser interpretado experimentalmente, um fato que deve necessariamente acontecer é que o momento de dipolo intrínseco da molécula varie com o movimento vibracional. Vibrações moleculares que não causam mudança no momento de dipolo não serão observadas, ou seja, a intensidade desta absorção será nula.

Nesse ponto vale destacar que a natureza fez um bom trabalho, pois a atmosfera de nosso planeta é composta quase exclusivamente pelos gases N_2 e O_2 e, como os dois não absorvem radiação no infravermelho, esse tipo de radiação pode chegar à superfície de nosso planeta, permitindo, assim, que calor seja emanado para os seres vivos em geral (ATKINS; PAULA, 2010).

Para moléculas diatômicas, é fácil atribuir qual o modo vibracional observado, visto que apenas um modo vibracional é esperado ($3 \times 2 - 5 = 1$). Para moléculas poliatômicas, na prática, o que se faz é separar a molécula em várias partes, como se fossem moléculas diatômicas, e analisar cada pedaço de forma independente. Entretanto, isso se trata de uma aproximação, visto que todos os átomos podem participar do movimento (movimentos acoplados).

O espectro é o registro da interação da radiação com a matéria. Pode-se dizer que o espectro é a impressão digital de um composto químico, uma vez que cada composto difere de outro em função da composição química, ou seja, de diferentes átomos que o formam, e também da geometria molecular. A análise do espectro permite prever qual é a molécula em

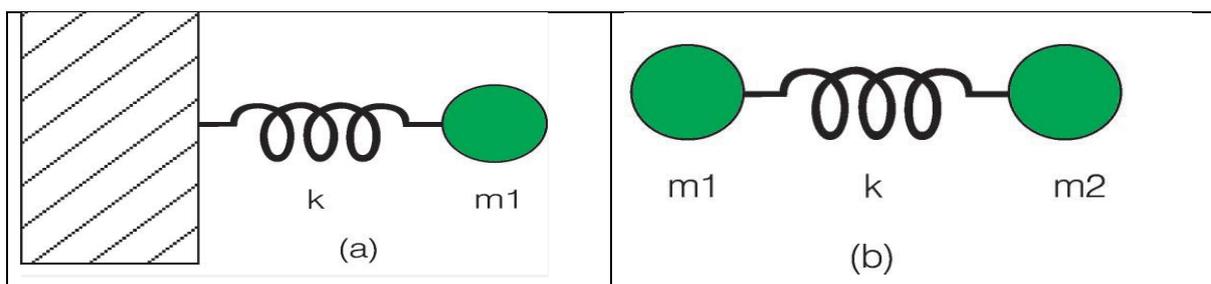
questão. Por exemplo, é com a ajuda da espectroscopia molecular que podemos também investigar se há sinal de vida em outros planetas.

Um equipamento que obtém o registro das bandas do espectro vibracional é um espectrofotômetro de infravermelho, que deve ser composto por: fonte policromática (uma lâmpada que emite radiação na faixa de interesse, geralmente de 400 a 4000 cm^{-1}); um sistema de redes de difração para separar a radiação policromática; e um detector, usualmente um sistema que permite diferenciar temperaturas.

Vale ressaltar que, em se tratando da incidência de luz na matéria, nem toda a radiação será absorvida, muitas vezes ela pode ser espalhada. Se esse fóton for espalhado com o mesmo valor de comprimento de onda, ou seja, se a energia do fóton for a mesma antes e depois da interação com a matéria, denomina-se de espalhamento elástico (o princípio da conservação de energia é seguido) ou Rayleigh. Os casos em que a energia do fóton espalhado não é a mesma são denominados de efeito Raman. Esses casos não serão tratados nesse trabalho.

O modelo mais simples para estudar as vibrações de moléculas diatômicas é considerar os núcleos ligados por molas. Nesse caso, as molas representariam as correspondentes ligações químicas (SALA, 2008). Este modelo é conhecido como o modelo do oscilador harmônico e é composto por uma partícula de massa m e uma parede de massa infinita (ou seja, uma massa muito maior que a massa da partícula), ambas ligadas por uma mola comum, conforme ilustrado no esquema da figura 1a. A figura 1b exemplifica esse modelo aplicado à moléculas diatômicas. Esse modelo é muito discutido devido a sua grande aplicabilidade. Na química, por exemplo, ele é uma boa aproximação para descrever o movimento vibracional dos átomos em uma molécula (HERMOSO, 2008).

Figura 1: (a) Modelo do oscilador harmônico contendo uma massa infinita e uma mola. (b) Representação do modelo de moléculas diatômicas em que ligações químicas podem ser representados por um sistema massa mola ideal.



Fonte: (DE OLIVEIRA, 2001).

Neste modelo, a partícula se movimenta periodicamente em relação à origem na direção da extensão da mola, comprimindo-a e distendendo-a. A força que atua na partícula para voltar à origem é proporcional ao seu deslocamento, Δx , por uma constante, k , é regida pela lei conhecida como lei de Hooke,

$$F = -k.\Delta x. \quad \text{Eq. 1}$$

Essa força é, portanto, restauradora. A segunda lei de Newton, dada em termos matemáticos pela Eq. 2, descreve o movimento da partícula. Uma vez iniciado o movimento, a partícula irá continuar a se movimentar indefinidamente, visto que não há forças externas (incluindo atrito) para cessar ou alterar o movimento. Daí esse modelo ser conhecido como oscilador harmônico.

$$\vec{F} = m.\vec{a}, \quad \text{Eq. 2}$$

em que \vec{F} é a força resultante, m é a massa da partícula e \vec{a} é o vetor aceleração.

Uma solução típica para esse problema pode ser dada em termos de funções periódicas, do tipo seno ou cosseno, que são funções periódicas no tempo, tal como,

$$\Delta x = x_0 \cos(2\pi \nu t + \phi), \quad \text{Eq. 3}$$

em que x_0 é a posição inicial da partícula, ν é a frequência do movimento e t a dependência temporal do mesmo.

Utilizando uma função desse tipo na equação matemática que descreve a segunda lei de Newton, obtém-se uma expressão para a frequência de oscilação, ν , da partícula:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \text{Eq. 4}$$

Para que esse modelo se torne útil do ponto de vista molecular, é necessário estender a análise para um sistema de duas partículas de massas m_1 e m_2 conectadas por uma mola de constante elástica igual a k . Nesse caso, a mola representaria uma ligação química entre os dois átomos (as partículas de massas m_1 e m_2) que formam uma molécula diatômica. Tal modelo poderia ser aplicado, por exemplo, ao estudo de gases, tais como oxigênio e nitrogênio, principais constituintes dos gases atmosféricos (DE OLIVEIRA, 2001).

Nesse caso, as duas partículas irão se deslocar de modo acoplado, de acordo com a lei de Newton,

$$\begin{aligned} m_1 a_1 - k(\Delta x_2 - \Delta x_1) &= 0 \\ m_2 a_2 - k(\Delta x_2 - \Delta x_1) &= 0 \end{aligned} \quad \text{Eq. 5}$$

Supondo que a solução para esse problema seja similar àquela da Eq. 3, a frequência de oscilação do movimento será dada por

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad \text{Eq. 6}$$

em que μ se refere à massa reduzida do sistema,

$$\mu = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}. \quad \text{Eq. 7}$$

Ou seja, a solução do problema de duas partículas de massas m_1 e m_2 conectadas à uma mola de constante elástica igual k é equivalente à solução do problema de uma partícula de massa μ conectada à uma mola de constante elástica igual k presa à uma parede de massa infinita.

Voltando ao caso de uma molécula diatômica, apenas um modo vibracional será observado ($3 \times 2 - 5 = 1$) e a constante elástica ou, como é denominada, nesse caso, de

constante de força da ligação química, pode ser interpretada como uma medida do grau de interação entre os dois átomos, ou seja, quão forte ou fraca é a ligação química entre esses átomos.

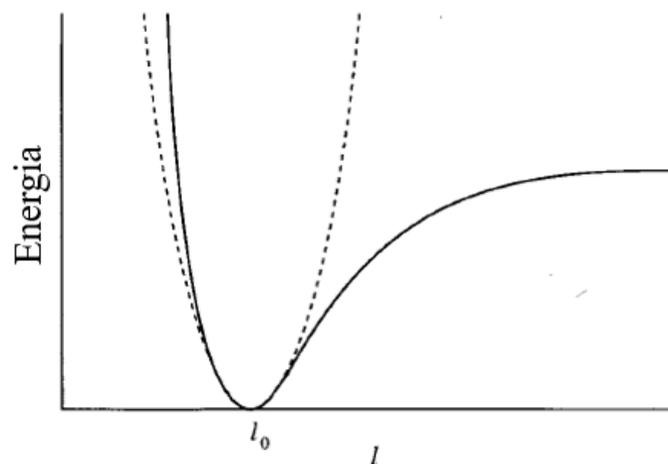
Assim, se o valor da frequência de oscilação for conhecido, a energia necessária para promover tal movimento pode ser calculada por meio da equação de Plank,

$$E = h\nu, \quad \text{Eq. 8}$$

em que h é a constante de Plank.

Entretanto, vale ressaltar que no caso de moléculas, o oscilador harmônico é uma boa aproximação apenas para os níveis de energia vibracional mais baixos (região fisicamente importante para a maioria das moléculas a temperatura ambiente e oscilações de pequenas amplitudes) como mostra o diagrama da figura 2. O modelo do oscilador harmônico permite deslocamentos variarem de $-\infty$ a $+\infty$. Grandes deslocamentos produzem energia potencial tão grandes que, na prática, não ocorrem. Assim, esse modelo é uma boa aproximação apenas para oscilações com pequenas amplitudes.

Figura 2: Representação da variação do potencial de interação internuclear de uma molécula diatômica (linha sólida) com o potencial do oscilador harmônico (linha tracejada). Este último só pode ser utilizado satisfatoriamente bem para descrever o potencial diatômico apenas para pequenos deslocamentos.



Fonte: Adaptado da referência MCQUARRIE e SIMON, 1997.

Se considerarmos a expansão de Taylor da energia potencial, $V(l)$, em torno da distância de ligação de equilíbrio, $l = l_0$, os primeiros termos nessa expansão são:

$$V(l) = V(l_0) + \left(\frac{dV}{dl}\right)_{l=l_0} (l-l_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dl^2}\right)_{l=l_0} (l-l_0)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3V}{dl^3}\right)_{l=l_0} (l-l_0)^3 + \dots, \quad \text{Eq. 9}$$

em que l é o comprimento da mola e l_0 é o comprimento da mola relaxada. Se a mudança de variável $x = l - l_0$ for realizada, e as correspondentes segunda e terceira derivadas do potencial em relação à x , em $x = 0$, respectivamente, substituída por k e γ ,

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{1}{2} k(l-l_0)^2 + \frac{1}{6} \gamma(l-l_0)^3 + \dots \\ &= \frac{1}{2} kx^2 + \frac{1}{6} \gamma x^3 + \dots \end{aligned}, \quad \text{Eq. 10}$$

tem-se que, para níveis vibracionais mais elevados, a força, ou o potencial, não pode mais ser aproximada por uma equação proporcional ao deslocamento. Portanto, o movimento de vibração se torna anarmônico e, nesses, casos, a solução do problema deve incluir correções ou a obtenção de soluções para um potencial de interação internuclear adequado.

Considerando o modelo do oscilador harmônico unidimensional adequado ao estudo de moléculas diatômicos, precisamos encontrar as soluções (funções de onda, ψ) que satisfazem a equação de Schrödinger para a obtenção das propriedades vibracionais:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{Eq. 11}$$

Com $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} kx^2 \right) \psi(x) = 0. \quad \text{Eq. 12}$$

Quando esta equação diferencial é resolvida para as condições de contorno que tornam as soluções fisicamente aceitáveis, ou seja, o oscilador não pode se estender ou se comprimir indefinidamente e, portanto, as únicas soluções permitidas são aquelas para as quais $\psi = 0$ em

$x = \pm\infty$, soluções finitas podem ser obtidas apenas se a energia é restrita à valores quantizados. Tais condições implicam na quantização da energia (níveis de energia permitidos) para o oscilador harmônico,

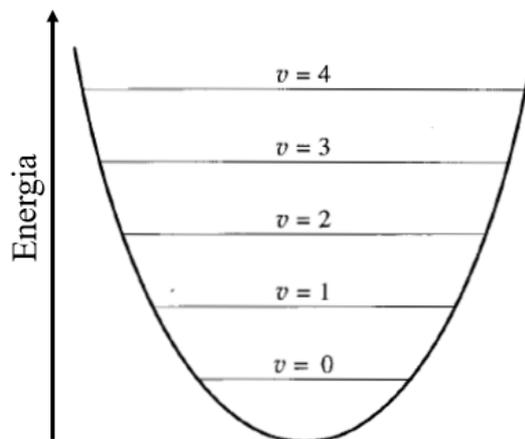
$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad \text{Eq. 13}$$

em que v são números quânticos vibracionais, $v = 0, 1, 2$ etc. e

$$\omega = \left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2} \text{ e } \nu = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2}. \quad \text{Eq. 14}$$

Os níveis de energia obtidos dessa forma estão plotados na figura 3. A diferença de energia entre quaisquer dois estados vibracionais consecutivos é a mesma, e é igual a $\hbar\omega$ ou $h\nu$. O fato desse espaçamento ser uniforme é devido ao potencial quadrático do oscilador harmônico. Também deve ser notado que a energia do estado fundamental, ou seja, o estado com $v = 0$, não é zero, diferentemente do esperado para a energia clássica. Essa energia é chamada de energia do ponto zero do oscilador harmônico e é consequência direta do Princípio da Incerteza.

Figura 3: Os níveis de energia de um oscilador harmônico mecânico-quântico.



Fonte: Adaptado da referência MCQUARRIE e SIMON, 1997.

Se realizarmos a modelagem da função energia potencial de uma molécula diatômica por meio de um oscilador harmônico, os níveis de energia vibracionais da molécula diatômica são dados pela Eq. 13.

Uma molécula diatômica pode fazer uma transição a partir de um estado vibracional para outro por absorção ou emissão de radiação eletromagnética, cuja frequência observada satisfaz a condição de frequência de Bohr, $\Delta E = h\nu_{obs}$. Não iremos provar aqui, mas este modelo só admite transições que ocorram entre estados de energia adjacentes, ou seja, com $\Delta v = \pm 1$ (regra de seleção). Tal condição é chamada de regra de seleção. Assim,

$$\begin{aligned} \Delta E = E_{v+1} - E_v &= \hbar \left(\frac{k}{\mu} \right)^{1/2} \\ \nu_{obs} &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{k}{\mu} \right)^{1/2} \quad \text{ou} \quad \tilde{\nu}_{obs} = \frac{1}{2\pi c} \left(\frac{k}{\mu} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad \text{Eq. 15}$$

em que ν_{obs} é a frequência observada da radiação absorvida, o til informa que as unidades são dadas em inverso do comprimento, normalmente cm^{-1} , e c é a velocidade da luz. Devido ao fato dos estados de energia serem igualmente espaçados, este modelo prevê que o espectro vibracional de uma molécula diatômica é constituído por uma única linha: a frequência vibracional fundamental. Em geral, essa previsão está de acordo com os resultados experimentais e estas frequências correspondem à números de onda na faixa de 10^3 cm^{-1} (região do infravermelho). Também a Eq. 15 permite a obtenção de constantes de força se a frequência vibracional fundamental for conhecida. Constantes de força de molécula diatômicas são da ordem de 10^2 N.m^{-1} .

No caso de moléculas poliatômicas, a equação descrevendo o movimento nuclear para N_C núcleos e N elétrons é dada por

$$\left[-\sum_{\alpha=1}^{N_C} \frac{\hbar^2}{2m_\alpha} \nabla_\alpha^2 + V(R_1, \dots, R_M) \right] \Psi_{nuc} = E_{nuc} \Psi_{nuc}, \quad \text{Eq. 16}$$

em que o primeiro termo é a energia cinética para os núcleos, E_{nuc} é a energia nuclear e R_i são as coordenadas do núcleo i . O potencial, nesse caso, se trata de uma superfície de energia potencial, que pode ser expandido em uma série de Taylor em torno da posição de equilíbrio, (X_0)

$$V = V(X_1^0 \dots X_{3N_c}^0) + \sum_{i=1}^{3N_c} \left. \frac{\partial V}{\partial X_i} \right|_0 \Delta X_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N_c} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_0 \Delta X_i \Delta X_j + \dots \quad \text{Eq. 17}$$

Nessa expressão, o primeiro termo apenas adiciona uma constante à energia E_{nuc} e pode ser ignorado para a maioria dos propósitos de cálculos vibracionais e o segundo termo é zero (derivada do potencial na posição de equilíbrio). Assim, em uma primeira aproximação,

$$V \approx \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N_c} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_0 \Delta X_i \Delta X_j \equiv V(R_1, \dots, R_M) \quad \text{Eq. 18}$$

e as constante de força são dadas por

$$F_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_0 \quad \text{Eq. 19}$$

Uma transformação de coordenadas para as coordenadas ponderadas pela massa $(m_i)^{1/2} \Delta X_i$ seguida por uma rotação para coincidir com o eixo principal dá uma expressão para o potencial contendo apenas termos quadráticos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N_c} \lambda_i Q_i^2, \quad \text{Eq. 20}$$

em que Q_i são as coordenadas relativas aos eixos principais e são chamadas de coordenadas normais.

O resultado das transformações que depende de $3N_c$ variáveis é o desacoplamento em $3N_c$ equações ($3N_c$ osciladores harmônicos independentes e com constantes de força distintos) que dependem de uma única variável. Para uma molécula poliatômica não-linear, seis valores de λ_i são zero, correspondendo à três movimentos translacionais e três rotacionais da molécula inteira.

Existem vários programas de Química Computacional que possuem implementados procedimentos para a obtenção das frequências vibracionais em diferentes níveis de cálculo. Esse tipo de cálculo é realizado com diversos propósitos (AMOS, 1987; HESS, 1986): prever

o espectro na região do infravermelho e o espectro Raman de moléculas (frequências e intensidades), calcular as constantes de força para uma geometria otimizada, identificar a natureza de pontos estacionários na superfície de energia potencial, calcular as correções de energia de ponto zero e térmicas, bem como outras quantidades termodinâmicas de interesse, tais como a entalpia e a entropia do sistema.

Para moléculas que ainda não foram sintetizadas ou caracterizadas, o espectro de infravermelho calculado pode ser armazenado em um banco de dados para auxiliar na posterior de identificação de compostos.

3.2 Estudo de caso ensino de química

“A Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC), ou simplesmente Estudo de Caso, é uma variante do método Aprendizagem Baseada em Problemas (ABP), também conhecido como Problem Based Learning (PBL).” (SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 731). Segundo Yin 2001 apud Ventura (2007, p. 386), o estudo de caso representa uma investigação empírica e compreende um método abrangente, com a lógica do planejamento, da coleta e da análise de dados.

Tão antigo quanto contar histórias, o uso de casos é a instrução pelo uso de narrativas sobre indivíduos enfrentando decisões ou dilemas. Na aplicação deste método o aluno é incentivado a se familiarizar com personagens e circunstâncias mencionados em um caso, de modo a compreender os fatos, valores e contextos nele presentes com o intuito de solucioná-lo. (SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 731).

“Os aspectos conceituais da Química no ensino superior e médio geralmente são apresentados aos alunos de forma a não estabelecer relações com suas origens científicas nem tampouco com o contexto social ou tecnológico.” (LIMA, 2008; SCHNETZLER, 1995 apud PINHEIRO 2010, p. 1996). A renovação de metodologias para o ensino de química motiva também o uso do estudo de caso.

A EEEEC pode ser uma opção satisfatória para o professor que busca adotar atividades em sala de aula que enfatizem a participação ativa do aluno, que relacione o conteúdo específico ao seu contexto de forma problemática e investigativa e que o estimule no desenvolvimento de habilidades importantes. (FREITAS-REIS; DE FARIA, 2015, p. 63).

“O professor, por sua vez, tem o papel de ajudar o estudante a analisar o problema, buscar informações sobre o assunto, considerar suas possíveis soluções” (SÁ E QUEIROZ, 2009, Apud DA SILVA; DE OLIVEIRA; QUEIROZ, 2011, p. 186). O Estudo de caso no ensino superior favorece a independência do discente como possível futuro professor ou pesquisador. Assim, formando o discente para que ele possa compreender e explicar vários fenômenos que, até então, para elesse mostravam estranhos, e muitas vezes, tinham dificuldades em assimilar, tornando o ensino de teorias e praticas diferenciadaa fim de facilitar o ensino e aprendizagem dos discentes. (PINHEIRO 2010).

No estudo de caso, partindo do esquema de classificação de Herreid 1988(SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 732), queclassificam subgrupos por tipos e formatos de estudo de casos, sendo eles: tarefa individual – o caso tem o caráter de uma tarefa que o aluno deve solucionar, que implica na elaboração posterior de uma explicação histórica dos eventos que conduziram à sua resolução[...] (SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 732). [...]aula expositiva: o caso tem a característica de uma história (caso) contada pelo professor aos seus alunos, de maneira muito elaborada e com objetivos específicos(SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 732).[...] de discussão: o caso é apresentado pelo professor como um dilema. Os alunos são questionados a respeito das suas perspectivas e sugestões com relação à resolução do mesmo (SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 732).[...] de atividades em pequenos grupos: os casos são histórias que devem ser solucionadas e dizem respeito ao contexto social e/ou profissional em que os alunos estão imersos(SÁ; FRANCISCO; QUEIROZ, 2007, p. 732).

Para a utilização de um estudo de caso, critérios devem seguidos para que possa ser sanada uma das principais dificuldades do ensino de química, levando em consideração que conceitos de química vêm sendo ensinados tanto no ensino superior quanto médio de maneira a não relacionar estes conteúdos com suas origens científicas, também a relação com o contexto social ou tecnológico tornando assim um obstáculo para a aprendizagem de química (PINHEIRO; MEDEIROS; OLIVEIRA, 2010).

3.2.1 O caso: Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio

Complexos de metais de transição aplicados à síntese orgânica como catalisadores tem crescido bastante nas últimas décadas. Em particular, complexos de Molibdênio tem se mostrado melhores catalisadores para reações de oxidação seletivas de vários substratos orgânicos. Alguns exemplos incluem epoxidação de alquenos, oxiconação, oxidação de compostos contendo enxofre, nitrogênio, fósforo e selênio, principalmente quando combinados com um oxidante moderado (DE CARVALHO et al., 2017).

O Molibdênio é um metal que permite a complexação com vários ligantes, principalmente doadores de oxigênio e enxofre. Os mais comuns são os oxo complexos e, desde a introdução por Mimoun (MIMOUN et. al, 1969) nade complexos do tipo oxo-diperoxo de metais de transição em epoxidação de olefinas, as pesquisa por reagentes deste tipo tem aumentado significativamente. Além disso, estes complexos podem ser regenerados após a reação com o tratamento por um oxidante, como o peróxido de hidrogênio, e pode substituir antigos procedimentos que levam a baixas atividades, baixos rendimentos e/ou seletividades, condições severas de manuseio e purificação laboriosa, produção de subprodutos tóxicos e difíceis de serem removidos da mistura reacional.

Dada a importância de complexos oxo-diperoxo de molibdênio e a escassez de dados teóricos e experimentais sobre seus mecanismos reacionais, o conhecimento da estrutura eletrônica e da estrutura molecular dos complexos $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}^1]$ e $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}^1\text{L}^2]$ é importante para entender seus comportamentos em reações de transferência de oxigênio, como as reações de epoxidação de olefinas e de oxidação de sulfetos, investigação de suas reatividades e quimiosseletividades, podendo auxiliar na determinação dos mecanismos envolvidos em tais reações.

Métodos de Química Computacional podem ser úteis para a compreensão do comportamento de reações de tranferências de oxigênio e podem determinar fatores relevantes que controlam tais reações, o que pode auxiliar na escolha apropriada das condições reacionais que maximizam os produtos desejados e minimizam os subprodutos. Assim, um dos trabalhos desenvolvidos pelo pesquisador e pelo orientador deste trabalho é determinar as estruturas moleculares e obter propriedades relativas à quimiosseletividade de compostos deste tipo, frente à reações de oxidação. A determinação de propriedades espectroscópicas, tais como as frequências vibracionais, também pode auxiliar na atribuição dos espectros

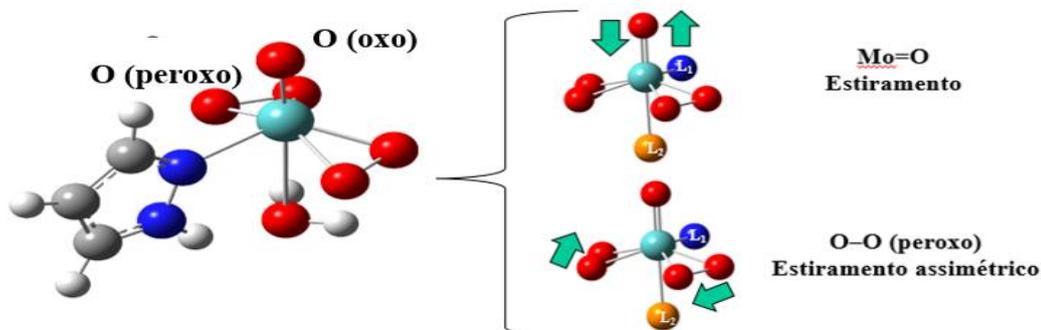
experimentais na região do infravermelho de compostos desse tipo, que podem ser úteis como técnica complementar à caracterização estrutural. Vale ressaltar que a atribuição dos espectros vibracionais experimentais nem sempre é direta, visto que vários grupos de átomos possuem frequências vibracionais similares ou degeneradas, o alargamento dos picos devido às interações intermoleculares, sobreposição de picos, alguns modos não serem ativos na região do infravermelho, entre outros fatores.

Para este trabalho, o seguinte complexo foi estudado: $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol})(\text{H}_2\text{O})]$ (figura 4). Os cálculos foram realizados utilizando o programa Gaussian09. A otimização de geometria e os cálculos de frequências vibracionais foram realizados no nível DFT/LanL2DZ/6-31G*. Os cálculos de frequências vibracionais foram realizados utilizando os procedimentos padrão, cujo modelo que descreve os modos normais de vibração corresponde ao modelo do oscilador harmônico.

A partir dos valores calculados de frequência e intensidade, pode-se obter o espectro vibracional teórico (figura 5) e as atribuições dos modos vibracionais podem ser realizadas também com o auxílio de uma ferramenta computacional implementada no programa Gaussview5.0, que lê as informações obtidas a partir do cálculo contidas em um arquivo de saída e faz uma animação de cada modo vibracional. Algumas das atribuições estão destacadas no gráfico da figura 5.

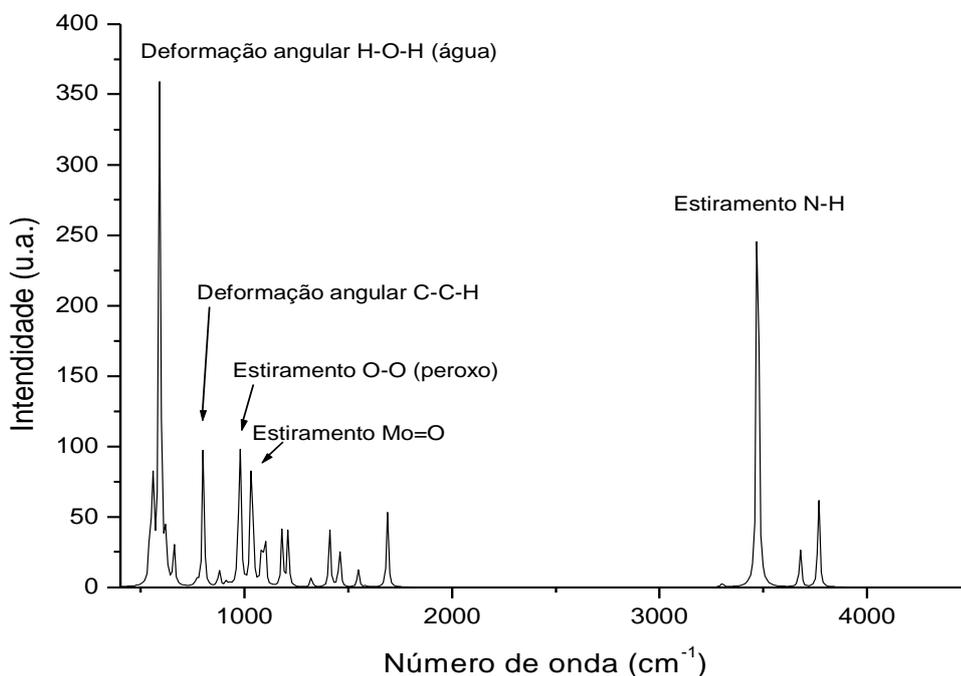
Observa-se da tabela 1 que os cálculos das frequências de estiramento têm erros de cerca de 10% em relação aos resultados obtidos experimentalmente (CASS et al., 2001). Entretanto, para as deformações angulares os erros relativos são maiores. Isso pode ser atribuído às deficiências do conjunto de funções de bases que possuem poucas funções com elevado momento angular, bem como da aproximação harmônica que é menos precisa para deformações angulares de baixas frequências.

Figura 4: Geometria otimizada do complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol})(\text{H}_2\text{O})]$. Do lado esquerdo está uma representação do complexo cujo ligante L^1 está coordenado na posição equatorial ou syn (eq) em relação ao grupo oxo e o ligante L^2 na posição axial (ax) e alguns de seus modos vibracionais.



Fonte: Adaptado da referência DE SOUZA et al., 2015.

Figura 5: Espectro na região do infravermelho calculado no nível B3LYP/LanL2DZ/6-31G* para o complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol,eq})(\text{H}_2\text{O,ax})]$.



Fonte: DE SOUZA et al., 2015.

Tabela 1: Frequências vibracionais selecionadas (cm^{-1}) com suas correspondentes intensidades (km/mol) obtidas com diferentes esquemas de cálculo (diferentes funcionais da densidade, X) X/LanL2DZ/6-31G* para o complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol,eq})(\text{H}_2\text{O,ax})]$.

	N_{calc}	I_{calc}	v_{calc}	I_{calc}	v_{calc}	I_{calc}
	B3LYP		M06-2X		PBE1PBE	
Estiramento N–H	3474 (4,7%)	411	3514 (5,9%)	414	3496 (5,4%)	425
Estiramento Mo=O	1034 (8,3%)	131	1098 (15,0%)	116	1057 (10,7%)	146
Estiramento O–O (peroxo) assimétrico	976 (12,0%)	109	1051 (20,1%)	119	1022 (17,3%)	112
Deformação angular C-C-H assimétrico	801 (31%)	98	793 (30,0%)	132	811 (33,0%)	100
Deformação angular H-O-H (água)	592 (15,4%)	412	643 (24,1%)	462	576 (11,2%)	80

Fonte: Adaptado da referência (SILVA, 2004).

3.3 O ensino de química quântica

“A mecânica quântica é considerada uma das maiores realizações intelectuais do século passado”. (ARROIO et al., 2005, p 360). Sendo de grande importância para uma compreensão mais ampla do mundo. Assim, a necessidade da mesma ser transmitida e aprendida pelos estudantes de áreas afins é cada vez maior, visto que para o entendimento de fenômenos e sistemas, previsão de propriedades e design de novos materiais com funcionalidades específicas, a compreensão dos conceitos envolvidos com essa área da Química/Física é fundamental. “Contudo, uma característica da química quântica que a torna particularmente complexa para os alunos, é a necessidade de se compreender conceitos abstratos”. (ARROIO et al., 2005, p 360). Além da dificuldade conceitual, a compreensão perpassa por dificuldades devido ao uso constante de formulações matemáticas, necessárias para o entendimento básico dessa ciência. Segundo Freitas (1998 apud DE FARIAS RAMOS; SERRANO, [s. d.] p 2) “[...] as dificuldades matemáticas encontradas na solução das equações da mecânica quântica, em especial, as soluções da equação de Schrödinger, impediram avanços mais significativos desde a década de 1930”. A gravidade deste problema assume dimensões ainda maiores nos casos em que os alunos de tal disciplina são estudantes de cursos de licenciatura e, portanto, serão professores que terão de ensinar conceitos relacionados à estrutura atômica aos alunos de Ensino Médio (ARROIO et al., 2005). Por estes motivos, surge a necessidade de um aperfeiçoamento didático que auxilie no ensino de química quântica.

[...] várias propostas didáticas diferentes têm aparecido. Assim, centrando-nos especificamente nos principais anos do ensino universitário e nos cursos de formação de professores, encontramos propostas focadas em discussões conceituais, em discussões filosóficas, em abordagens históricas, no uso de experiências relevantes para aprofundar aspectos conceituais fundamentais e no uso (portanto, desenvolvimento) de *softwares* especiais, tanto para aprimorar a visualização de certos conteúdos de física clássica, necessários à compreensão de MQ, quanto para explorar características quânticas de sistemas microscópicos. (FREIRE JR; PESSOA JR; BROMBERG, 2011, p. 358).

Para a utilização de uma didática própria para o ensino de química quântica, é necessário averiguar os possíveis tipos de dificuldades encontradas pelos alunos. Segundo Freire Jr; Pessoa Jr; Bromberg (2011 apud Ramos et al., 2016, p. 2028) “[...] um dos obstáculos enfrentados pelos discentes [...] está na dificuldade em transitar nos diferentes níveis de representação desta Ciência, o que é base e essencial para seu desenvolvimento e compreensão”.

No nível macroscópico, os processos químicos são observáveis. No nível microscópico, os fenômenos químicos são explicados em termos de arranjo e movimento de moléculas, átomos ou partículas subatômicas. Quanto ao nível simbólico, é representado por símbolos, números, fórmulas, equações e estruturas. (RAMOS, 2016, p. 2028).

No ensino de química quântica, essa dificuldade de transição se dá devido ao estudo dessa área se fixar principalmente nos níveis de representação microscópico e simbólico.

Quanto mais as ciências físicas progredirem, mais elas tendem a entrar no domínio da Matemática, que é um tipo de centro para onde elas convergem. Nós podemos julgar o grau de perfeição que a ciência tem alcançado, pela facilidade com que ela pode ser submetida a CÁLCULO. (QUETELET, 1828 apud MORGON, 2001, p. 676).

“Embora o formalismo não deva ser negligenciado para quem deseja se aprofundar na Química Quântica” (LEAL, 2010 p. 1211), é curto o tempo disponível nos cursos para sua exposição, para a grande maioria dos futuros licenciados em química (LEAL, 2010). Deve favorecer, portanto, uma exposição de uma química quântica mais conceitual, podendo agregar mais valor em um curso de formação de professores na área de química. A utilização de *softwares* pode também facilitar o entendimento do discente em nível de representação microscópica já que são conceitos que são estranhos ao senso comum e de uma difícil visualização quando deixado apenas para o campo da imaginação.

Entender esse conceito é grande importância para a formação profissional no curso de química, visto que a compreensão de diversos fenômenos químicos e físicos cotidianos, desde a compreensão das cores da natureza ao nosso redor, até ao entendimento de técnicas amplamente utilizadas para caracterização de compostos, diagnósticos médicos, dispositivos eletrônicos, materiais funcionalizados, composição das estrelas e do universo como um todo e, conseqüentemente, perpassa pela aprendizagem de Química Quântica. “Os alunos de graduação geralmente encontram em disciplinas de Físico-Química dificuldade, em particular, para entender os conceitos envolvidos na espectroscopia.” (SALA, 2007, p. 1773). Nesse contexto um curso superior em química precisa de uma reestruturação nas didáticas de ensino para que esta facilite o processo de ensino aprendizagem.

3.4 Mapa conceitual

“Os mapas conceituais têm por objetivo representar relações significativas entre conceitos na forma de proposições. Uma proposição é constituída de dois ou mais termos conceituais unidos por palavras para formar uma unidade semântica.”(NOVAK; GOWIN, 1988apud PELIZZARI et al., 2002 p. 41).“Na diferenciação progressiva, o aluno é capaz de atribuir novos significados aos conceitos mais inclusivos, e, em seguida, relacionar as novas ideias com outros conceitos cada vez mais diferenciados.”(BARBOSA et al.,2005, p. 2).O mapeamento conceitual é uma técnica muito flexível e, em razão disso, pode ser usado em diversas situações, para diferentes finalidades, tais como: instrumento de análise do currículo, técnica didática, recurso de aprendizagem e meio de avaliação (MOREIRA; BUCHWEITZ, 1993).

Na literatura que está disponível sobre mapas conceituais, autores como Moreira; Rosa(1986)discutem que o mapa conceitual não tem regras fixas nem formas corretas, e pode ser desenvolvido de várias formas, atendendo a diferentes critérios – o importante seria a relação entre os conceitos. Nesse ponto,Tavares(2007)vai além no seu trabalho e elabora uma divisão de estilos de mapas conceituais,dividindo-os em vários tipos e também os relacionando com suas características que tornam mais adequados para determinados processos tanto avaliativos quanto para a o ensino, mostrando bem a versatilidade e a variedade da estruturação de um mapa conceitual(Tabela 2).

As falhas nos principais instrumentos avaliativos do processo de ensino e aprendizagem são principalmente atribuídas a uma tendência behaviorista, em que são

exigidas a confirmação do saber do discente de forma muito pontual, baseados no certo e no errado, comportamentalista, e cuja a aprendizagem se torna demasiadamente mecânica (MOREIRA 1982). Assim, formas alternativas de avaliar, visando buscar meios de mensurar a compreensão de conceitos e o significado dos mesmos para o discente se faz necessária. Nesse contexto, vale ser investigado como está se dando a aprendizagem significativa.

Tabela 2:Elucidação dos mais diversos tipos de mapas conceituais de acordo com Tavares 2007.

ESTILO	DESCRIÇÃO
Mapa conceitual do tipo teia de aranha	É organizado colocando-se o conceito central (ou gerador) no meio do mapa. Os demais conceitos vão se irradiando à medida em que se afastam do centro.
Mapa conceitual tipo fluxograma	Organiza a informação de uma maneira linear. Ele é utilizado para mostrar passo a passo determinado procedimento, e normalmente inclui um ponto inicial e um ponto final. Um fluxograma é normalmente usado para melhorar a performance de um procedimento.
Mapa conceitual tipo sistema entrada e saída	Organiza a informação num formato que é semelhante ao fluxograma, mas com o acréscimo da imposição das possibilidades "entrada" e "saída".
Mapa conceitual hierárquico	A informação é apresentada numa ordem descendente de importância. A informação mais importante (inclusiva) é colocada na parte superior. Um mapa hierárquico é usado para fornecer informação sobre um procedimento.

Como o mapa conceitual consegue investigar relações hierárquicas entre conceitos, pode ser também utilizado para se ter uma visão de como está ocorrendo a organização de ideias ou conceitos pelo discente respeito de um determinado conteúdo. Essa é uma nova perspectiva de avaliação pouco usual e tradicional, e mais qualitativa, mas que pode ser de grande valor para o aperfeiçoamento das metodologias do docente(MOREIRA;ROSA, 1986). Compreender como se forma a informação no subjetivo de um a aluno parece uma tarefa complicada, mas com a utilização de ferramentas cognitivas, tal como o uso de mapa conceitual, o docente é capaz de ter uma visão mais próxima da realidade do que com a utilização de instrumentos de avaliação pontuais,tais como provas, que não fornecem esse tipo de informação de modo que possa ser, de fato, utilizada pelo docente para melhorar a aprendizagem na sua disciplina.

Para utilizar deste tipo de instrumento, é preciso conhecê-lo bem para que seja feita uma análise eficaz da informação que lhe está sendo apresentada. Mapas conceituais devem ser hierárquicos e devem seguir de conceitos mais gerais a conceitos mais específicos(PELIZZARI et al., 2002). O ponto de partida do qual o mapa pode ser elaborado pode mudar de acordo com o conhecimento prévio do aluno e das dificuldades e do ineditismo (NOVAK 2010). A comparação de uma mapa conceitual feito por um especialista com o de um aluno pode ser um recurso válido para a avaliação a partir de mapas conceituais. Segundo NOVAK,(2010) existem recursos que facilitam essa comparação como *CmapTools*, permite a comparação entre mapas conceituais.

4

METODOLOGIA

Este trabalho de pesquisa foi aplicado no Centro Acadêmico do Agreste da Universidade Federal de Pernambuco, especificamente, no que tange o curso de Química-Licenciatura, durante o segundo semestre do ano de 2017. Os sujeitos da pesquisa foram os discentes de tal curso, matriculados na disciplina de Introdução à Química Quântica.

Para se obter informações completas da compreensão do entendimento e da correlação entre conceitos de química quântica por parte do aluno com a utilização da estratégia de ensino estudo de caso proposto, fez-se necessário a utilização de um meio de avaliação que investigasse qualitativamente esses aspectos. Nesse sentido, o mapa conceitual foi escolhido como instrumento de avaliação, pois ao utilizá-lo, o aluno é avaliado de forma que todo o processo de aprendizagem seja “fotografado” naquele dado instante, para compreender como subjetivamente cada aluno entende e relaciona os conceitos. Para isso, foi necessário seguir alguns critérios e algum rigor para que os dados fossem coletados de forma a diminuir erros que impossibilitassem sua análise.

Com relação aos discentes:

- Antes da aplicação do estudo de caso, o aluno estava ciente que de iria construir um mapa conceitual.
- Foi realizada uma aula para que os critérios principais para a construção do mapa conceitual fossem ensinados, principalmente a importância do termo de “ligação”.
- O aluno teve um momento após a construção do mapa para sanar as dúvidas e remontá-lo, caso desejasse.

Com relação ao docente responsável por ministrar aulas à disciplina no semestre em questão:

- Para guiar as perguntas a serem feitas para os alunos através do mapa conceitual e também para melhor identificar dificuldades recorrentes, foi realizada uma entrevista com o professor da disciplina de Introdução à Química Quântica para que fossem relatadas algumas das mais prováveis dificuldades mencionadas pelos alunos e percebidas pelo mesmo.
- Também foi pedido ao docente que produzisse um mapa conceitual contendo os objetivos que desejaria alcançar através da realização da estratégia do estudo de caso. Neste mapa, o docente teve que mostrar uma hierarquia do que espera que o discente alcance através dessa metodologia.
- O mapa conceitual feito pelo docente pode auxiliar na determinação do sucesso ou insucesso do objetivo da estratégia a ser alcançado, mas também na identificação da correlação ou mesmo a hierarquia entre os conceitos que estão sendo de fato compreendidos pelos discentes.

Assim, várias etapas guiaram a utilização da estratégia de ensino estudo de caso proposto por meio do mapa conceitual (Tabela 3), tais como entrevista com o professor da disciplina, elaboração das perguntas com o professor que irão constar no mapa conceitual, aulas teóricas sobre oscilador harmônico (ministrada pelo professor), aula sobre construção do mapa conceitual (ministrada pelo pesquisador), estudo do caso (realizado por meio do texto – Apêndice A) e construção do mapa conceitual (orientada pelo pesquisador), e, por fim, análise dos resultados obtidos, conforme descritas mais adiante. Estas etapas auxiliarão na proposição de uma melhor abordagem para a aprendizagem contextualizada de conceitos relacionados à Química Quântica.

A pesquisa realizada neste trabalho, portanto, é caráter qualitativo, pois foram realizadas coletas de informações subjetivas, nas quais foram investigados os significados e a compreensão da utilidade de conceitos, e, portanto, não poderiam ser quantificados (MINAYO, 1995, p. 21-22)).

Tabela 3: Etapas que guiarão a aplicação da metodologia proposta nesse projeto.

ETAPAS	DESCRIÇÃO
Etapa 1	Entrevista com o professor da disciplina sobre as dificuldades encontradas na disciplina pelos alunos e percebidas por ele, elaboração das perguntas a serem feitas pelos alunos para o mapa conceitual, construção do mapa conceitual esperado por ele.
Etapa 2 (Aula 1)	O professor da disciplina irá ministrar a aula sobre oscilador harmônico
Etapa 3 (Aula 2)	O pesquisador irá ministrar uma aula sobre a construção do mapa conceitual
Etapa 4 (Aula 3)	Entrega do texto que contém o Caso a ser estudado, construção do mapa conceitual, reconstrução do mapa conceitual após sanar as dúvidas dos alunos.
Etapa 5	Análise dos resultados obtidos e proposição de estratégia para o ensino dos conceitos envolvidos

5

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo estão descritos os principais resultados obtidos ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Na seção 5.1 está apresentado como foi proposto e elaborado o texto para o estudo de caso. Na seção 5.2 está brevemente discutido como foi ministrada a aula sobre mapa conceitual e quais aspectos foram abordados. Na seção 5.3 está descrita a pergunta que guiou a construção do mapa conceitual, bem como um mapa conceitual que foi utilizado para comparação com os mapas construídos pelos estudantes, discutidos na seção 5.4. Na seção 5.5 encontra-se uma análise preliminar utilizando ferramentas de estatística de redes complexas e adaptada para análise dos mapas conceituais.

5.1 Estudo de Caso

O texto para o estudo de caso intitulado "*Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio*" foi preparado baseado nos conhecimentos adquiridos e de alguns resultados obtidos durante o desenvolvimento dos projetos de Iniciação Científica PIBIC/PROPESQ/UFPE orientados pela professora também orientadora desse trabalho: “Quimiosseletividade de Complexos Oxo-Diperoxo de Molibdênio”, concluído em 2015, “Quimiosseletividade de Complexos Oxo-Diperoxo de Molibdênio frente ao substrato metilvinilsulfeto”, concluído em 2016 e “Influência das energias de complexação na estrutura molecular e nas propriedades termodinâmicas de complexos oxodiperoxo de Mo, W e Re”, concluído em 2017. O desenvolvimento destes trabalhos despertou o interesse em utilizar temas atuais e de pesquisas científicas recentes em metodologias voltadas para o ensino de Química, o que levou a proposição do referido caso para o ensino de Química Quântica, com o objetivo de verificar como se dá a construção e organização do conhecimento dos discentes, para auxiliar na proposição de abordagens mais eficientes.

No apêndice A encontra-se o referido texto, que tratou basicamente da definição do complexo escolhido para o estudo de caso, de suas principais aplicações, sobre o uso de métodos de química computacional para a obtenção de estruturas moleculares e propriedades espectroscópicas vibracionais. Por fim, é apresentado um espectro vibracional teórico e discutida as atribuições dos modos vibracionais.

O estudo desse caso foi iniciado pelos estudantes uma semana antes da solicitação da construção do mapa conceitual para responder a pergunta “Como o modelo do oscilador Harmônico Quântico se relaciona com o espectro vibracional?”, com a entrega do texto e leitura e reflexão individual em casa.

5.2 Aulas sobre como construir mapas conceituais

A aula sobre mapa conceitual foi preparada com auxílio do programa PowerPoint (Apêndice B) e ministrada por meio de datashow, focando nos aspectos mais importantes para a construção um mapa conceitual, baseado no que já foi dito e referenciado neste trabalho. Durante a aula, foram abordados pontos como a importância de se ter uma direção (as setas) no mapa e o uso do conector entre os conceitos que os relaciona e torna clara a ideia que se queira transparecer. Quanto aos tipos de mapas que foram brevemente explicados e discutidos na aula, foi deixado claro que ficaria a critério de cada aluno qual eles iriam utilizar.

Além disso, durante essa aula foi proposta a construção de um mapa conceitual simples, cujo tema e tipo do mapa foi escolhido pelos próprios estudantes, orientados pelo pesquisador, de forma que os estudantes pudessem praticar e sanar suas dúvidas sobre a construção de um mapa conceitual. Assim, essa aula foi uma etapa de extrema importância, visto que alguns estudantes nunca haviam construído um mapa conceitual. De fato, sem essa aula, incluindo a orientação prática de construção de um mapa, nossa análise teria se tornado inviável, visto que os dados poderiam estar mascarados pelo não conhecimento ou por falhas na aplicação desse método que impediriam a validação de nossos resultados.

5.3 Construção do mapa conceitual espelho a partir da pergunta proposta nesse trabalho

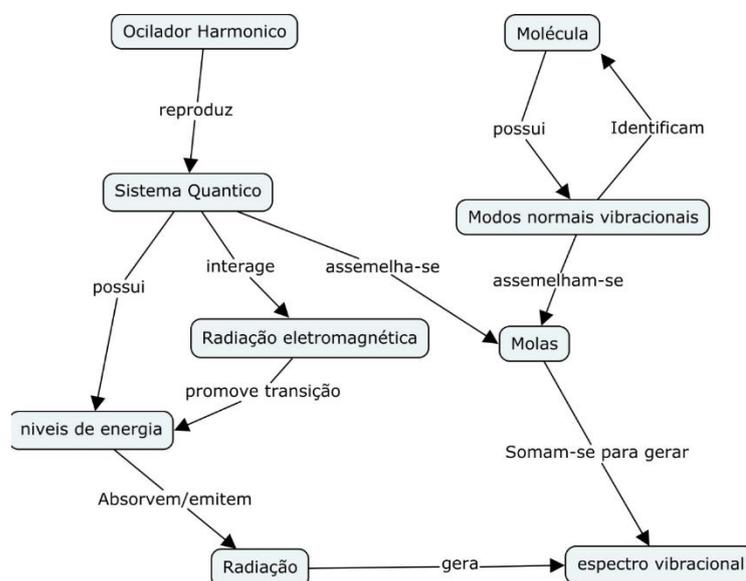
A proposta desse trabalho é que a pergunta “Como o modelo do oscilador Harmônico Quântico se relaciona com o espectro vibracional?” fosse respondida por meio da construção de um mapa conceitual.

Essa pergunta foi pensada de modo que pudesse levar os estudantes a conectar os conceitos aprendidos na disciplina de Introdução à Química Quântica e com o caso apresentado a eles, que tratava de um problema científico real.

Além disso, os estudos poderiam relacionar os conceitos envolvidos nesta atividade com os já adquiridos em outras disciplinas, tais como Química Orgânica, Química Inorgânica e Química Analítica, visto que o caso proposto trata de um composto de coordenação bastante utilizado na oxidação de substratos orgânicos e para a caracterização das espécies ativas em reações desse tipo, tais como a utilização da técnica de espectroscopia vibracional e/ou previsão do espectro vibracional teórico e conceitos físico-químicos também.

Quanto à forma no qual a pergunta focal foi apresentada, Xavier (2015) pontua que quando esta é começada com o advérbio de modo "Como" estimula um pensamento dinâmico, o que aumenta a tendência de o mapa conceitual conter proposições dinâmicas, ou seja, àquelas relacionadas com causa e consequência.

Figura 6: Mapa conceitual mínimo construído em conjunto pelo pesquisador e pela orientadora desse trabalho para responder à pergunta focal.



Baseado nas experiências e dificuldades de turmas anteriores e nos conceitos mínimos que poderiam ser utilizados para responder a pergunta focal, foi construído pelo pesquisador e a orientadora deste trabalho um espelho do mapa, mostrado na figura 6, para comparação com os mapas que seriam construídos pelos estudantes.

Este mapa mostra que para que a pergunta seja respondida com o mínimo de conceitos e relações entre eles, os pesquisadores desse trabalho partem da ideia de que o oscilador harmônico pode reproduzir um sistema quântico, que possui níveis de energia (quantizado). Esse sistema pode ser uma molécula que vibra, que é caracterizada a partir de seus modos normais vibracionais (e vice-versa, identificam a molécula), que se assemelham a um conjunto de molas, que se somam para gerar o espectro vibracional.

Uma vez que esse sistema interage com a radiação eletromagnética, promove a transição entre níveis de energia, por meio da absorção. A consequente emissão se dá por meio de radiação eletromagnética que, com o uso de detectores e equipamentos apropriados, gera o espectro vibracional.

Vale ressaltar que um mapa conceitual que responda a uma pergunta não é único, visto que outras formas de expressar essa ideia poderiam ser utilizadas, mostrando apenas de que forma estão organizados os conhecimentos e são expressas as ideias.

5.4 Análise dos mapas conceituais construídos pelos discentes.

Após a entrega do texto aos estudantes uma semana antes e leitura e reflexão em casa, e após a aula sobre construção de mapa conceitual, foi solicitado aos estudantes que construíssem um mapa conceitual para responder à pergunta discutida na seção 5.3. Ao todo, 19 estudantes da disciplina de Introdução à Química Quântica participaram dessa etapa.

A análise dos mapas conceituais produzidos pelos estudantes realizada nesse trabalho está baseada na análise de proposições estáticas e dinâmicas (XAVIER, 2015), na relação entre conceitos e vizinhança e no número de conectores entre conceitos, ou seja, se existem muitos conectores (longe), o discente não vê uma relação direta entre tais conceitos, ou ele entende que existe uma relação, mas não está clara como. Alguns aspectos foram analisados comparando-se com o espelho, preparado pelos pesquisadores desse trabalho e discutido na

seção 5.3, que reflete o mínimo de relações entre os conceitos que devem estar presentes que respondam à pergunta focal.

De modo geral, a maioria dos mapas foram do tipo fluxograma, que, Segundo Tavares (2007), traz como características positivas a fácil leitura das informações, que estão organizadas de uma maneira lógica e sequencial, o que pode facilitar na organização sistemática da resposta, e características negativas, que, na ausência de pensamento crítico, normalmente se apresenta de forma incompleta quanto à exposição do tema. Tavares ainda enfatiza que esse tipo de mapa é bastante utilizado para explicitar um processo, sem a preocupação de explicar determinado tema. Alguns exemplos, podem ser vistos nas figuras 9, 10, 11, 20, 22 e 23, que mostram mapas construídos nesse formato. Entretanto, entre esses, apenas o mapa da figura 23 responde completamente à pergunta focal e os mapas das figuras 20 e 22, respondem parcialmente. Apenas dois mapas foram construídos do tipo hierárquico (figuras 12 e 18), no qual o aluno que construiu o mapa da figura 18 não conseguiu responder à pergunta focal. Também foram construídos 3 mapas conceituais do tipo de entrada e saída (figuras 1, 24 e 25), que respondem, pelo menos parcialmente, à pergunta focal e 1 do tipo teia de aranha (figura 8).

Também é observado que os mapas apresentaram um pequeno número de proposições estáticas, ou seja, aquelas proposições que representam relações descritivas, com o objetivo de definir ou e/ou descrever objetos ou eventos. Esse tipo de proposição é estabelecida com a utilização de verbos, que na maioria das vezes, não definem ações, tais como os verbos, ser, estar e ter (XAVIER, 2015). Assim, proposições estáticas devem levar à uma estruturação hierárquica conceitual. Entretanto, a característica que leva mapas à serem representados na parte superior com conceitos mais abrangentes para conceitos mais específicos localizados nas partes mais inferiores dos mapas, consequência do uso de proposições estáticas, também é observado em praticamente todos os mapas conceituais analisados.

Outro aspecto analisado foi quanto às proposições dinâmicas, que podem representar, por exemplo, relações de causa e consequência (XAVIER, 2015; DERBENTSEVA et al., 2015) ou correlações e probabilidades (THAGARD, 1992). De fato, percebe-se que a grande maioria dos mapas analisados apresenta esse tipo de proposição como dominantes. Isso pode estar associado à escolha da pergunta que começa com o advérbio “Como”, levando à correlações e relações de causa e consequência para explicar como se dá determinado processo. Por exemplo, analisando os mapas mostrados nas figuras 7 e 10, observa-se o uso do verbo “causar”, nas figuras 9, 11, 13, 15, 16, 21, 19 e 20, o verbo “relacionar”.

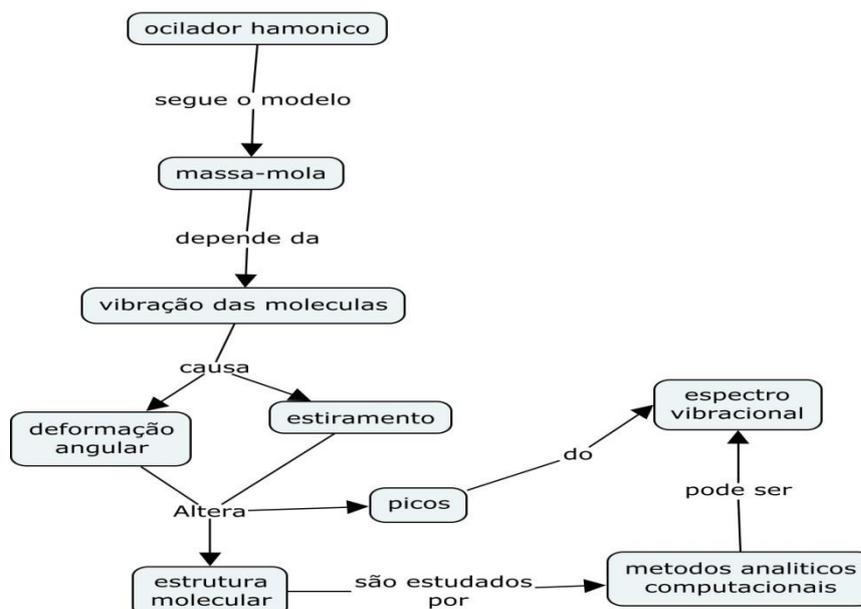
Em média, foram necessárias, um mínimo de 3 conectores para se chegar no conceito de espectro vibracional partindo do conceito de oscilador harmônico, dentre os mapas que apresentavam explicitamente as palavras chaves oscilador e espectro. Em comparação com o mapa espelho (figura 6), que utiliza 4 conexões entre esses conceitos, esse número mostra que, em média, os estudantes conseguem ver um número relativamente adequado de conexões com outros conceitos para se chegar no espectro vibracional.

Outra questão que pode ser notada é que mais de 79% dos mapas analisados partem do conceito de oscilador harmônico, sendo esse um conceito obrigatório para a resposta à pergunta. Os mapas das figuras 14 e 19, entretanto, partem do complexo (composto em questão) e os mapas das figuras 11 e 16, dos conceitos de vibrações moleculares e espectro vibracional, respectivamente. Destaque para os mapas das figuras 19 e 20, que apresentam hierarquia similar para os conceitos de oscilador harmônico e espectro vibracional. Entretanto, vale ressaltar aqui que a relação a reprodução do sistema quântico pelo modelo do oscilador harmônico, prevista no mapa espelho (figura 6) praticamente não foi observada nos mapas analisados.

Análises adicionais foram realizadas com relação à características específicas observadas individualmente nos mapas. A seguir, algumas observações são descritas.

Com relação ao tipo de mapa conceitual, o aluno 1 (A1) construiu um mapa do tipo entrada e saída. Segundo Tavares (2007), embora esse tipo de mapa apresente várias relações entre os conceitos, no qual o aluno pretende explicar a transformação dos conceitos em algo acabado, nesse caso, o espectro vibracional, pode ser difícil de lê-lo. Nesse mapa específico, o aluno tenta conectar o conceito de oscilador harmônico com espectro vibracional elencando vários conceitos conectados. Entretanto, vale ressaltar que esse estudante não utilizou conceitos quânticos, tais como níveis de energia, interação da radiação com a matéria, absorção/emissão de radiação para explicar a relação entre o modelo oscilador harmônico quântico e o espectro vibracional experimental, o que deixa o mapa incompleto do ponto de vista conceitual.

A tabela 4 mostra as unidades semânticas formadas a partir das proposições apresentadas no mapa da figura 7 e algumas análises.

Figura 7: Mapa conceitual construído pelo aluno A1.**Tabela 4:** Análise das unidades semânticas formadas a partir das proposições apresentadas no mapa da figura 7.

Oscilar Harmônico "segue o modelo" Massa mola	O aluno consegue relacionar o modelo do oscilador hamônico com o modelo massa mola da física trazendo essa relação para a disciplina de forma benéfica
Massa mola "depende da" Vibração das moléculas	Relação confusa
Vibração das moléculas "causa" deformação angular e estiramento	Nessa relação o aluno está correto
Deformação angular "altera" Estrutura molecular	Nessa relação o aluno está correto
Estiramento "altera" Estrutura molecular	Nessa relação o aluno está correto
Estrutura molecular "são estudados por" Métodos analíticos computacionais	O aluno quis dizer que podem ser estudadas ou obtidas por métodos de química computacional
Métodos analíticos computacionais "podem ser" espectro vibracional	Nesse caso, a conjugação verbal "podem obter" deveria ser utilizada ao invés de "podem ser".
Picos "do" espectro vibracional	Nesse caso, o verbo alterar, que leva à "picos" foi utilizado de forma errada, visto que deformações angulares e estiramentos "levam" à "picos", uma vez que haja interação da radiação com a matéria e posterior detecção da radiação emitida.

O mapa da figura 8 mostra um mapa conceitual do tipo teia de aranha, cujo foco principal foi a irradiação das relações conceituais a partir de um conceito central (oscilador harmônico), que se relacionam através de conectores com outros 7 conceitos. Entretanto, esse

tipo de mapa pode causar falta de clareza na opinião e na relação hierárquica dos vários conceitos com o conceito central (TAVARES, 2007). É observado que na relação que o aluno faz de oscilador harmônico e espectro vibracional teórico faltam conceitos importantes para mostrar suas relações. Comparando-se esse mapa com o mapa construído pelo pesquisador e pela professora da disciplina, observa-se que existem dois caminhos para interligar esse conceito: no primeiro, o oscilador harmônico reproduz um sistema quântico, que podem ser explicados por modelos massa-mola para que a soma dessas resulte em um espectro vibracional. No outro, é feita a relação de que sistemas quânticos possuem níveis de energia e interagem com radiação, e essa interação promove transição entre os níveis de energia, que posteriormente leva à emissão de radiação para gerar o espectro vibracional. Assim, nesse caso do mapa da figura 8, durante a análise de cada sentença ou unidade semântica formada por meio das proposições, observa-se a falta de conceitos para interligar o conceito central com os demais, o que torna o mapa incompleto no que diz respeito à resposta da pergunta focal proposta. A tabela 5 mostra uma análise de cada uma das correlações entre conceitos que podem ser vistas nesse mapa.

Figura 8: Mapa conceitual construído pelo aluno A2.

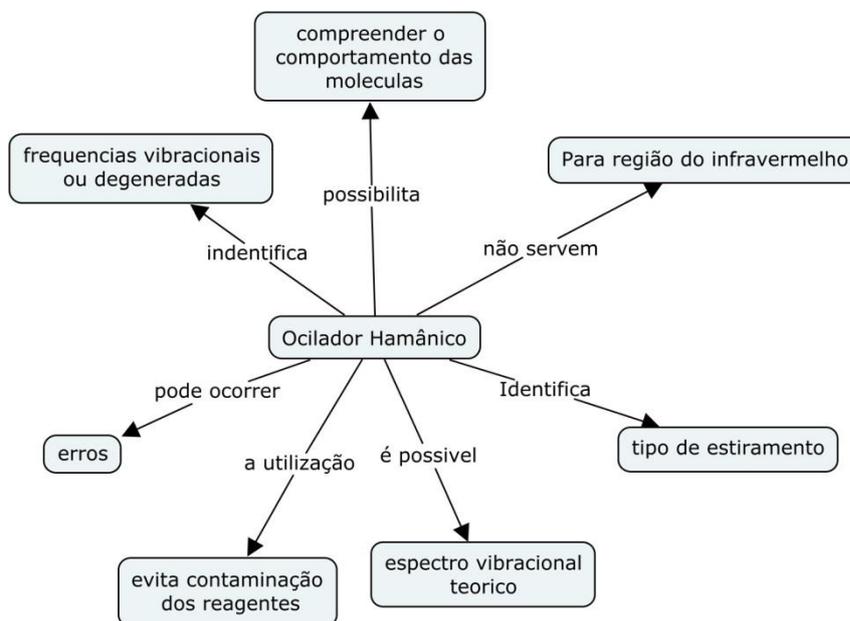


Tabela 5: Análise das unidades semânticas formadas a partir das proposições apresentadas no mapa da figura 8.

Oscilador Harmônico possibilita compreender o comportamento das Moléculas.	Nessa sentença, o aluno deixa claro que o modelo auxilia no entendimento de moléculas, mas deixa a desejar quais aspectos o modelo ajuda a vibração molecular.
Oscilador harmônico não servem para região do infravermelho.	Nesse caso, há um desconhecimento ou não está claro quais a regiões do espectro eletromagnético podem ser utilizadas para investigar a matéria.
Oscilador harmônico identifica tipo de estiramento.	Nesse caso, o estudante não deixou claro que com o uso do modelo do oscilador harmônico e a utilização de métodos computacionais, a atribuição dos modos normais vibracionais pode ser realizada inequivocamente.
Oscilador harmônico é possível espectro vibracional teórico.	Nessa caso, o aluno relaciona oscilador harmônico à espectro vibracional teórico, mas com o uso de um conector que não dá sentido a sua relação proposta. Mesmo com isso, ainda percebesse a falta de conceitos quando comparados com o mapa conceitual construído pela professora da disciplina.
Oscilador harmônico a utilização evita contaminação dos reagentes.	Nessa relação, percebe-se a utilização de conhecimentos prévios, adquiridos em disciplinas de cunho experimental, para verificar que no caso da obtenção de espectros utilizando métodos de química computacional, se evita a contaminação por outros reagentes, visto que apenas a molécula de interesse é utilizada.
Oscilador harmônico pode ocorrer erros.	Nessa relação, pode-se notar que o estudante conhece que o modelo utiliza aproximações para a descrição do potencial vibracional de moléculas e, portanto, existem erros associados ao seu uso.
Oscilador harmônico identificam frequências vibracionais ou degeneradas.	Nesse caso, o estudante faz confusão entre o conceito de estados degenerados e a diferença de energia entre quaisquer dois estados vibracionais adjacentes de um oscilador harmônico quântico seja sempre o mesmo, mas isso não parece claro para ele.

O mapa conceitual mostrado na figura 9 é do tipo fluxograma, como já mencionado anteriormente. Observa-se nesse mapa que vários conceitos básicos não foram levados em

consideração (compare com o mapa espelho, figura 6). Além disso, a aluna tenta relacionar interação eletromagnética com ligação química, visto a relação com reações fotoquímicas, excitações etc., mas deixou o sentido da sentença vago. No mapa espelho (figura 6), pode-se ver que há uma interligação do sistema quântico com o modelo do oscilador harmônico quântico, que, por sua vez, interage com a radiação eletromagnética promovendo transição entre os níveis de energia. Vale ressaltar também nesse mapa que o próprio modelo do oscilador harmônico quântico não foi citado nenhuma vez. Assim, esse mapa não responde à pergunta focal. Entretanto, percebe-se que o aluno conhece que nem todos os modos normais vibracionais são ativos ou observados por meio das técnicas de espectroscopia vibracional na região do infravermelho. O estudante ainda explica que, para ser observado, é necessário que haja modificação do momento de dipolo da molécula, embora também a frase esteja escrita de forma confusa.

Análise similar pode ser feita do mapa mostrado na figura 10. Entretanto, embora a ideia central esteja presente, ele está incompleto, visto que não responde à pergunta proposta. Esse mapa deixou claro que o aluno não obteve o entendimento de que o oscilador harmônico é um modelo que faz aproximações e utiliza de conceitos e leis da física para explicar a relação deste modelo com o espectro vibracional. Por exemplo, observa-se o uso errado do conector “causa” para relacionar esse conceito com os conceitos de estiramento e deformação angular, visto que o próprio oscilador harmônico sofre estiramento ou deformação angular.

Figura 9: Mapa conceitual construído pelo aluno A3.

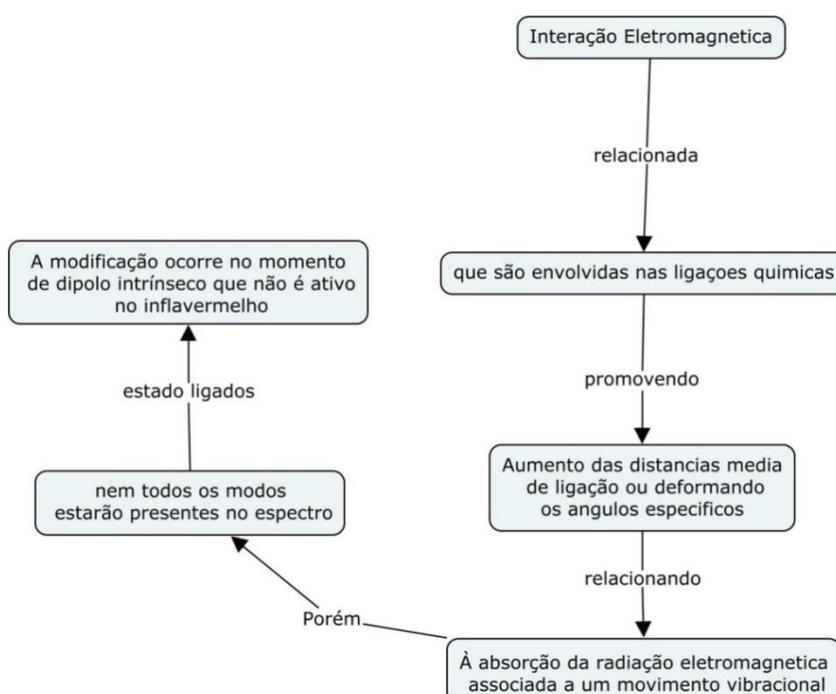
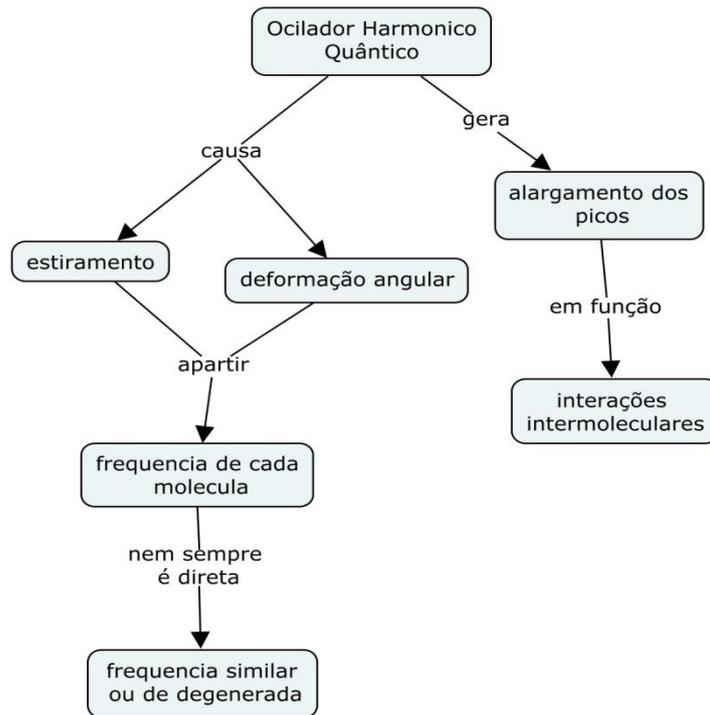
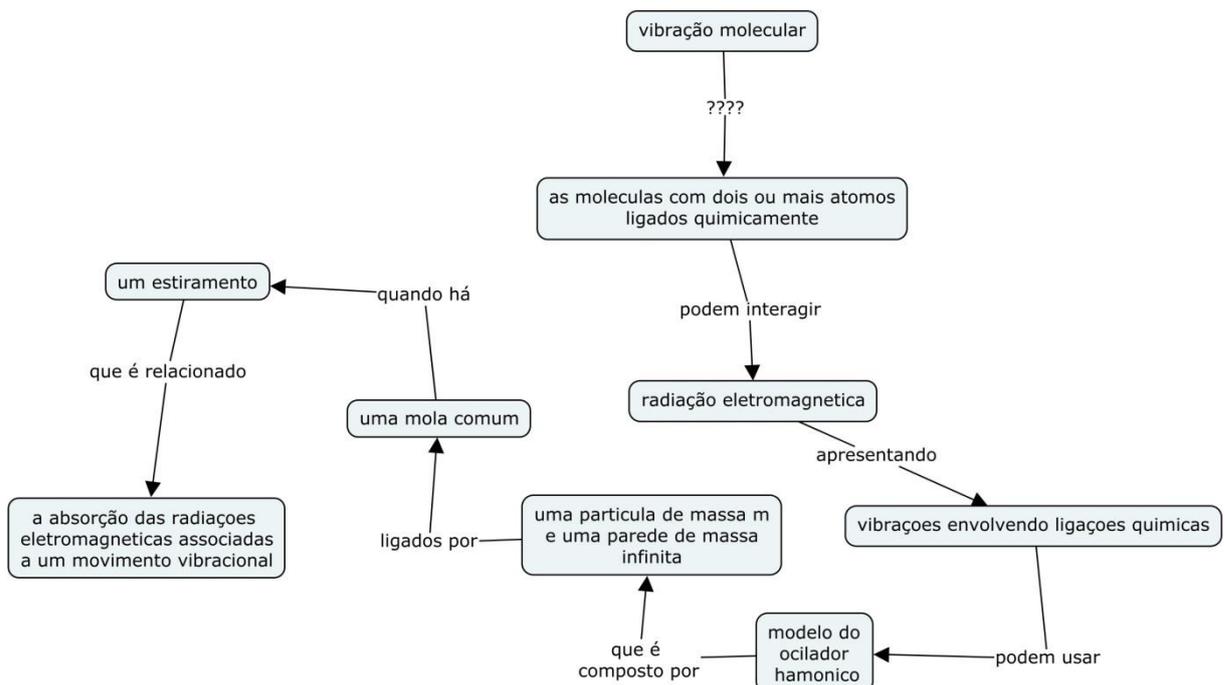


Figura 10: Mapa conceitual construído pelo aluno A4.



O mapa da figura 11 parte do conceito de vibração molecular, diferentemente da maioria dos outros mapas. Além disso, ele responde apenas parcialmente à pergunta focal, o que corrobora com Tavares (2007), que diz que mapas do tipo fluxograma podem se apresentar incompletos.

Figura 11: Mapa conceitual construído pelo aluno A5.



Os mapas das figuras 12 a 16 merecem destaque, visto o grande número de conectores e de proposições estáticas e dinâmicas que os mesmos apresentam, mostrando um nível de conhecimento e interrelação entre vários conceitos mais elevado do que o esperado.

Em particular, o mapa da figura 12 é do tipo hierárquico. Segundo Tavares (2007), a estrutura do conhecimento é feita de maneira mais adequada à compreensão humana neste tipo de mapa. Nestes, a posição de destaque são para os conceitos mais inclusivos. Entretanto, este autor enfatiza que nesse tipo de mapa se torna mais difícil externar e construir, visto que expõe a estrutura cognitiva sobre o assunto de quem o contrói e a clareza do conteúdo no qual o mapa se baseia se torna mais evidente. Nesse sentido, é preciso uma boa compreensão e clareza do assunto para explaná-lo utilizando esse tipo de mapa. Isso é notado nesse caso do mapa da figura 12, em que o aluno demonstra dominar os conceitos básicos do conteúdo abordado, fazendo a correta relação entre os conceitos de oscilador harmônico, estados vibracionais, espectroscopia vibracional. Vale ressaltar que o estudante não mostrou que o modelo clássico do oscilador harmônico pode ser utilizado na mecânica quântica para a obtenção de níveis de energia, que são necessárias para a relação da interação da radiação eletromagnética com a matéria e o espectro vibracional. Não ficou na claro no mapa o fato do uso deste modelo levar à resultados aproximados quanto às frequências vibracionais (e intensidades) moleculares.

Os mapa das figuras 13 e 14 não destacam a relação de forma direta com o espectro vibracional e no mapa da figura 15, o aluno não deixa claro como obter o espectro a partir do modelo do oscilador harmônico.

Uma fato adicional, é que esses mapas que se apresentam com uma quantidade de conteúdo maior e complexidade também maior, visto as interações entre os conceitos, é a presença também de um número maior de proposições estáticas, mais evidentes nos mapas das figuras 13 e 16, com o uso das ligações (verbos) “ser” (“é”, “sendo” etc.), “como” etc.

Figura 12: Mapa conceitual construído pelo aluno A6.

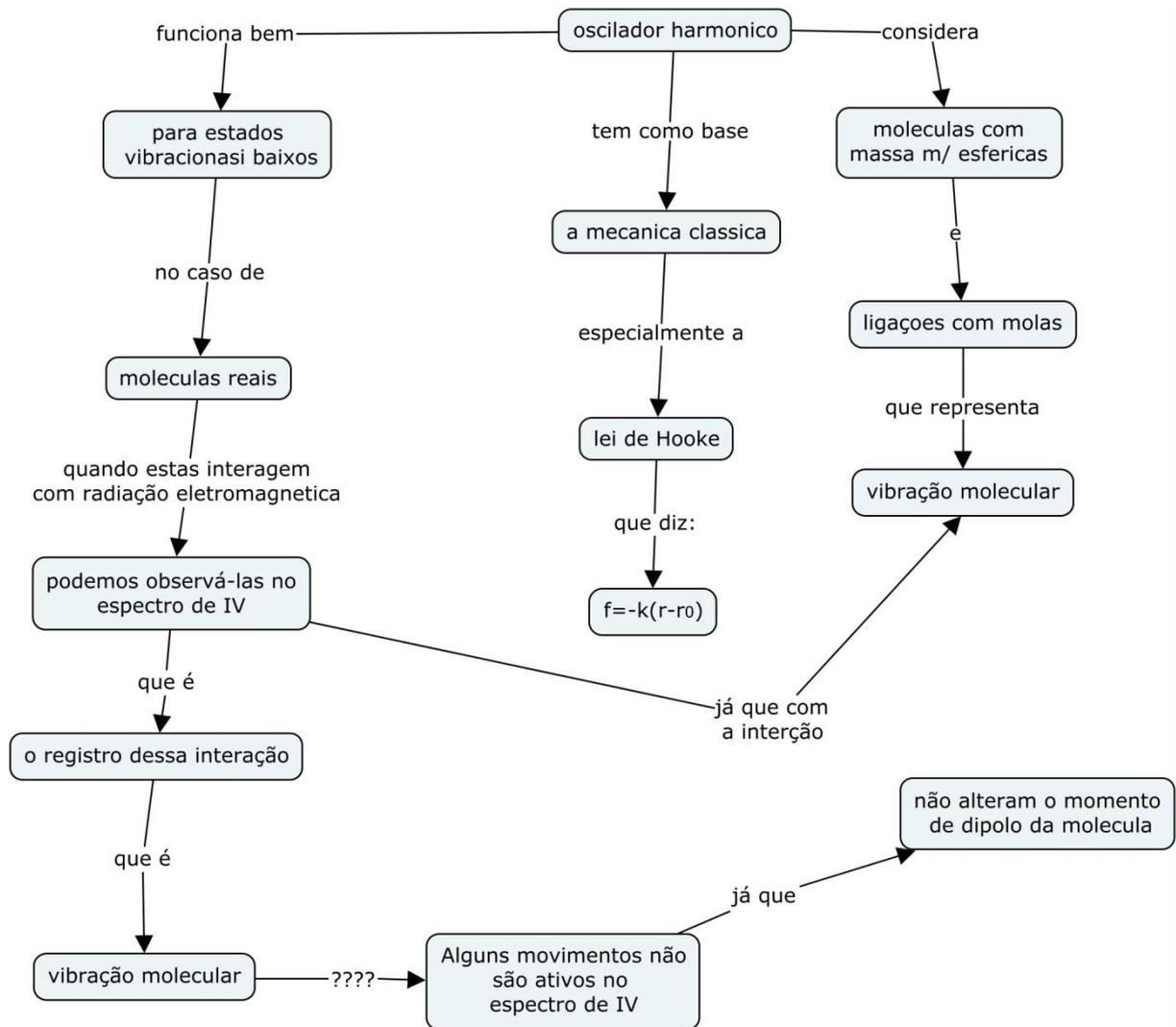


Figura 13: Mapa conceitual construído pelo aluno A7.

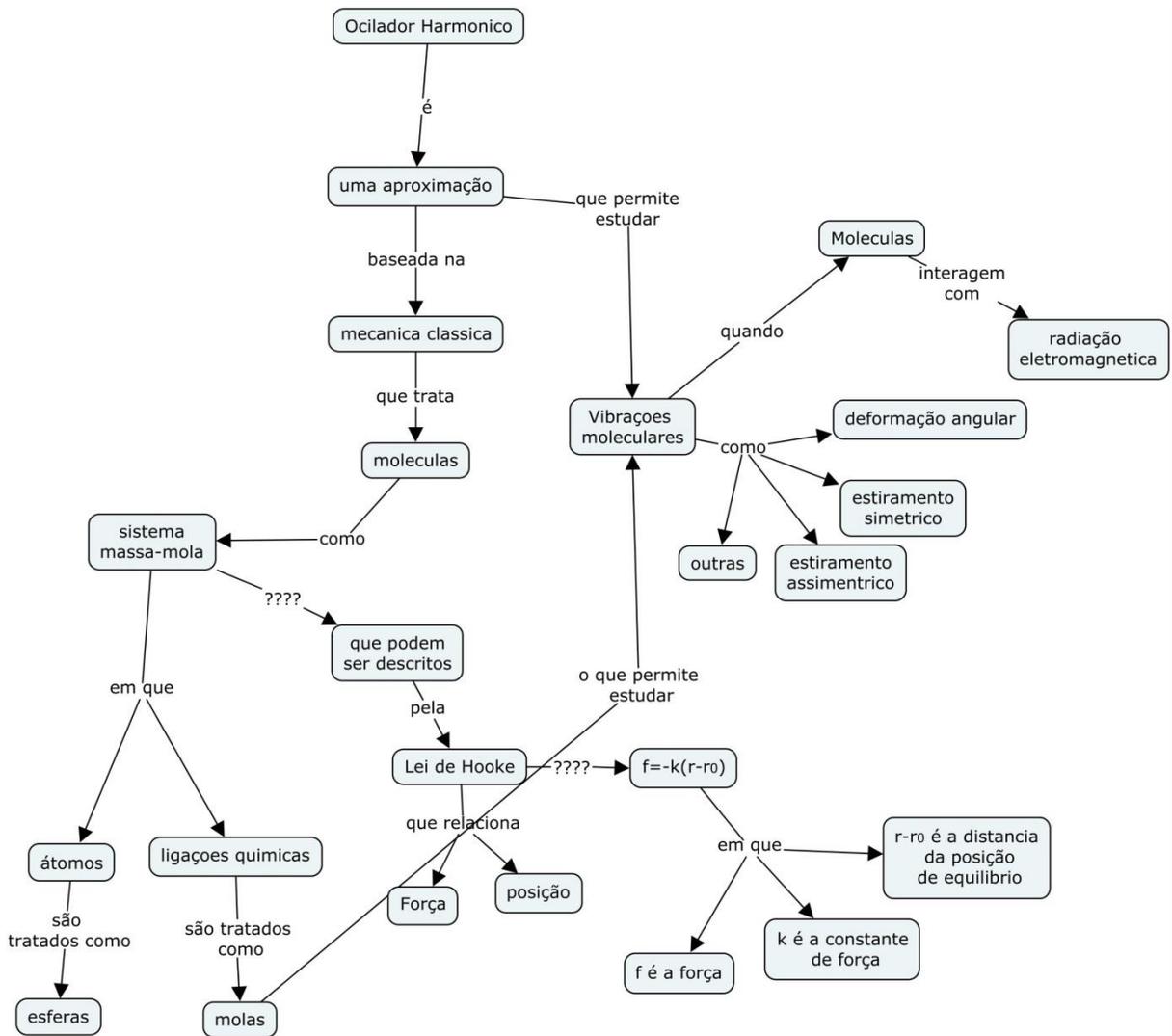


Figura 14: Mapa conceitual construído pelo aluno A8.

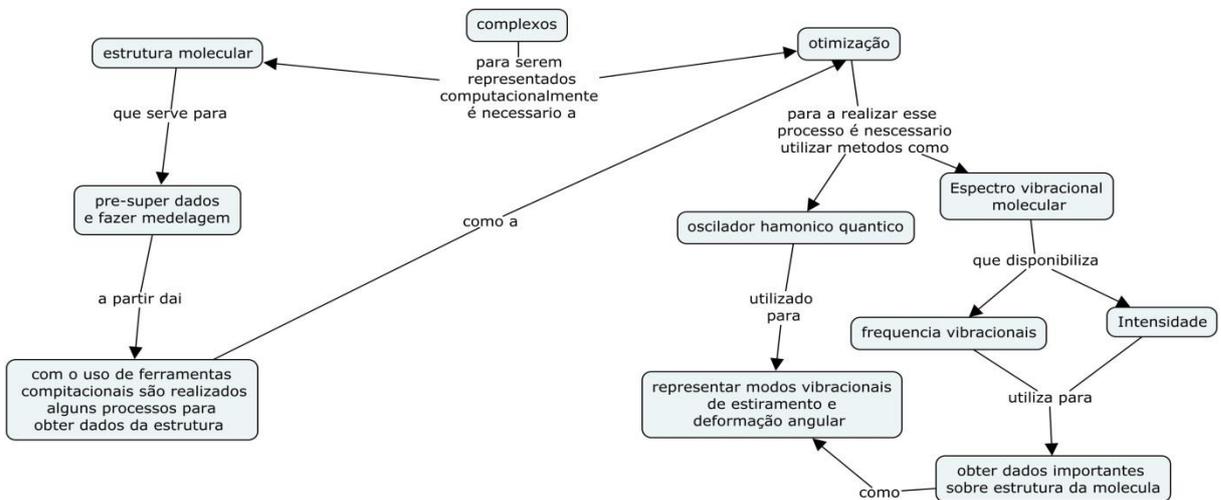


Figura 15: Mapa conceitual construído pelo aluno A9.

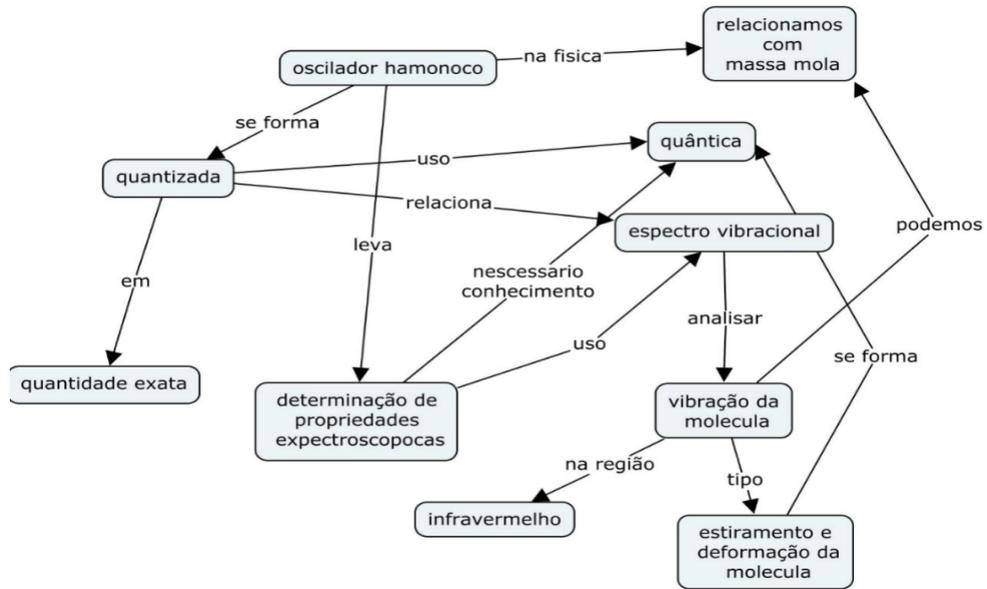
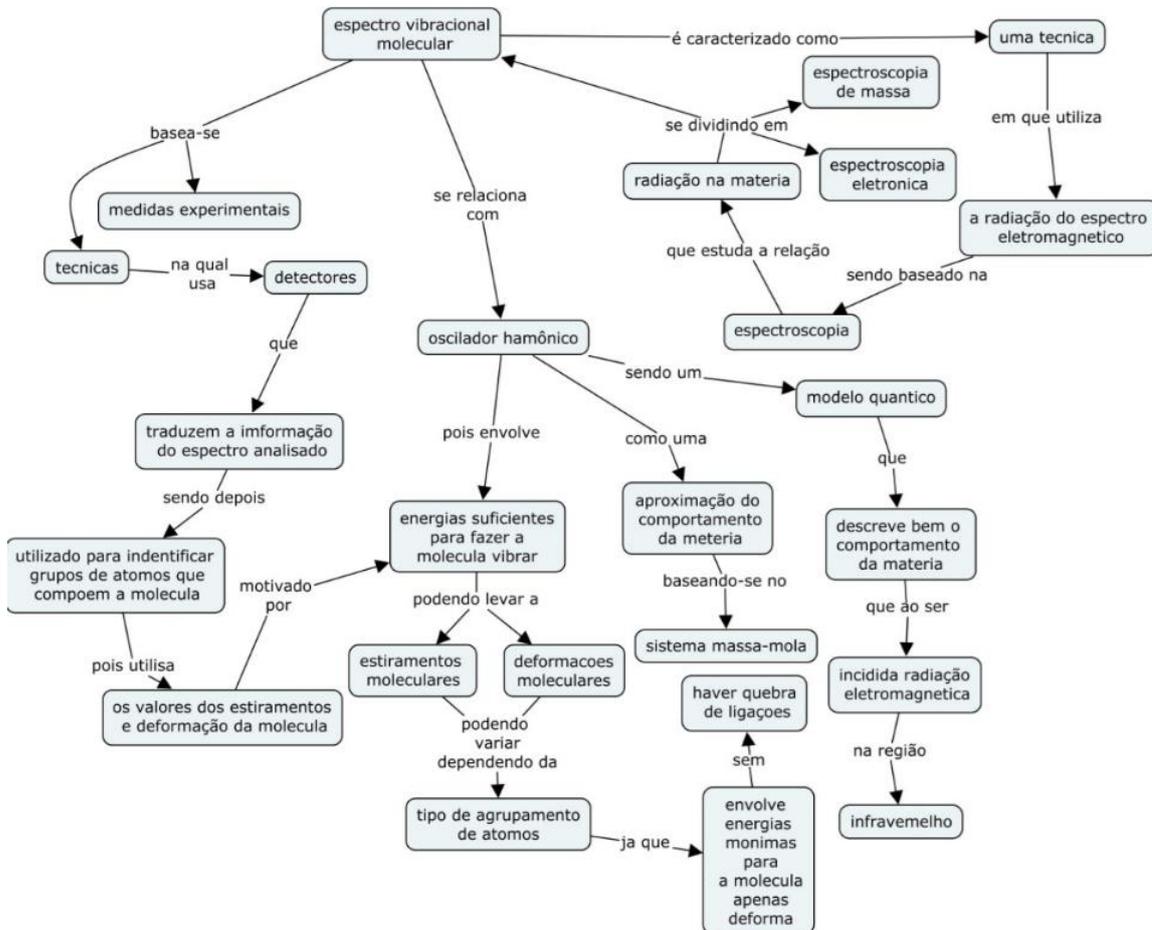


Figura 16: Mapa conceitual construído pelo aluno A10.



Na figura 17 está ilustrado um mapa conceitual que não apresenta conceitos relacionados à quantização das energias no modelo de oscilador harmônico utilizado para descrever vibrações moleculares. Inclusive, o mapa não responde à pergunta em questão e percebe-se que os conceitos utilizados apresentam a influência de conhecimentos adquiridos em outras disciplinas e/ou experiências, dificultando a análise da estratégia utilizada na aprendizagem de Química Quântica. O mesmo pode ser dito acerca do mapa representado na figura 18.

Figura 17: Mapa conceitual construído pelo aluno A11

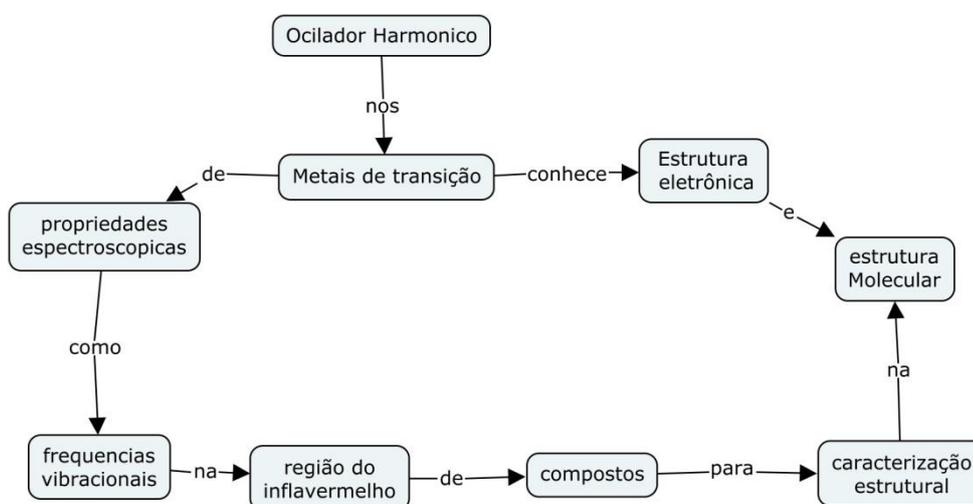
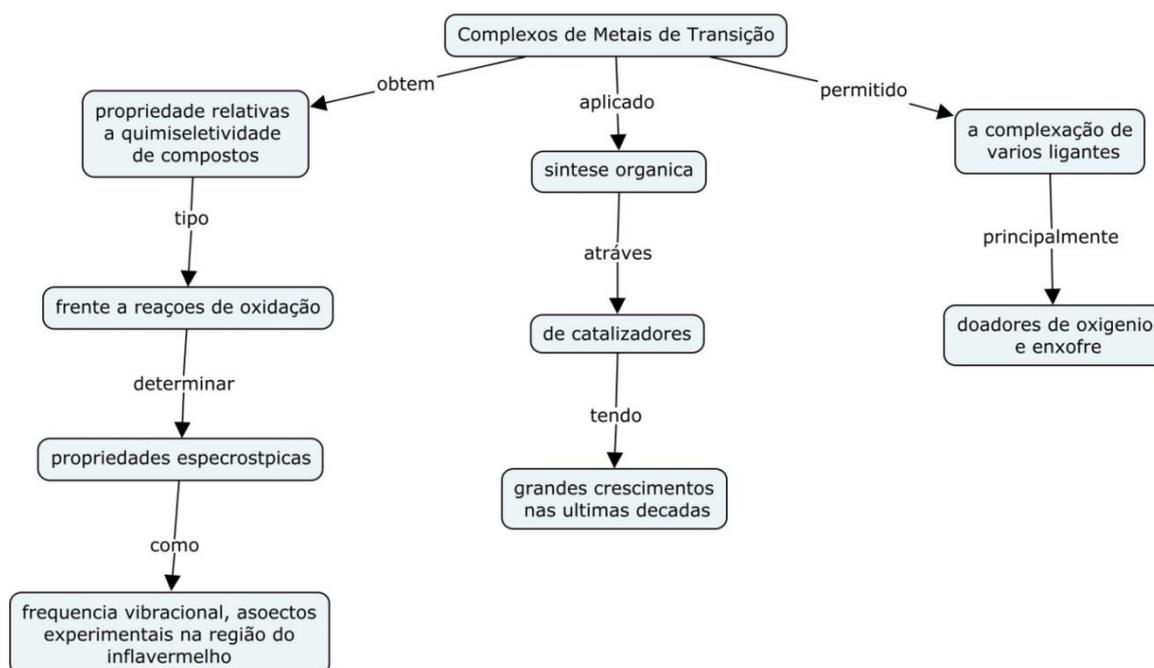


Figura 18: Mapa conceitual construído pelo aluno A12.



Os mapas das figuras 19 a 23, com exceção do mapa da figura 22, conseguem responder à pergunta focal em algum nível. Destaque para o mapa da figura 21 que mostra como podem ser obtidas essas propriedades com a utilização de métodos de Química Computacional, mesmo embora esse estudante não tenha tido experiência com essas técnicas, apenas brevemente comentado nas aulas da disciplina de Introdução à Química.

Figura 19: Mapa conceitual construído pelo aluno A13.

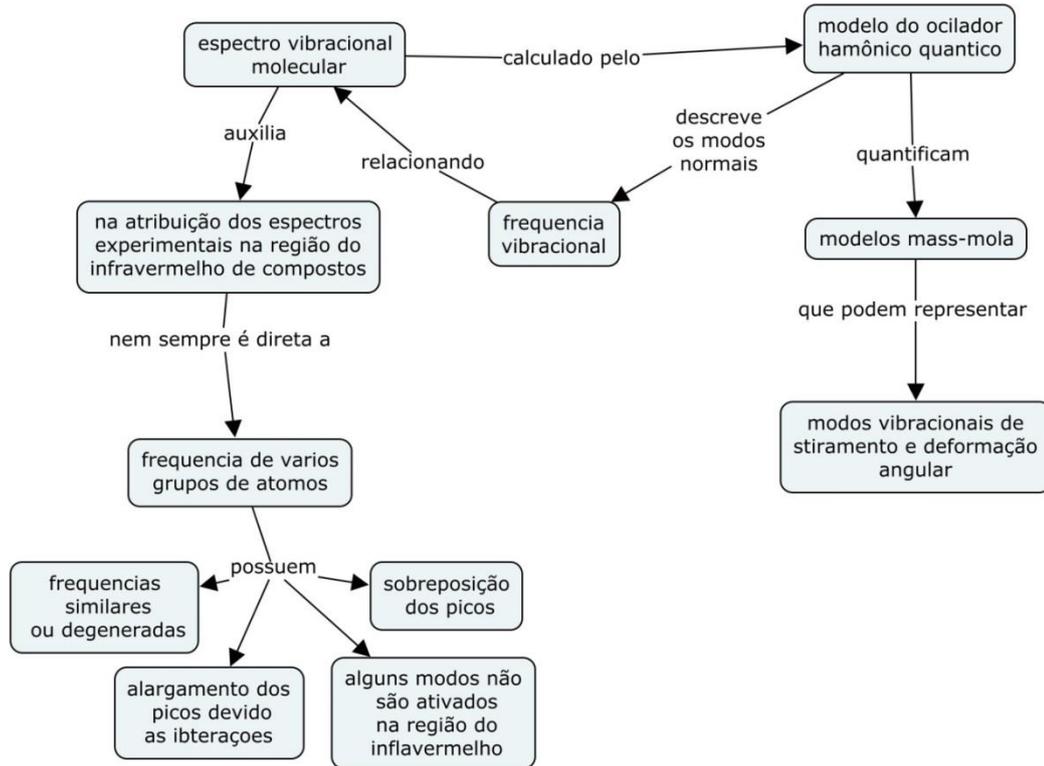


Figura 20: Mapa conceitual construído pelo aluno A14.

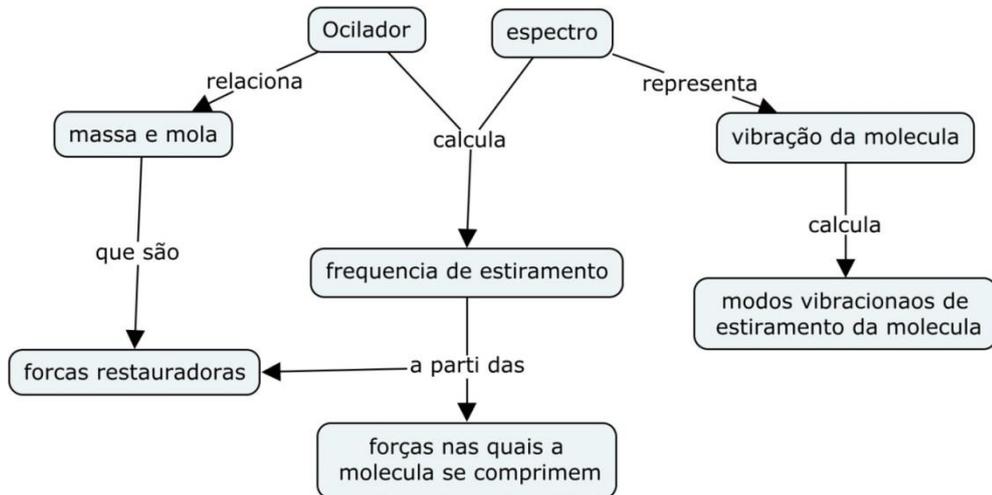


Figura 21: Mapa conceitual construído pelo aluno A15.

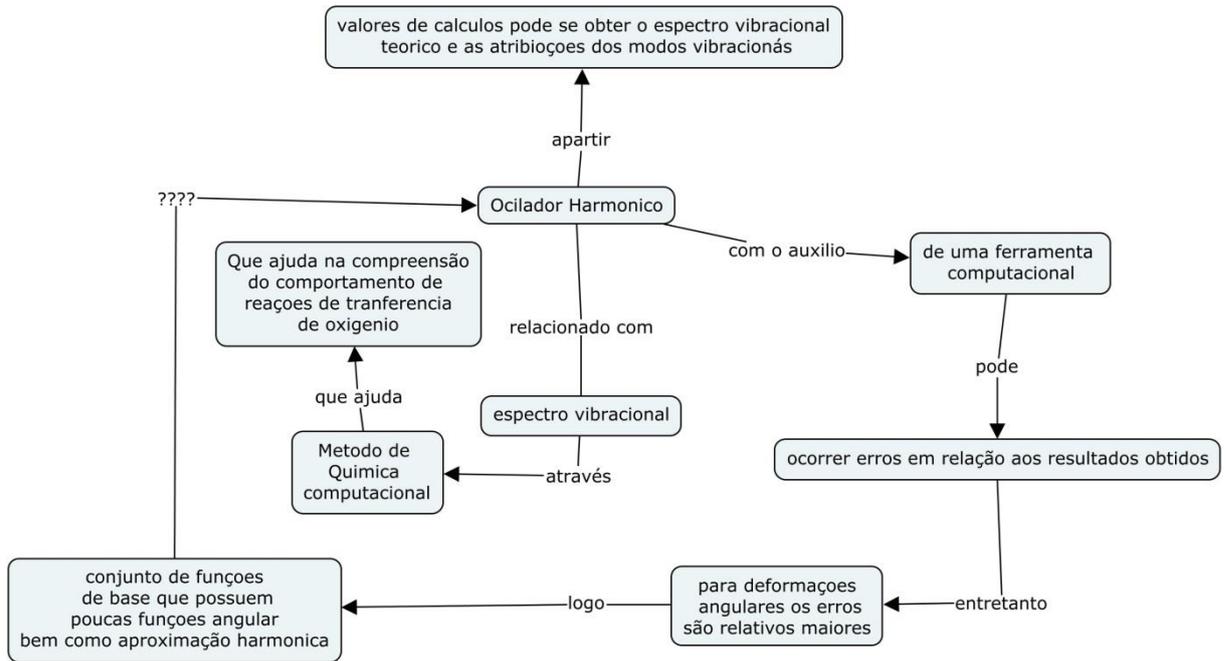


Figura 22: Mapa conceitual construído pelo aluno A16.

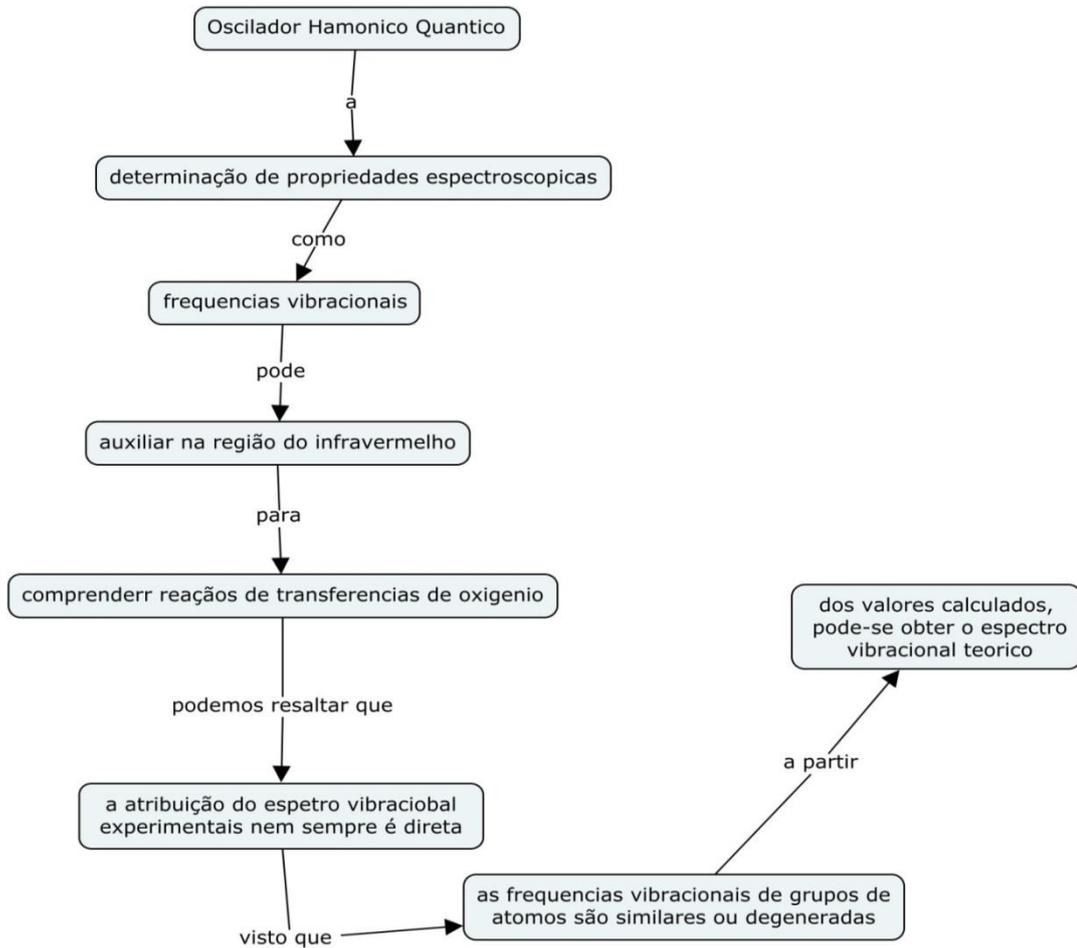
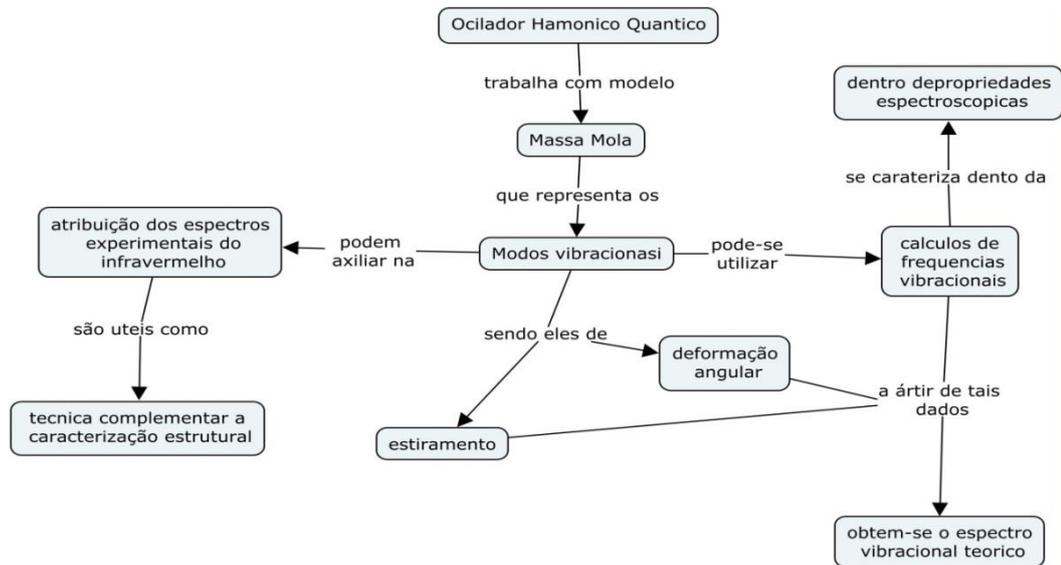


Figura 23: Mapa conceitual construído pelo aluno A17.



Os mapas das figuras 24 e 25 são do tipo entrada e saída, nos quais os estudantes 18 e 19 relacionam vários conceitos, desde o conceito de entrada, oscilador harmônico, até o de saída, o espectro vibracional teórico, embora haja ausência entre dois conceitos de entrada e saída fundamentais apresentados na disciplina de química quântica e que também constam no mapa espelho, que poderiam de alguma forma estar relacionados: interação com radiação com a matéria e níveis de energia, e também a associação do modelo do oscilador harmônico com modelo massa mola.

Figura 24: Mapa conceitual construído pelo aluno A18

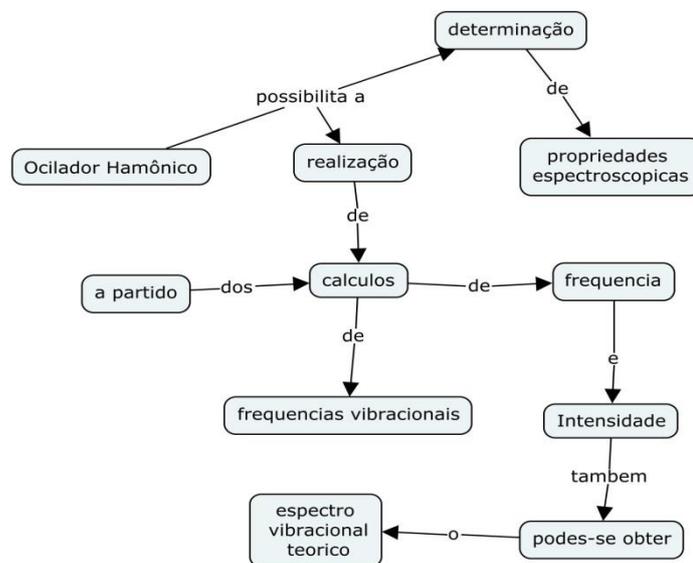
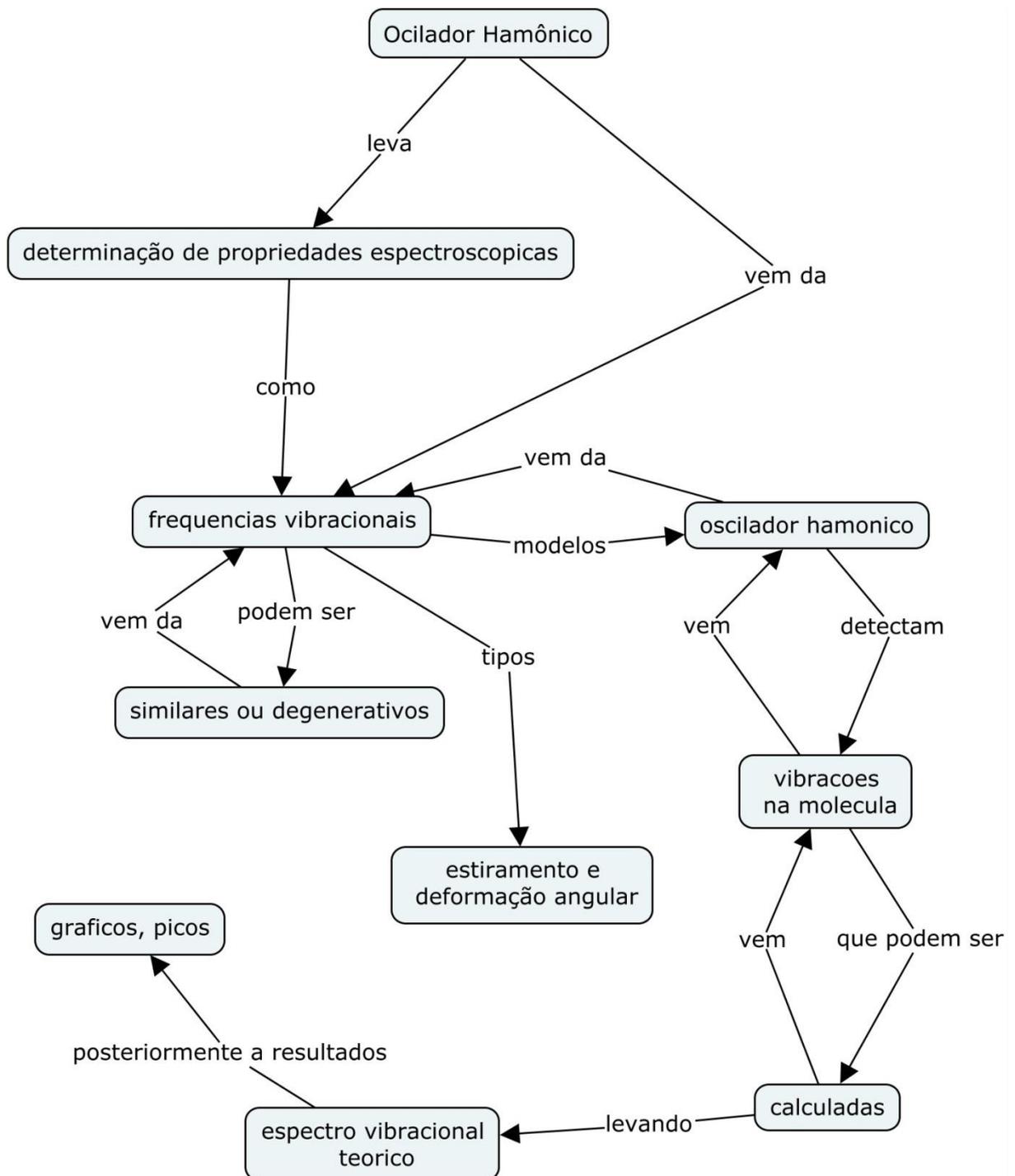


Figura 25: Mapa conceitual construído pelo aluno A19.



Um fato relevante desse estudo é que esperava-se que os mapas fossem construídos de forma simplificada, tendo em vista o grau de complexidade do tema. Isso ficou evidenciado pelo mapa construído pelo pesquisador e pela orientadora deste trabalho, mostrado na figura 6, cuja expectativa, baseado em experiências anteriores no ensino de Química Quântica de

forma mais tradicional, era de que o conhecimento mostrado pelos discentes fosse mais superficial e que a relação entre espectros vibracionais e o modelo do oscilador harmônico não se mostrasse tão clara para os discentes. Entretanto, vários mapas que foram construídos pelos discentes apresentam um grande número de conectores e de proposições estáticas e dinâmicas, conforme discussão realizada anteriormente sobre os mapas das figuras 11, 12 e 13. Isso mostra que além dos conceitos estarem claros para os estudantes, a relação desses conceitos com um problema prático pode ser observada. Além disso, um estudante faz menção ao conceito de atribuição do espectro vibracional (mapa da figura 22), também tratado no estudo de caso.

Essas análises auxiliaram na verificação da clareza conceitual necessária à representação do conhecimento científico, que pôde ser constatada em termos das relações entre os conceitos e da organização hierárquica das ideias, que levaram à responderem a pergunta. De fato, percebe-se que 84% dos estudantes que participaram da atividade conseguiram responder à pergunta focal, mesmo que em diferentes níveis, sendo que 58% do estudantes responderam completamente à pergunta, fato que anteriormente era muito difícil de ser alcançado por um grande número de discentes por meio de estratégias tradicionais de ensino. Mesmo os estudantes que não responderam utilizando os conceitos associados à Química Quântica, mas utilizando conceitos adquiridos em outras disciplinas ou de vivências em laboratórios de pesquisa (cerca de 10%), tentaram responder utilizando conceitos advindos de práticas experimentais. Apenas um estudante não respondeu à pergunta focal.

5.5 Uma análise adicional: Estatística de redes complexas

Nos últimos anos, várias análises estatísticas vem sendo utilizadas para se avaliar tanto o comportamento de sistemas da natureza quanto sistemas sociais. Essas análises tem o objetivo de estudar tanto a evolução desses sistemas quanto a identificação e caracterização de novos padrões. Por exemplo, em sociologia, no ano de 1967, o psicólogo social Stanley Milgram popularizou a manifestação do conceito de pequenos mundos. Em trabalho mais recente (KOCHEN, 1989), foi proposto o conceito de “separação de seis graus”, cuja conclusão mostra que a distância de conhecimento entre duas pessoas nos Estados Unidos tem o comprimento típico de seis pessoas.

Em geral, redes complexas podem descrever uma grande variedade de sistemas na natureza e sociedade. Por exemplo, a *world wide web* é uma rede virtual enorme de páginas

conectadas por *hyperlinks* (ADAMIC, 1999); redes de colaborações científicas, cujos os nós são os cientistas e dois nós estão conectados se os cientistas escreveram algum artigo juntos (BARABÁSI et al., 2002); uma célula pode ser descrita como uma rede complexa de substâncias químicas conectadas por reações químicas (JEONG, 2000); aeroportos formam uma rede cujos vôos representam as ligações entre eles (BARABÁSI et al., 2002); entre diversos outros exemplos.

Mais recentemente, o grupo de pesquisa no qual a orientadora desse trabalho colabora iniciou uma análise de diversos líquidos associados utilizando estatística de redes complexas para se investigar a relação entre as propriedades físico-químicas e a topologia das redes representadas pelas moléculas (os sítios da rede), cujas conexões entre elas existiriam, se estivessem interagindo por ligações de hidrogênio (SANTOS et al., 2004; SILVA et al., 2011 A e B; SILVA et al., 2014).

Assim, motivados por esses estudos, decidimos fazer uma análise preliminar dos mapas conceituais, do ponto de vista de algumas propriedades que caracterizam redes complexas. Nesse caso, os sítios da rede são os conceitos, e as proposições ou conectores representam as conexões entre os sítios. Espera-se que, com isso, pudesse ser determinada alguma relação entre o grau de complexidade ou ramificações e interrelações das informações contidas no mapa, ou seja, como os estudantes conectam vários conceitos, ou veem relações entre eles, com as propriedades das redes, tais como conectividade média, distância mínima média entre os sítios.

A conectividade média determina o número médio de conexões de um sítio qualquer da rede com outros sítios (ou conceitos) vizinhos a ele, e a distância mínima média entre dois sítios (ou conceitos), que não se trata de uma distância euclidiana, corresponde ao número de conexões mínimo entre dois sítios quaisquer da rede, sendo essa uma propriedade semi-local da rede. Todas essas propriedades são obtidas como médias sobre os mapas analisados e são fundamentais para a caracterização de redes complexas.

Como uma forma de adaptar e viabilizar uma análise preliminar dos mapas conceituais construídos pelos estudantes, foram escolhidas três palavras chaves: oscilador, vibração e espectro para a determinação dessas propriedades em torno desses sítios, ou seja, a análise apenas levou em consideração propriedades locais.

Com relação às conectividades médias em torno dos sítios analisados definidos pelas palavras chaves oscilador, vibração e espectro, os valores obtidos foram, respectivamente, 1,9, 2,1 e 1,6. O valor maior obtido para o sítio vibração se deve ao fato de que

predominantemente esse sítio encontra-se entre outros conceitos e, para partir do modelo do oscilador harmônico de forma que explique o espectro vibracional, o termo vibração é um sítio que deve conectá-los, direta ou indiretamente. Já o menor valor para a palavra espectro pode ser atribuído ao fato desse termo predominantemente seja o conceito que se quer chegar a partir de outros. O comportamento da distribuição de conectividades em torno desses sítios pode ser visto pelos gráficos da figura 26, e corroboram com essa análise.

Vale ressaltar que no gráfico da figura 26.a a ocorrência de conectividade igual a 7 se deve ao único mapa conceitual do tipo teia de aranha (figura 8).

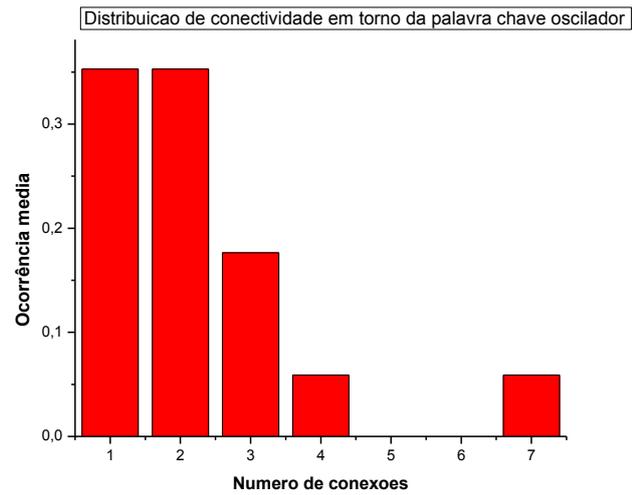
Assim, as conectividades médias e distribuição de conexões, analisadas do ponto de vista da estatística de redes complexas, mostram valores que se correlacionam com os tipos de mapas construídos e com os sítios escolhidos para a análise, definidos em termos das palavras chaves oscilador, vibração e espectro.

Para a distância mínima média entre dois sítios da rede, observa-se que essa propriedade já foi analisada na seção anterior, quando foi determinada a quantidade mínima, em média, de 3 conexões necessárias para se chegar no conceito de espectro vibracional partindo do conceito de oscilador harmônico, dentre os mapas que apresentavam explicitamente as palavras chaves oscilador e espectro. Em comparação com o mapa espelho (figura 6), que utiliza 4 conexões entre esses conceitos, esse número mostra que, em média, os estudantes conseguem ver um número relativamente adequado de conexões com outros conceitos para se chegar no espectro vibracional.

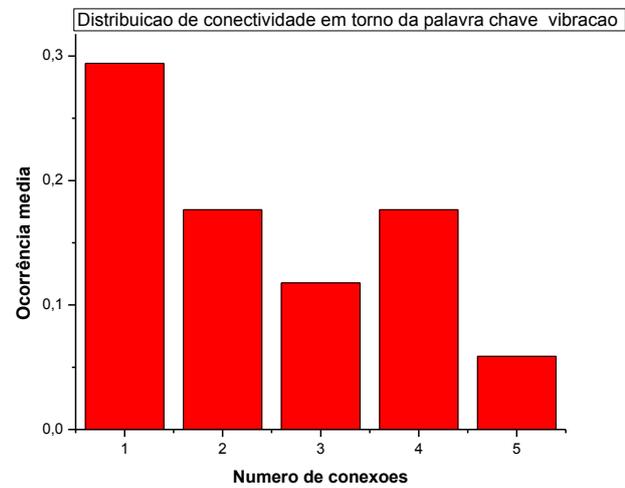
Uma das perspectivas desse trabalho será fazer a análise do agrupamento das redes, que determina a quão conectados, em média, estão os vizinhos de um sítio da rede, com o grau de complexidade ou ramificações e interrelações das informações contidas no mapa, ou seja, como os estudantes conectam vários conceitos, ou veem relações entre eles.

Espera-se que essa análise possa ser ampliada e possa auxiliar no entedimento da construção do conhecimento ou de como se dá o processo de aprendizagem.

(a)



(b)



(c)

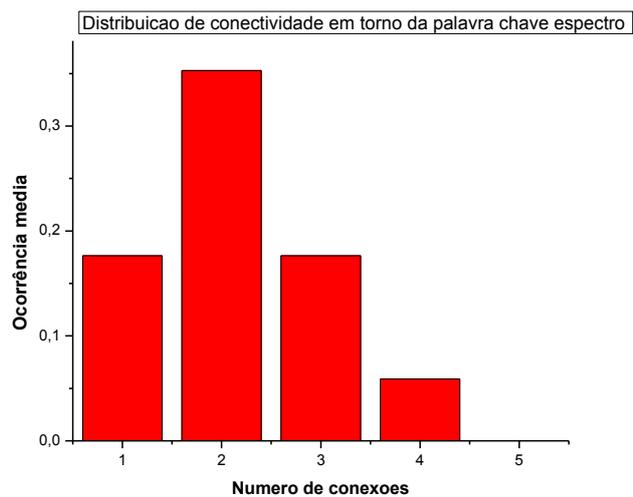


Figura 26: Distribuição de conectividades para os sítios analisados: oscilador (a), vibração (b) e espectro (c).

6

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho de pesquisa buscou investigar os impactos no processo de ensino e aprendizagem ao se utilizar a estratégia de ensino estudo do caso, com o caso intitulado “Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio” para o ensino do modelo do oscilador Harmônico, conteúdo da disciplina Química Quântica no ensino superior. A avaliação da aprendizagem foi realizada por meio da análise de mapas conceituais construídos pelos alunos da disciplina de Introdução à Química Quântica do Curso de Química-Licenciatura na UFPE-CAA, dos quais 19 estudantes participaram da atividade, que buscasse responder à pergunta focal “Como o modelo do oscilador Harmônico Quântico se relacionam com o espectro vibracional?” por meio dos mapas. Além disso, foi proposto pela primeira vez a utilização da estatística de redes complexas para fazer uma análise preliminar dos mapas conceituais, de forma que pudesse ser determinada alguma relação entre as propriedades das redes, tais como conectividade média e a distância mínima média entre os sítios, com o grau de complexidade ou ramificações e interrelações das informações contidas no mapa, ou seja, como os estudantes conectam vários conceitos, ou veem relações entre eles.

De modo geral, a maioria dos mapas foram do tipo fluxograma, com pequeno número de proposições estáticas e um grande número de proposições dinâmicas, que foi atribuído à escolha da pergunta focal que começa com o advérbio “Como”, levando à correlações e relações de causa e consequência para explicar como se dá determinado processo. Entratanto, a característica que leva mapas à serem representados na parte superior com conceitos mais abrangentes para conceitos mais específicos localizados nas partes mais inferiores dos mapas, consequência do uso de proposições estáticas, também é observado em praticamente todos os mapas conceituais analisados.

Em média, foram necessárias um mínimo de 3 conectores para se chegar no conceito de espectro vibracional partindo do conceito de oscilador harmônico, dentre os mapas que apresentavam explicitamente as palavras chaves oscilador e espectro. Em comparação com o mapa espelho, construído pelo pesquisador e a orientadora, que utiliza 4 conexões entre esses conceitos, esse número mostra que, em média, os estudantes conseguem ver um número relativamente adequado de conexões com outros conceitos para se chegar no espectro vibracional. Também as conectividades médias e distribuição de conexões, analisadas do ponto de vista da estatística de redes complexas, mostram valores que se correlacionam com os tipos de mapas construídos e com os sítios escolhidos para a análise, definidos em termos das palavras chaves oscilador, vibração e espectro. Uma das perspectivas desse trabalho será fazer a análise do agrupamento das redes, que determina a quão conectados, em média, estão os vizinhos de um sítio da rede, com o grau de complexidade ou ramificações e interrelações das informações contidas no mapa, ou seja, como os estudantes conectam vários conceitos, ou veem relações entre eles.

Outra resultado que merece destaque é quanto à complexidade observada nos mapas construídos pelos estudantes, mostrando que o estudo de caso tornou os conceitos mais claros para os estudantes, tendo em vista a relação desses conceitos com a situação problema mostrada no Caso proposto.

Essas análises auxiliaram na verificação da clareza conceitual necessária à representação do conhecimento científico, que pôde ser constatada em termos das relações entre os conceitos e da organização hierárquica das ideias, que levaram à responderem a pergunta. De fato, percebeu-se que 84% conseguiram responder à pergunta focal, mesmo que em diferentes níveis, sendo que 58% do estudantes responderam completamente à pergunta, fato que anteriormente era muito difícil de ser alcançado por um grande número de discentes em uma turma por meio de estratégias de ensino tradicionais.

Assim, os resultados mostram essa proposta permitiu explorar o conteúdo de Química Quântica, de maneira mais prática, conceitual e contextualiza, tornando a sua aprendizagem mais significativa, dinâmica e atrativa. Espera-se também que ambas estratégias: ensino a partir do Estudo de Caso e mapa conceitual, como ferramenta de avaliação, possam despertar os discentes, que serão professores em um futuro próximo, para novos conhecimentos metodológicos. Além disso, espera-se também que estratégias como essa possam despertar o interesse dos discentes para o desenvolvimento de pesquisas básicas e/ou aprofundamento nos conteúdos, e para o conhecimento dos projetos de pesquisa desenvolvidos dentro desta Universidade, o que contribuirá para que os mesmos se tornem profissionais de nível superior

formados não só a partir de conhecimentos já sedimentados, mas também dos conhecimentos que estão na vanguarda da sua área de formação.

Espera-se que os resultados obtidos nesse trabalho possam auxiliar na proposição de abordagens mais eficientes no ensino de Química e, em particular, de Química Quântica.

REFERÊNCIAS

- ADAMIC, L. A. Proceedings of the Third European Conference, ECDL'99 (Springer-Verlag, Berlin), p. 443 (1999).
- ALCANTARA JR, Petrus. Espectroscopia molecular. **Curso de Física Moderna II, Departamento de Física, universidade Federal do Pará**, 2002.
- AMOS, R. D.; *Ab Initio Methods in Quantum Chemistry*, Willey, New York (1987).
- ARROIO, A., HONÓRIO, K. M., WEBER, K. C., HOMEM-DE-MELLO, P., & SILVA, A. B. F. D. O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. **Quím. Nova**, São Paulo, v. 28, n. 2, p. 360-363, Mar. 2005.
- ATKINS, P.; PAULA, J. *Physical chemistry*. Vol. 1, 8. ed. LTC, do ano de 2010.
- BARABÁSI, A.-L; JEONG, E; RAVASZ, Z.; NÉDA, A. Schubert and T. Vicsek, *Physica A* 311 (2002) 590.
- BARBOSA, M. L.; ALVES, A. S.; JESUS, J.; BURNHAM, T. Mapas conceituais na avaliação da aprendizagem significativa. **Simpósio Nacional de Ensino de Física**, v. 14, 2005.
- CASS, Q. B.; BATIGALHIA, F.; HERNANDES, M. Z.; MALVESTITI, I.; FERREIRA, A. G.; *Tetrahedron* 57, 9669 (2001).
- CASTRO, T. S. Numeros Quânticos: Abordagens Desconexas que Favorecem a Memorização. Trabalho de Conclusão de Curso. **Química-Licenciatura. Instituto de Química. UnB, Brasília**. 2015.
- DA SILVA, Osmair Benedito; DE OLIVEIRA, Jane Raquel Silva; QUEIROZ, Saete Linhares. SOS Mogi-Guaçu: contribuições de um Estudo de Caso para a educação química no nível médio. 2011.
- DERBENTSEVA, N., SAFAYENI, F; E CAÑAS, A. J. Concept maps: experiments on dynamic thinking. *Journal of Research in Science Teaching*, 44 (2007) 448-465.
- DE CARVALHO, L. P., DA SILVA, K. F., DOS SANTOS, L. L., DOS SANTOS, M. V. P., SILVA, J. A. B., LONGO, R. L. *Inorganica Chimica Acta* 467 (2017) 351–357.
- DE FARIAS, F., DEL-VECCHIO, R. R., CALDAS, F. R. R., & GOUVEIA-MATOS, J. A. M. Uma Abordagem Interdisciplinar Química-Matemática no Ensino Médio. **Revista Virtual de Química**, v. 7, n. 3, p. 849-863, 2014.
- DE SOUZA, G. H. L.; DOS SANTOS, L. L.; DE CARVALHO, L. P.; DOS SANTOS, M. V. P.; SILVA, J. A. B.; LONGO, R. L. Understanding the molybdenum oxodiperoxo complexes reactivities through of the IR and 17O–NMR DFT calculations. In: XVIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Pirenópolis, GO, 2015.
- SILVA, J. A. B. da. Compostos de Coordenação Oxo-Diperoxo de Molibdênio (Quirais) e a Oxidação de Sulfetos. **Monografia de Graduação. Universidade Federal de Pernambuco, Recife**, 2004.

DE OLIVEIRA, LUIZ FERNANDO C. Espectroscopia molecular. Cadernos Temáticos de **Química Nova na Escola**. Nº 4 – Maio 2001.

DE SOUZA, G. H. L.; DOS SANTOS, L. L.; DE CARVALHO, L. P.; DOS SANTOS, M. V. P.; SILVA, J. A. B.; LONGO, R. L. Understanding the molybdenum oxodiperoxo complexes reactivities through of the IR and ^{17}O -NMR DFT calculations. **In: XVIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Pirenópolis, GO, 2015.**

FREIRE JR, Olival; PESSOA JR, Osvaldo; BROMBERG, Joan Lisa. Teoria quântica: estudos históricos e implicações culturais. 2011.

FREITAS, Luiz C. **Prêmio Nobel de Química 1998**. Química Nova na Escola, no 8, novembro, 1998.

FREITAS-REIS, Ivoni; DE FARIA, Fernanda Luiza. Abordando o Tema Alimentos Embutidos por Meio de uma Estratégia de Ensino Baseada na Resolução de Casos: Os Aditivos Alimentares em Foco. **Química Nova na Escola**, v. 37, p. 63, 2015.

FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E.; ROBB, M. A.; CHEESEMAN, J. R.; SCALMANI, G.; BARONE, V.; MENNUCCI, B.; PETERSSON, G. A.; NAKATSUJI, H.; CARICATO, M.; LI, X.; HRATCHIAN, H. P.; IZMAYLOV, A. F.; BLOINO, J.; ZHENG, G.; SONNENBERG, J. L.; HADA, M.; EHARA, M.; TOYOTA, K.; FUKUDA, R.; HASEGAWA, J.; ISHIDA, M.; NAKAJIMA, T.; HONDA, Y.; KITAO, O.; NAKAI, H.; VREVEN, T.; MONTGOMERY, J. A., JR.; PERALTA, J. E.; OGLIARO, F.; BEARPARK, M.; HEYD, J. J.; BROTHERS, E.; KUDIN, K. N.; STAROVEROV, V. N.; KOBAYASHI, R.; NORMAND, J.; RAGHAVACHARI, K.; RENDELL, A.; BURANT, J. C.; IYENGAR, S. S.; TOMASI, J.; COSSI, M.; REGA, N.; MILLAM, J. M.; KLENE, M.; KNOX, J. E.; CROSS, J. B.; BAKKEN, V.; ADAMO, C.; JARAMILLO, J.; GOMPERS, R.; STRATMANN, R. E.; YAZYEV, O.; AUSTIN, A. J.; CAMMI, R.; POMELLI, C.; OCHTERSKI, J. W.; MARTIN, R. L.; MOROKUMA, K.; ZAKRZEWSKI, V. G.; VOTH, G. A.; SALVADOR, P.; DANNENBERG, J. J.; DAPPRICH, S.; DANIELS, A. D.; FARKAS, Ö.; FORESMAN, J. B.; ORTIZ, J. V.; CIOSLOWSKI J.; FOX, D. J. Gaussian 09 (Revision D.1), Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009.

GRECA, I. M.; MOREIRA, M. A.; Uma Revisão da Literatura sobre Estudos Relativos ao Ensino da Mecânica Quântica Introdutória. *Investigações em Ensino de Ciências* 6(1), (2001) pp. 29-56.

HESS, B. A.; SHAAD, L. J.; *Chem. Rev.* **86**, 709 (1986).

HERMOSO, Willian. Espaço do momento: modelos da química quântica. 2008. Dissertação (Mestrado em Físico-Química) - Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008. doi:10.11606/D.46.2008.tde-26112008-115257. Acesso em: 2017-05-13.

JEONG, H.; TOMBOR, B.; ALBERT, R.; OLTVAI Z. N.; BARABÁSI, A.-L. *Nature* (London), 407 (2000) 651.

KOCHEN, M. *The Small World* (Ablex, Norwood, NJ) (1989).

LEAL, R. C., NETO, J. M. M., LIMA, F. D. C. A., & FEITOSA, C. M. (2010). A química quântica na compreensão de teorias de química orgânica. *Quim. Nova*, 33(5), 1211-1215.

LIMA, M. E. C. C.; DAVID, MARCIANA A.; MAGALHÃES, W. F. Ensinar ciências por investigação: um desafio para os formadores. **Química Nova na Escola**, v. 29, p. 24-29, 2008.

MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. *Physical chemistry: a molecular approach*, de Ed. University Science Books, 1997.

MILGRAM, S. The Small-World Problem, *Psychology Today*, 2 (1967).

MIMOUN, H.; ROCH, I. S.; SAJUS, L.; *Bull. Soc. Chem. Fr.* 1481 (1969).

MOREIRA, Marco Antonio. Mapas conceituais e aprendizagem significativa (concept maps and meaningful learning). *Aprendizagem significativa, organizadores prévios, mapas conceituais, diagramas ve unidades de ensino potencialmente significativas*¹, 1982.

MOREIRA, Marco Antonio. Buchweitz B. Novas estratégias de ensino e aprendizagem: os mapas conceituais e o vê epistemológico. **Lisboa: Plátano Edições Técnicas**, 1993.

MOREIRA, Marco Antônio; ROSA, Paulo. Mapas conceituais. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 3, n. 1, p. 17-25, 1986.

MORGON, Nelson Henrique. Computação em química teórica: informações técnicas. **Quím. Nova**, São Paulo, v. 24, n. 5, p. 676-682, Oct. 2001.

PINHEIRO, Antonio Narcisio; MEDEIROS, Ethanielda de Lima; OLIVEIRA, Alcineia Conceição. Estudo de casos na formação de professores de química. **Química Nova, São Paulo, Sociedade Brasileira de Química**, v. 33, n. 9, p. 1996-2002, 2010.

PELIZZARI, A.; KRIEGL, M. D. L.; BARON, M. P.; FINCK, N. T. L.; DOROCINSKI, S. I. Teoria da aprendizagem significativa segundo Ausubel. **revista PEC**, v. 2, n. 1, p. 37-42, 2002.

RAMOS, C. M., RAMOS, L. A., LOBATO, C. C., HAGE MELIM, L. I., & SANTOS, C. Modelagem Molecular como Ferramenta Motivadora no Ensino-Aprendizagem em Mecanismos de Reações de Diels-Alder. *Revista Virtual de Química*, 8(6) (2016).

SALA, Oswaldo. Uma introducao a espectroscopia atomica-O atomo de hidrogenio. **QUIMICA NOVA**, v. 30, n. 7, p. 1773, 2007.

SALA, Oswaldo. I2: uma molécula didática. **Química nova**, v. 31, n. 4, p. 914-920, 2008.

SÁ, Luciana Passos; FRANCISCO, Cristiane Andretta; QUEIROZ, Salete Linhares. Estudos de caso em química. **Química Nova**, v. 30, n. 3, p. 731-739, 2007.

SÁ, L.P. e QUEIROZ, S.L. Estudo de caso no ensino de química. Campinas: Átomo, 2009.

SANTOS, V. M. L.; LONGO, R. L. ; F. G. BRADY MOREIRA. Topology of the Hydrogen Bond Networks in Liquid Water at Room and Supercritical Conditions: A Small-World Structure. *Chemical Physics Letters*, 2004.

SCHNETZLER, Roseli Pacheco; ARAGÃO, Rosália Maria Ribeiro. Importância, sentido e contribuições de pesquisas para o ensino de química. **Química Nova na Escola**, v. 1, p. 27-31, 1995.

SILVA, J. A. B. Compostos de Coordenação Oxo-Diperoxo de Molibdênio (Quirais) e a Oxidação de Sulfetos. Monografia de Graduação, Departamento de Química Fundamental, UFPE. Recife, 2004.

SILVA, J. A. B.; MOREIRA, F.G.B.; DOS SANTOS, V. M. L.; LONGO, R. L. . Hydrogen bond networks in water and methanol with varying interaction strengths. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print), v. 13, p. 593, 2011. A

SILVA, J. A. B.; F.G.B., MOREIRA; DOS SANTOS, V. M. L.; LONGO, R. L. On the hydrogen bond networks in the water?methanol mixtures: topology, percolation and small-world. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print), v. 13, p. 6452-6461, 2011. B

SILVA, J. A. B.; Moreira, F.G.B.; DOS SANTOS, V. M. L.; Longo, R. L. . Topological analyses and small-world patterns of hydrogen bond networks in water + t-butanol, water + n-butanol and water + ammonia mixtures. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print), v. 16, p. 19479-19491, 2014.

TAGARD, P. Conceptual revolutions. Princeton: Princeton University Press (1992).

TAVARES, Romero. Construindo mapas conceituais. Ciências & Cognição, v. 12, p. 72-85, 2007.

VENTURA, Magda Maria. O estudo de caso como modalidade de pesquisa. **Revista SoCERJ**, v. 20, n. 5, p. 383-386, 2007.

YIN, R. Estudo de caso: planejamento e métodos. **2a ed. Porto Alegre: Bookman; 2001**

XAVIER, João Marcelo dos Santos. **Influência da utilização de um conceito obrigatório quantificado sobre a rede proposicional do mapa conceitual**. Dissertação (Mestrado em Ensino de Biologia) - Ensino de Ciências (Física, Química e Biologia), University of São Paulo, São Paulo, 2015.

Apêndice A

Estudo do Caso: Atribuição do espectro vibracional de compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de molibdênio

Complexos de metais de transição aplicados à síntese orgânica como catalisadores tem crescido bastante nas últimas décadas. Em particular, complexos de Molibdênio tem se mostrado melhores catalisadores para reações de oxidação seletivas de vários substratos orgânicos. Alguns exemplos incluem epoxidação de alquenos, oxidação de compostos contendo enxofre, nitrogênio, fósforo e selênio, principalmente quando combinados com um oxidante moderado (DE CARVALHO et al., 2017).

O Molibdênio é um metal que permite a complexação com vários ligantes, principalmente doadores de oxigênio e enxofre. Os mais comuns são os oxo complexos e, desde a introdução por Mimoun de complexos do tipo oxo-diperoxo de metais de transição em epoxidação de olefinas, a pesquisa por reagentes deste tipo tem aumentado significativamente. Além disso, estes complexos podem ser regenerados após a reação com o tratamento por um oxidante, como o peróxido de hidrogênio, e pode substituir antigos procedimentos que levam a baixas atividades, baixos rendimentos e/ou seletividades, condições severas de manuseio e purificação laboriosa, produção de subprodutos tóxicos e difíceis de serem removidos da mistura reacional.

Dada a importância de complexos oxo-diperoxo de molibdênio e a escassez de dados teóricos e experimentais sobre seus mecanismos reacionais, o conhecimento da estrutura eletrônica e da estrutura molecular dos complexos $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}^1]$ e $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}^1\text{L}^2]$ é importante para entender seus comportamentos em reações de transferência de oxigênio, como as reações de epoxidação de olefinas e de oxidação de sulfetos, investigação de suas reatividades e quimiosseletividades, podendo auxiliar na determinação dos mecanismos envolvidos em tais reações.

Métodos de Química Computacional podem ser úteis para a compreensão do comportamento de reações de transferência de oxigênio e podem determinar fatores relevantes que controlam tais reações, o que pode auxiliar na escolha apropriada das condições reacionais que maximizam os produtos desejados e minimizam os subprodutos. Assim, um dos trabalhos desenvolvidos pelo pesquisador e pelo orientador deste trabalho é determinar as estruturas moleculares e obter propriedades relativas à quimiosseletividade de compostos deste tipo, frente às reações de oxidação. A determinação de propriedades espectroscópicas, tais como as frequências vibracionais, também pode auxiliar na atribuição dos espectros experimentais na região do infravermelho de compostos desse tipo, que podem ser úteis como técnica complementar à caracterização estrutural. Vale ressaltar que a atribuição dos espectros vibracionais experimentais nem sempre é direta, visto que vários grupos de átomos possuem frequências vibracionais similares ou degeneradas, o alargamento dos picos devido às interações intermoleculares, sobreposição de picos, alguns modos não serem ativos na região do infravermelho, entre outros fatores.

Para este trabalho, o seguinte complexo foi estudado: $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol})(\text{H}_2\text{O})]$ (Figura 1). Os cálculos foram realizados utilizando o programa Gaussian09. As otimizações de geometria e os cálculos de frequências vibracionais foram realizados no nível DFT/LanL2DZ/6-31G*. Os cálculos de frequências vibracionais foram realizados utilizando os procedimentos padrão, cujo modelo que descreve os modos normais de vibração corresponde ao modelo do oscilador harmônico.

A partir dos valores calculados de frequência e intensidade, pode-se obter o espectro vibracional teórico (figura 2) e as atribuições dos modos vibracionais podem ser realizadas também com o auxílio de uma ferramenta computacional implementada no programa Gaussview5.0, que lê as

informações obtidas a partir do cálculo contidas em um arquivo de saída e faz uma animação de cada modo vibracional. Algumas das atribuições estão destacadas no gráfico da figura 2.

Observa-se da tabela 1 que os cálculos das frequências de estiramento têm erros de cerca de 10% em relação aos resultados obtidos experimentalmente (CASS et al., 2001). Entretanto, para as deformações angulares os erros relativos são maiores. Isso pode ser atribuído às deficiências do conjunto de funções de bases que possuem poucas funções com elevado momento angular, bem como da aproximação harmônica que é menos precisa para deformações angulares de baixas frequências.

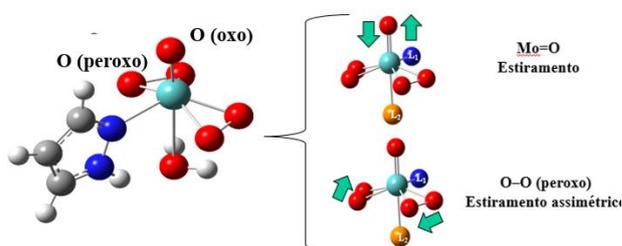


Figura 1: Geometria otimizada do complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol})]$. Do lado esquerdo está uma representação do complexo cujo ligante L^1 está coordenado na posição equatorial ou *syn* (eq) em relação ao grupo oxo e o ligante L^2 na posição axial (ax) e alguns de seus modos vibracionais.

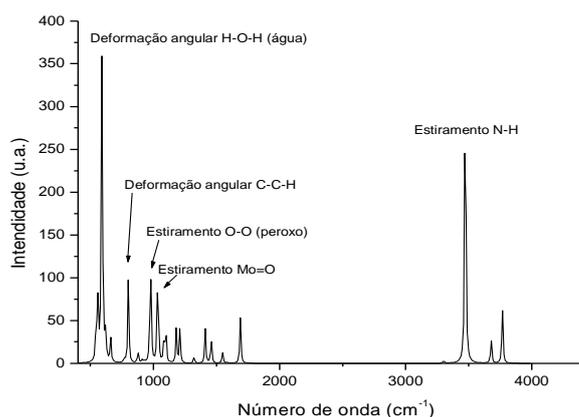


Figura 2: Espectro na região do infravermelho calculado no nível B3LYP/LanL2DZ/6-31G* para o complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol},\text{eq})(\text{H}_2\text{O},\text{ax})]$.

Fonte: Adaptado da referência DE SOUZA et al., 2015.

Tabela 1: Frequências vibracionais selecionadas (cm^{-1}) com suas correspondentes intensidades (km/mol) obtidas com diferentes esquemas de cálculo (diferentes funcionais da densidade, X) X/LanL2DZ/6-31G* para o complexo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{pirazol},\text{eq})(\text{H}_2\text{O},\text{ax})]$.

	N_{calc}	I_{calc}	ν_{calc}	I_{calc}	ν_{calc}	I_{calc}
	B3LYP		M06-2X		PBE1PBE	
Estiramento N-H	3474 (4,7%)	411	3514 (5,9%)	414	3496 (5,4%)	425
Estiramento Mo=O	1034 (8,3%)	131	1098 (15,0%)	116	1057 (10,7%)	146
Estiramento O-O (peroxo) assimétrico	976 (12,0%)	109	1051 (20,1%)	119	1022 (17,3%)	112
Deformação angular C-C-H assimétrico	801 (31%)	98	793 (30,0%)	132	811 (33,0%)	100
Deformação angular H-O-H (água)	592 (15,4%)	412	643 (24,1%)	462	576 (11,2%)	80

Fonte: Adaptado da referência (SILVA, 2004).

Referências:

DE CARVALHO, L. P., DA SILVA, K. F., DOS SANTOS, L. L., DOS SANTOS, M. V. P., SILVA, J. A. B., LONGO, R. L. Chemoselective oxidation of unsaturated organosulfur, selenium and

phosphorus compounds by molybdenum oxodiperoxo complexes: A computational investigation *Inorganica Chimica Acta* 467 (2017) 351–357.

DE SOUZA, G. H. L.; DOS SANTOS, L. L.; DE CARVALHO, L. P.; DOS SANTOS, M. V. P.; SILVA, J. A. B.; LONGO, R. L. Understanding the molybdenum oxodiperoxo complexes reactivities through of the IR and ^{17}O -NMR DFT calculations. In: XVIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Pirenópolis, GO, 2015.

SILVA, J. A. B. Compostos de Coordenação Oxo-Diperoxo de Molibdênio (Quirais) e a Oxidação de Sulfetos. Monografia de Graduação, Departamento de Química Fundamental, UFPE. Recife, 2004.

CASS, Q. B.; BATIGALHIA, F.; HERNANDES, M. Z.; MALVESTITI, I.; FERREIRA, A. G.; *Tetrahedron* 57, 9669 (2001).

Apêndice B

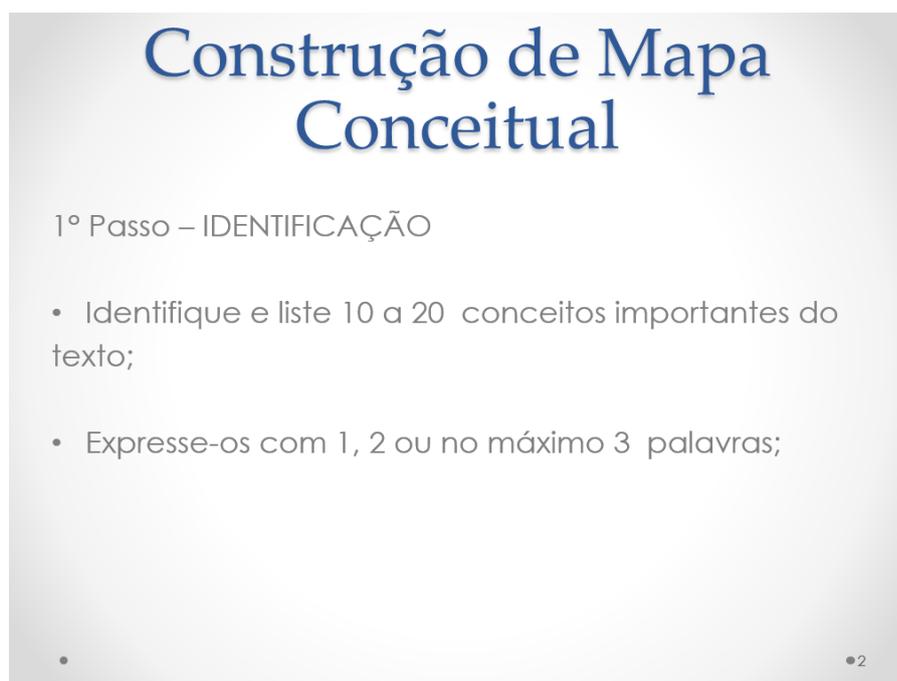
Slide de parte da aula sobre a construção de mapas conceituais.



Mapas
Conceituais

Passo a Passo para construção de um
mapa conceitual.

• 1



Construção de Mapa
Conceitual

1º Passo – IDENTIFICAÇÃO

- Identifique e liste 10 a 20 conceitos importantes do texto;
- Expresse-os com 1, 2 ou no máximo 3 palavras;

• 2

Construção de Mapa Conceitual

2º Passo – ORGANIZAÇÃO

- Ordene os conceitos por abrangência;
- Havendo dificuldade, reavalie o conjunto de conceitos inicial;

•

•3

Construção de Mapa Conceitual

3º Passo – AVALIAÇÃO

- Avalie a lista de conceitos, adicione novos, se necessário;

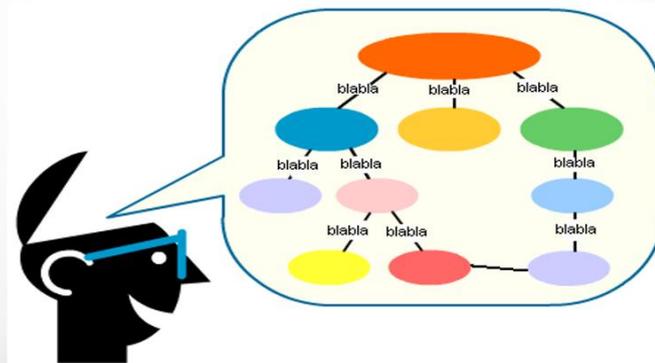
•

•4

Construção de Mapa Conceitual

4º Passo – CONSTRUÇÃO

- Comece a construir o mapa colocando os conceitos mais abrangentes no topo, no máximo 3;

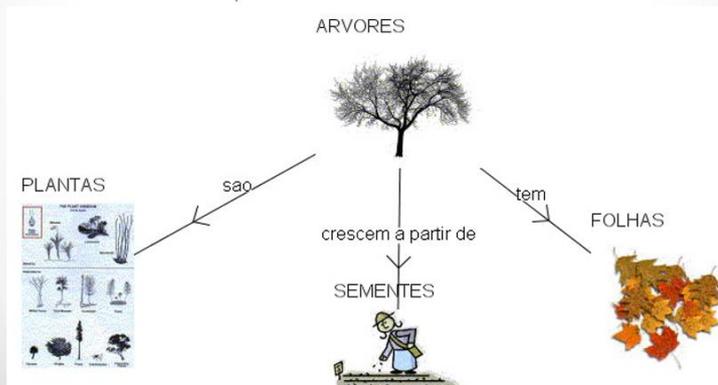


• 5

Construção de Mapa Conceitual

5º Passo – HIERARQUIZAÇÃO

- Selecione 2, 3 ou 4 conceitos para o nível inferior de cada conceito;



• 6

Construção de Mapa Conceitual

6º Passo – CONEXÃO

- Conecte os conceitos que se relacionam hierarquicamente;
- Rotule com um ou mais palavras cada arco;
- O rótulo deve conter declarações ou proposições válidas sobre os relacionamentos;
- As conexões criam significado;

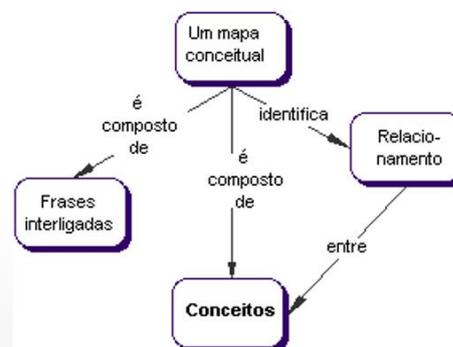
•

•7

Construção de Mapa Conceitual

8º Passo – INTERCONEXÕES

- Busque interligações entre conceitos de diferentes partes do mapa, conecte-os e rotule-os;



•

•8