



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

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

WILLIAM DANIEL ALVES BEZERRA DA SILVA

**QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO ESTRATÉGIA DE
ENSINO DO CONCEITO DE SOLVATAÇÃO: UMA POSSIBILIDADE
DE CONSTRUÇÃO DE UMA ZDP**

**CARUARU
2018**

WILLIAM DANIEL ALVES BEZERRA DA SILVA

**QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO ESTRATÉGIA DE
ENSINO DO CONCEITO DE SOLVATAÇÃO: UMA POSSIBILIDADE
DE CONSTRUÇÃO DE UMA ZDP**

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

Orientadora: Prof. Dr^a Roberta Pereira Dias.

**CARUARU
2018**

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

S586q Silva, William Daniel Alves Bezerra da.

Química computacional como estratégia de ensino do conceito de solvatação: uma possibilidade de construção de uma ZDP . / William Daniel Alves Bezerra da Silva. – 2018.

50 f. il. : 30 cm.

Orientadora: Roberta Pereira Dias.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, Licenciatura em Química, 2018.

Inclui Referências.

1. Solvatação. 2. Química computacional. 3. Química – Estudo e ensino. I. Dias, Roberta Pereira (Orientadora). II. Título.

CDD 371.12 (23. ed.)

UFPE (CAA 2018-392)



Campus
AGRESTE

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE DO CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
COLEGIADO DO CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

FOLHA DE APROVAÇÃO DO TCC

WILLIAM DANIEL ALVES BEZERRA DA SILVA

**“QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO ESTRATÉGIA DE ENSINO DO CONCEITO DE
SOLVATAÇÃO: UMA POSSIBILIDADE DE CONSTRUÇÃO DE UMA ZDP.”**

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

Caruaru, 14 de Dezembro de 2018.

BANCA EXAMINADORA:

Profª. Dra. Roberta Pereira Dias (CAA/UFPE)

(Orientadora)

Prof. Dr. Paulo Mcmiller Crisostomo De Oliveira (CAA/UFPE)

(Examinador 1)

Prof. Dr. Júlio Cosme Santos da Silva (UFAL)

(Examinador 2)

AGRADECIMENTOS

À minha mãe e minha avó, por serem pessoas maravilhosas por quem eu tenho um amor imenso, e por acreditarem em mim e me apoiarem durante todo esse tempo da minha graduação.

À minha orientadora, Roberta Dias, por ser uma pessoa incrível e por me acolher desde o terceiro período para iniciação científica e acreditar que eu teria potencial.

Ao meu noivo e companheiro de vida Adler Cesar, por me apoiar em todas as decisões e sempre ser suporte em minha vida, mesmo quando eu deixei de acreditar em mim.

Aos meus professores João Tenório, Ayron Anjos e Júlio Santos pelas contribuições que me deram durante a construção deste trabalho.

Às minhas amigas, Jéssica, Lucelma e Anny por deixarem a vida mais leve e sempre ser apoio.

Aos estudantes que se dispuseram a participar desta pesquisa e torná-la possível: Ícaro, Eros, Aquiles, Isis, Íris e Maia.

Aos professores Júlio Santos e Paulo Mc Miller, por aceitarem o convite para compor a banca de avaliação deste trabalho.

RESUMO

O presente trabalho buscou investigar as possíveis contribuições para o ensino de solvatação, a partir do uso de química computacional, utilizando programas computacionais de modelagem molecular. A pesquisa também visou fomentar discussões a respeito da contribuição do uso de software de modelagem molecular para o ensino, pois muitas vezes estes programas são vistos apenas como suporte para o desenvolvimento de pesquisas. A ideia de se trazer solvatação como tema é que muitas vezes, este não passa por uma discussão um pouco mais aprofundada e se esquece da importância do conceito para entender melhor alguns processos químicos e biológicos. Os alunos que participaram desta pesquisa são alunos da Universidade Federal de Pernambuco do curso de Química-Licenciatura. Então, para este fim, os alunos participaram de uma atividade experimental, que foi realizada em momentos diferentes: a primeira que foi um pré-teste, teve o objetivo de avaliar o que os estudantes já entendiam sobre o tema, o segundo momento foi para explicarmos aos estudantes sobre Química Computacional e como calcular energia livre de solvatação a partir do ciclo termodinâmico de Born e a terceiro momento foi uma atividade computacional, onde os estudantes puderam calcular a energia livre de solvatação, utilizando o modelo de Born. Durante toda a terceira parte foram realizados *quick-tests*, estes tiveram objetivo de avaliar a contribuição para o ensino a partir do desenvolvimento de uma Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP) nos mesmos, para avaliar melhor o desenvolvimento de uma ZDP nos estudantes, filmamos a terceira parte da pesquisa. Após as atividades que descrevemos aqui, toda a parte escrita e de vídeo foi analisada, obedecendo três critérios relacionados à ZDP. Após as análises, inferimos que o computador pode ser uma ferramenta de auxílio à aprendizagem, quando bem orientada, favorecendo a construção de novos significados nos estudantes e estas podem ser internalizadas pelos mesmos.

Palavras-chave: Solvatação. Zona de Desenvolvimento Proximal. Química Computacional.

ABSTRACT

The present work investigates the possible contributions to the teaching of solvation, from the use of computational chemistry, using molecular modeling software. The idea of bringing solvation as a theme is that it often does not go through a more in-depth discussion and forgets the importance of the concept to better understand some chemical and biological processes. The students who participated in this research are students of the Federal University of Pernambuco of the Chemistry – College Degree course. To this end, the students participated in an experimental activity, applied at different times: the first one was a pre-test, aimed at assessing what the students already understood about the subject, the second moment was for explain to students about Computational Chemistry and how to calculate free energy of solvation from the Born thermodynamic cycle and the third moment was a computational activity, where the students could calculate the free energy of solvation using the Born model. Throughout the third part, quick-tests were carried out, which were aimed at evaluating the contribution to teaching from the development of a Zone of Proximal Development (ZPD) in them, to better evaluate the development of a ZPD in the students, we filmed the third part of the research. After the activities we described here, the whole written and video part was analyzed, obeying three criteria related to the ZPD. After the analysis, we infer that the computer can be a tool to aid learning, when well oriented, favoring the construction of new meanings in students and these can be internalized by the same.

Keywords: Solvation. Zone of Proximal Development. Computational Chemistry.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Tabela 1	Publicações encontradas na plataforma ERIC	14
Gráfico 1	Publicações na área de Química Computacional nos últimos 10 anos.	16
Figura 1	Representação da primeira camada de solvatação para o íon HCO_3^- .	22
Figura 2	Esquema de representação do ciclo de Born.	24
Tabela 2	Questões que serão aplicadas no pré-teste.	30
Tabela 3	Valores de energia obtidos por cada dupla para a solvatação dos íons a partir dos dados fornecidos.	39

LISTA DE ABREVIATURAS

GAMESS - *General Atomic and Molecular Electronic Structure System*

IUPAC – *International Union of Pure and Applied Chemistry*

ZDP – *Zona de Desenvolvimento Proximal*

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	OBJETIVOS	12
2.1	OBJETIVO GERAL.....	12
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	12
3	REVISÃO DE LITERATURA	13
3.1	ESTADO DA ARTE SOBRE SOLVATAÇÃO E ENSINO DE SOLVATAÇÃO	13
3.2	QUÍMICA COMPUTACIONAL	15
3.2.1	Métodos Clássicos	16
3.2.1.1	Mecânica Clássica	17
3.2.1.2	Dinâmica Molecular	17
3.2.2	Métodos Quânticos	18
3.3	SOLVATAÇÃO E PROCESSO DE SOLVATAÇÃO	20
3.3.1	Modelo do solvente implícito e explícito	21
3.3.2	O Modelo de Born para Solvatação	22
3.4	O ENSINO DE QUÍMICA ALIADO A <i>SOFTWARE</i>	24
3.5	ZONA DE DESENVOLVIMENTO PROXIMAL	26
4	METODOLOGIA	29
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	33
5.1	ANÁLISE DOS PRÉ-TESTES	33
5.1	ANÁLISE DOS <i>QUICK-TESTS</i>	35
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	44
	REFERÊNCIAS	45
	APÊNDICE A – TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO	48
	APÊNDICE B - <i>INPUT'S</i> DOS CÁLCULOS REALIZADOS	49
	APÊNDICE C – <i>QUICK-TESTS</i>	50

1 INTRODUÇÃO

A *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) define Química Computacional como disciplina que utiliza métodos computacionais para prever propriedades moleculares ou simulações moleculares a partir de cálculos matemáticos (IUPAC, 2006). Sendo assim, a Química Computacional pode estimar arranjos geométricos, energias relativas, propriedades intrínsecas (como momento de dipolo, polarizabilidade, constante de acoplamento de RMN), interações intra e intermoleculares, velocidade de reação, entre outras (SCHLICK, 2002). Porém para se calcular tais propriedades em um sistema de várias partículas, na verdade em qualquer sistema com mais que dois elétrons, precisa-se de soluções numéricas aproximadas de relativa precisão que são extraídas de cálculos matemáticos que exigem uma grande quantidade de operações matemáticas (LEWARS, 2016). Antes da popularização do uso de computadores, o número de sistemas que podiam ser tratados com alta precisão era limitado. Por volta dos anos 60, os computadores se tornaram acessíveis para muitos pesquisadores e hoje estão difundidos em muitos ramos da ciência, e assim surgia a Química Computacional.

Um dos ramos que surgiu com o desenvolvimento da Química Computacional foi a área de ensino de química, onde pesquisadores perceberam a possibilidade de integrar o computador como instrumento de aprendizagem e então melhorar o ensino de Química. (RAUPP; SERRANO; MARTINS, 2008). Desde então esforços tem se concentrado para desenvolver *software* que ajudem a melhorar a compreensão dos alunos em conceitos químicos (SANTOS 2001).

Em Química Computacional, são utilizados *software* de modelagem molecular que possuem gamas de possibilidades para cálculos e realização de tarefas, como prever comportamento de sistemas químicos, desenvolvimento de novos medicamentos, propor a construção e modelagem de novos materiais, entender mecanismos de reação, calcular energia livre de solvatação, calcular energia mínima de sistemas, etc.

Muitos desses programas computacionais estão disponíveis para download totalmente gratuito, como é o caso do *General Atomic and Molecular Electronic Structure System* (GAMESS) e outros podem ser comprados, como é o caso do Gaussian (GAUSSIAN09).

O *software* usado neste trabalho foi o Gaussian que conta com a implementação de métodos *ab initio*, métodos baseados na Teoria do Funcional de Densidade (DFT), métodos semiempíricos e modelos contínuos de solvatação para avaliar implicitamente o efeito de solvente sobre diversas propriedades de um dado sistema químico (GAUSSIAN, 2016).

Com esse *software* é possível realizar cálculos do ciclo termodinâmico (energia livre) do processo de solvatação de diferentes íons e moléculas. Por definição, solvatação é o processo de transferência da molécula de uma posição fixa na fase gasosa g para uma posição fixa na fase líquida l , com temperatura T e pressão P , constantes (BEN-NAIM, 1985). Já segundo a IUPAC (2006), solvatação é qualquer interação que estabilize o soluto e o solvente, tais interações podem ser: forças eletrostáticas, forças de Van der Waals ou ligações de hidrogênio.

A energia livre do processo de solvatação é por definição, a energia que é associada a esse processo de transferir uma molécula de soluto de uma posição fixa de um gás para a posição fixa de um líquido (BEM-NAIM, 1985).

Vale ressaltar que o termo de energia livre que está sendo usado não se refere à energia livre de Gibbs ou energia livre de Helmholtz, a energia livre de solvatação é uma definição que considera a variação da energia livre de Gibbs (ΔG), a variação da energia de Helmholtz (ΔA) e a variação de entalpia (ΔH) (LIMA, 2010).

Dentro deste contexto, a compreensão do processo de solvatação se torna importante, por exemplo, para tentar explicar como se dá a solubilidade de cristais iônicos e como ocorrem os vários processos biológicos como o transporte de proteínas, íons, sais, hormônios bem como a hidratação do nosso corpo. Levando também em consideração que muitas vezes o conceito de solvatação é associado de forma errônea e confundido com dissolução e até mesmo com solubilidade, pois dentro das disciplinas esse conceito é passado de forma batida e os estudantes não conseguem diferenciá-lo.

Pensando na importância de compreender como se dá o gasto energético e como entender o processo de solvatação e dada a importância também de se utilizar métodos computacionais para uma visão detalhada sobre este conceito, já que eles nos dão a possibilidade de compreender processos químicos ao nível atômico, podemos nos questionar: quais as contribuições da química computacional para o ensino do conceito de solvatação para alunos da disciplina de Físico-Química II do curso de Química-Licenciatura da UFPE-CAA?

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Compreender as contribuições que a Química Computacional pode trazer para estudantes do Ensino Superior auxiliando no ensino de solvatação, através de cálculos de mecânica quântica utilizando métodos DFT sobre a energia livre do processo.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar quais as concepções prévias dos participantes sobre solvatação;
- Interpretar as energias envolvidas em cada etapa do ciclo termodinâmico da solvatação de alguns íons e moléculas;
- Realizar uma análise crítica acerca do ciclo termodinâmico de Born, o qual está presente nos livros texto de Físico-Química e é geralmente utilizado como conteúdo básico para o ensino do conceito de solvatação. Neste ponto serão feitas comparações entre os valores de energia de solvatação calculadas pelo modelo de Born e obtidas através de modelos implícitos de solvatação implementados em códigos computacionais;
- Analisar como os alunos compreendem o ciclo energético do processo de solvatação para diferentes íons em solução;
- Avaliar como o uso da Química Computacional poderá contribuir para o ensino do conceito de solvatação de espécies químicas carregadas.

3 REVISÃO DE LITERATURA

A revisão de literatura está dividida em basicamente cinco tópicos. No primeiro tópico trazemos o estado da arte para fundamentarmos a importância do nosso trabalho, buscando pesquisas relacionadas ao tema. No segundo tópico, discutimos sobre química computacional e dividimos esta parte em subtópicos para um melhor entendimento da discussão. No terceiro, exploramos os conceitos de solvatação e energia livre de solvatação. Já no quarto tópico, abordamos a discussão sobre o ensino de química aliado a *software* em geral. E por fim, discutimos sobre como podemos relacionar o tema à Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP) proposta por Vygotsky.

3.1 ESTADO DA ARTE SOBRE SOLVATAÇÃO E ENSINO DE SOLVATAÇÃO

Neste trabalho apresentaremos os resultados de uma pesquisa para compor o estado da arte sobre o processo de solvatação e ensino de solvatação. Para este fim, acessamos a plataforma Periódicos CAPES, pelo acesso CAFe, para verificar a existência de periódicos em relação ao tema nos últimos 5 anos, período que compreende 2014-2018. Utilizamos as palavras-chave: *solvatação*, *ensino de solvatação*, *solvation* e *solvation teaching*, e, também pesquisamos as mesmas na plataforma ERIC, dentro do mesmo período.

Digitando a palavra chave “*solvatação*” na plataforma de periódicos CAPES, encontramos 5 resultados dentro do período citado. Sendo estes, revisados por pares (RP). Ser revisado por pares significa que, mais de uma pessoa leu o trabalho e fez suas contribuições ao(s) autor(es). Quando lemos o título, palavras-chave e resumo, nenhum destes cinco trabalhos se assemelhou ao que será proposto neste trabalho, todos estes são pesquisas na área aplicada.

Quando digitamos a palavra chave “ensino de solvatação”, no mesmo período de tempo citado, apareceram 2 trabalhos e inserindo o filtro RP, apenas 1 trabalho se manteve na lista. Quando lemos o título, palavras-chave e resumo do trabalho, este também não se assemelhava ao que vamos propor, o trabalho encontrado é mais geral, no sentido de que se preocupa com vários fatores que podem influenciar a dissolução de compostos iônicos.

Como não conseguimos trabalhos em português, também procuramos usando as palavras chaves “*solvation*” e “*solvation teaching*”.

Numa busca mais geral quando digitamos “*solvation*”, utilizando o mesmo período de tempo, encontramos 32.191 trabalhos, inserindo o filtro RP, tivemos um retorno de 30.895 trabalhos. A fim de afunilar a pesquisa, inserimos mais um termo “*solvation teaching*” (no

mesmo período) e obtivemos um total de 127 trabalhos. Depois de lermos, título, resumo e palavras-chave destes 127 trabalhos, observamos que alguns até se referem ao ensino, mas não tem foco em solvatação, outros são bem específicos (química aplicada) e outros não se encaixam ao tema.

Como não tivemos muito sucesso em buscar trabalhos dentro do periódico capes, procuramos outra plataforma, a fim de que encontrássemos algum trabalho similar ao que propomos neste presente trabalho de conclusão de curso, e com isso, procuramos trabalhos na plataforma ERIC.

Na plataforma ERIC, digitando a palavra-chave “*solvation*” com o filtro selecionado: últimos 5 anos (2014-2018), apenas 4 trabalhos foram encontrados. Destes quatro trabalhos depois que lemos o título, palavras-chave e resumo, apenas dois se assemelham com o que será proposto neste trabalho, um deles é um artigo e o outro uma dissertação. Os outros dois trabalhos são na área de química aplicada. Na tabela 1 mostramos os trabalhos encontrados, bem como o título da publicação e o(s) autor(es).

Tabela 1. Publicações encontradas na plataforma ERIC.

Publicação	Título da publicação	Autor (es)
P1	An Undergraduate Laboratory Activity on Molecular Dynamics Simulations	Spitznagel, B. et al.
P2	I. Cognitive and instructional factors relating to students' development of personal models of chemical systems in the general chemistry laboratory II. Solvation in supercritical carbon dioxide/ethanol mixtures studied by molecular dynamics simulation	Anthony, S.

A publicação P1 se refere a uma atividade de laboratório de química computacional, em que estudantes usaram técnicas de Dinâmica Molecular para compreender alguns efeitos que ocorrem em proteínas devido a alterações de algumas situações como: temperatura, fosforilação e solvatação, sendo as duas primeiras situações no vácuo e a última em água. O foco desta publicação é mais no sentido de os estudantes aprenderem a usar programas computacionais como ferramenta para auxiliar no entendimento de algumas propriedades. Podemos dizer que aqui o objetivo foi o produto final e não o processo.

A publicação P2 é dividida em duas partes: A primeira que se refere a modelos pessoais de sistemas químicos na disciplina de laboratório de química e a segunda parte que

se refere a solvatação em misturas supercríticas de dióxido de carbono em etanol usando dinâmica molecular.

Digitando a palavra chave “*solvation teaching*” ainda na plataforma ERIC, apenas 1 resultado é encontrado usando o mesmo filtro que anteriormente. Lendo o título, palavras-chave e resumo, percebemos que o trabalho se refere à química aplicada.

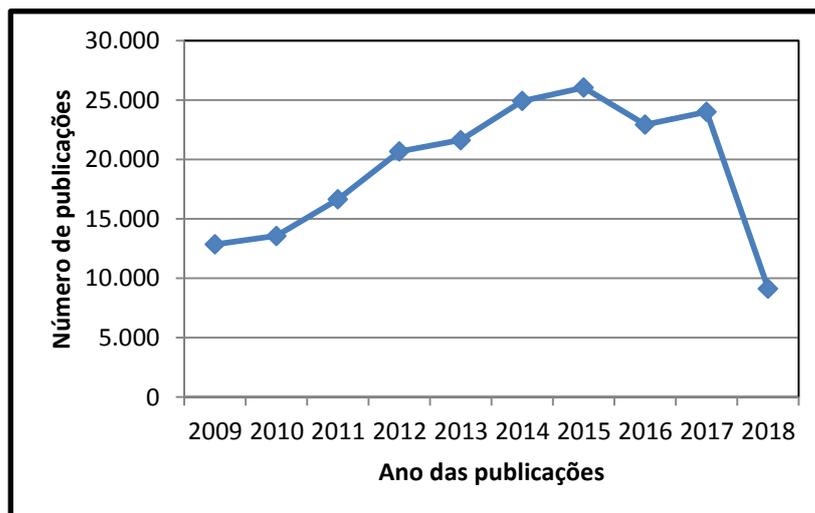
Concluimos desta forma, que o tema deste trabalho em questão se torna relevante para discussão dentro do contexto educacional em química, já que nenhum dos trabalhos encontrados discute esta questão e que dentro do curso de Química-Licenciatura da UFPE/CAA o tema sempre passa despercebido e nunca se ouve comentar do mesmo de uma maneira mais aprofundada, no sentido de entender o processo e as energias que envolvem o processo de solvatação.

Para fins de validação do estado da arte, vale ressaltar que ele foi feito em meados de maio do corrente ano, mais especificamente entre os dias 08 e 15 de maio de 2018.

3.2 QUÍMICA COMPUTACIONAL

Nos últimos anos houve um aumento no número de pessoas que usam a Química Computacional (YOUNG, 2001). Fazendo uma pesquisa rápida dentro da Plataforma Periódicos CAPES, utilizando o acesso CAFe a fim de sabermos o quão crescente vem se tornando as discussões de Química Computacional e a área, pesquisamos o termo “*computational chemistry*”, levando em consideração os últimos 10 anos (2009-2018) e considerando apenas periódicos revisados por pares (RP), obtivemos os resultados apresentados no gráfico 1.

Gráfico 1. Publicações na área de Química Computacional nos últimos 10 anos.



Fonte: Própria

O gráfico 1 nos mostra o quão relevante vem se tornando a área de Química Computacional, mostrando que houve um crescimento considerável nos últimos 10 anos devido a crescente demanda na criação de novos fármacos, por exemplo. Vale ressaltar que neste corrente ano, o número de publicações decaiu devido a pesquisa ter sido realizada em meados de maio. Apesar disso, nos mostra também um grande número se considerarmos que são apenas 5 meses analisados.

A Química Computacional pode ser usada de várias maneiras distintas, dentre elas, a principal é a modelagem de um sistema molecular antes de sintetizá-lo em laboratório, o que é uma vantagem muito grande, já que não se desperdiça materiais, nem gera resíduo (YOUNG, 2001). Muitas vezes, a modelagem molecular é utilizada para criação de novos materiais cujas propriedades físicas e químicas são precisas (SPOEL; LINDAHL; HESS et al., 2013).

Dois aproximações têm sido amplamente utilizadas no estudo da modelagem molecular que são: a aproximação clássica (com métodos de mecânica molecular e dinâmica molecular) e a aproximação quântica (com os métodos *ab initio*, DFT e semiempíricos) (SANT'ANNA, 2009). É importante ressaltar que a escolha do método depende do que se quer avaliar, da precisão e capacidade computacional disponível (SANT'ANNA, 2009).

Para que possamos compreender melhor o intuito e objetivo do presente trabalho é importante diferenciar estes métodos.

3.2.1 Métodos clássicos

Os métodos clássicos são divididos em Mecânica Clássica e Dinâmica molecular.

3.2.1.1 Mecânica clássica

Diferente dos métodos quânticos, na mecânica molecular as moléculas são descritas como um conjunto de átomos ligados/conectados, ao invés de núcleo e elétrons (SANT'ANNA, 2009). Neste método, a ideia que prevalece é a do sistema modelo “massa-mola” para tratar a ligação entre os átomos, em que os átomos são entendidos como esferas rígidas e a ligação química por molas e essa união se dá por meio de constantes de forças associadas com cada tipo de ligação química.

Nesse tipo de sistema, temos o que chamamos de campo de força que nada mais é do que um conjunto de funções matemáticas que determinam penalidades energéticas para o afastamento de valores que são determinados experimentalmente, por exemplo: comprimento de ligação, ângulo de ligação, etc. A minimização de energia é a redução em conjunto dessas penalidades (com um algoritmo matemático), ou seja, a energia reduzida a um mínimo (SANT'ANNA, 2009). Basicamente é o exercício matemático de busca por pontos de mínimos de uma função a partir da avaliação de derivadas de primeira e segunda ordem.

3.2.1.2 Dinâmica molecular

A dinâmica molecular se refere ao comportamento do sistema em relação ao tempo, em que equações do movimento newtonianas são resolvidas. Existem inúmeros livros texto e artigos científicos que abordam esse assunto com diferentes níveis de profundidade (MCQUARRIE, 1997), onde o leitor pode acessar essas informações caso deseje um melhor aprofundamento no tema. Por isso, nesse trabalho apresentaremos as respectivas discussões de maneira sucinta.

Esse comportamento do sistema em relação ao tempo, que chamamos de movimento molecular, denomina-se trajetória. Quando realizamos um cálculo de dinâmica, o sistema tende a buscar conformações estáveis.

No cálculo, as equações do movimento de Newton, são resolvidas (SANT'ANNA, 2009). Para cada átomo do sistema, temos:

$$F_n = m_n \cdot a_n \quad (1)$$

Onde F_n é a força que causa a aceleração a_n em um átomo que possui uma massa m_n . A força pode ser obtida da derivada da energia potencial E com relação às coordenadas r_n dos átomos.

A solução analítica dessas equações para um sistema com vários átomos torna-se impraticável do ponto de vista de desempenho computacional. Assim, são utilizados métodos

numéricos a partir de uma expansão de Taylor. Quando a posição no tempo t é $r(t)$, após o intervalo Δt , teremos:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \frac{dr}{dt} \Delta t + \frac{d^2 r}{dt^2} \frac{\Delta t^2}{2} + \dots \quad (2)$$

Se conhecermos posição $r(t)$, velocidade dr/dt e aceleração d^2r/dt^2 de cada átomo, a equação terá uma solução numérica. A variação de tempo Δt precisa ser pequena (mas, não muito pequena), para que a aceleração possa ser considerada constante neste intervalo. Geralmente, utiliza-se o intervalo na ordem de 0,5 a 1 fs (femosegundo) ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$). Com computadores com processadores mais potentes, podemos aumentar esse tempo para a faixa dos nanossegundos.

3.2.2 Métodos quânticos

Assim como no tópico anterior onde descrevemos e discutimos sobre a mecânica clássica, a discussão aqui apresentada também será de uma maneira mais sucinta e na literatura existem inúmeros livros texto que se aprofundam no assunto, caso o leitor tenha interesse pelo tema (YOUNG, 2010; CRAMER, 2002).

No que diz respeito à mecânica quântica, ela está baseada fundamentalmente na resolução da equação de Schrödinger, mas a equação de Schrödinger não possui resolução analítica quando se trata de sistemas de moléculas, então são feitas aproximações e simplificações da equação. Os modelos aqui descritos se baseiam na Teoria do Orbital Molecular (TOM), tais modelos são os métodos *ab initio* e semiempíricos.

Nos métodos *ab initio* todas as equações são resolvidas de maneira aproximada sem a necessidade de nenhum dado experimental além de constantes físicas fundamentais, já nos métodos semiempíricos, dados experimentais são utilizados para simplificar a resolução da equação de Schrödinger através da substituição de algumas integrais por esses dados (TRZESNIAK, 2002).

Como dito anteriormente, a equação não tem resolução analítica para sistemas com mais de dois corpos e para resolvê-la usamos aproximações. Para o caso molecular, uma aproximação bastante utilizada é a aproximação de Born-Oppenheimer que permite separar o movimento nuclear do movimento dos elétrons em função da grande diferença de massa.

Equação de Schrödinger independente do tempo, para um sistema molecular:

$$\hat{H}(r, R)\Psi(r, R) = E \Psi(r, R) \quad (3)$$

R se refere a coordenadas nucleares e r se refere a coordenadas eletrônicas. O hamiltoniano \hat{H} , contém os termos que descrevem as energias cinéticas dos núcleos e elétrons e termos de interações eletrostáticas entre eles, e Ψ é a função de onda do sistema (TRZESNIAK, 2002). Nesta aproximação, os núcleos são considerados em posições fixas R e a equação de Schrödinger é resolvida para os elétrons em função de cada posição dos núcleos.

Existem alguns procedimentos matemáticos para resolver esta equação visando a obtenção da função de onda do sistema e conseqüentemente a sua energia total. (SANT'ANNA, 2009). Por exemplo, a energia do sistema pode ser encontrada a partir da resolução de uma série de equações que são chamadas de equações de Hartree-Fock. Na teoria de Hartree-Fock, elétrons são considerados imersos um no campo médio do outro, ou seja, os elétrons não interagem explicitamente uns com os outros, mas sim com o campo médio gerado pelos outros elétrons do sistema, e desta forma as correlações eletrônicas são ignoradas (SANT'ANNA, 2009).

O método Hartree-Fock representa uma base fundamental para boa parte dos métodos *ab initio*, e do ponto de vista de implementação computacional os orbitais atômicos são descritos através de um conjunto de funções matemáticas conhecidas denominadas funções de base sendo as funções do tipo gaussianas as mais utilizadas (SANT'ANNA, 2009; NETO, 2010).

Em relação aos métodos semiempíricos, o procedimento para solução da equação de Schrödinger é parecido com o do método Hartree-Fock, uma diferença importante é que nos métodos semiempíricos só os elétrons de valência são tratados explicitamente. Através de um conjunto mínimo de funções de base.

Em relação aos elétrons mais internos (os elétrons de caroço) eles são contabilizados por blindagem e essa aproximação já reduz consideravelmente a quantidade de integrais que precisam ser calculadas, reduzindo desta forma o tempo computacional necessário para se determinar a função de onda e a energia total do sistema em comparação com o método Hartree-Fock e demais métodos *ab initio* (TRZESNIAK, 2002).

Ambos os métodos mencionados anteriormente dependem explicitamente da função de onda, mas existe um método alternativo que depende apenas da densidade eletrônica que é o método baseado na Teoria do Funcional de Densidade (DFT) (LIMA, 2010).

Os métodos baseados na DFT apresentam uma demanda computacional comparável ao método Hartree-Fock, porém com a vantagem de incluir explicitamente o efeito da correlação eletrônica, propriedade esta que pode ser crucial na determinação de algumas propriedades químicas de um dado sistema. Além disso, outra vantagem dos métodos da DFT é o fato de

usar a densidade eletrônica (uma grandeza mensurável e de fácil interpretação) em detrimento ao caráter abstrato da função de onda.

Cálculos computacionais baseados nos métodos mencionados podem ser feitos utilizando códigos computacionais distribuídos comercialmente, como é o caso do programa Gaussian09 que usaremos neste trabalho, bem como através de códigos livres como o caso do programa Gamess-US ou Orca, dentre outros.

3.3 SOLVATAÇÃO E PROCESSO DE SOLVATAÇÃO

Conforme foi dito na introdução, Bem-Naim (1984) define solvatação como o processo de transferência de um soluto da fase gás para a fase líquida, com temperatura e pressão constante. Partindo desta definição, podemos descrever uma interação soluto-solvente. Esta interação é chamada de energia livre de solvatação ΔG_{solv}^* (PLIEGO, 2006).

De acordo com Pliego (2006), se considerarmos inicialmente um equilíbrio de um soluto na sua fase gasosa e líquida, tendo a concentração $[C]_g$ (fase gás) e $[C]_{\text{sol}}$ (fase solução, aquosa), teremos um equilíbrio:



Como estamos tratando de duas fases, podemos relacionar o ΔG_{solv}^* com o potencial químico, teremos que escrever o potencial do soluto para cada fase:

$$\mu_{\text{sol}}(C) = \mu_{\text{sol}}^*(C) + RT \ln[C]_{\text{sol}} \quad (5)$$

$$\mu_g(C) = \mu_g^*(C) + RT \ln[C]_g \quad (6)$$

No equilíbrio, temos que a diferença entre a fase solução e a fase gás é igual a zero. Então temos que:

$$\Delta G_{\text{solv}}^*(C) = \mu_{\text{sol}}^*(C) - \mu_g^*(C) \quad (7)$$

Para sabermos o potencial do soluto, basta combinar a eq. 5 com a eq. 7, logo teremos:

$$\mu_{\text{sol}}(C) = \mu_g^*(C) + \Delta G_{\text{solv}}^*(C) + RT \ln[C]_{\text{sol}} \quad (8)$$

Esta energia livre de solvatação é a afinidade que soluto possui com o solvente (PLIEGO, 2006). Segundo a IUPAC (2006), a energia livre de solvatação é a mudança na energia de Gibbs, se algum íon ou molécula for transferido do vácuo/gás para a fase aquosa (solvente) e que essa energia possui contribuições:

- 1 – da energia de cavitação (buraco), que se forma devido a transferência do íon ou molécula,
- 2- energia de orientação dos dipolos,
- 3- energia eletrostática e
- 4- energia de interações não covalentes.

Em resumo, pode-se dizer que basicamente:

$$\Delta G_{\text{solv}}^* = \Delta G_{\text{cav}} + \Delta G_{\text{dip}} + \Delta G_{\text{e}}^* + \Delta G_{\text{inc}}^* \quad (9)$$

Quando tratamos da representação discreta do solvente, moléculas de soluto e solvente têm volume próprio. Neste modelo de representação, é preciso definir uma cavidade (ΔG_{cav}) para o soluto e em torno do soluto fica o contínuo dielétrico, este contínuo dielétrico gera um potencial eletrostático e este pode ser representado por uma densidade de carga (PLIEGO, 2006). Se pensarmos ainda numa delimitação de região onde se encontram este dielétrico o potencial eletrostático gerado ainda pode ser representado na forma de densidade de carga de volume e superfície (PLIEGO, 2006).

Agora, se considerarmos o soluto fixo (sem movimento) numa região qualquer do espaço, teremos o que diz a definição de Bem-Naim (mostrada no início deste capítulo e na introdução). Dessa forma, o potencial químico do soluto se reduz apenas a energia livre de solvatação ΔG_{solv}^* e a variação da energia livre de Gibbs no processo, corresponde a diferença do potencial químico do soluto na fase aquosa e na fase gás, que é também o trabalho (W) do processo de transferência, como mostrado na equação 10 (PLIEGO, 2006).

$$\Delta G = \mu_{\text{sol}}^* - \mu_{\text{g}}^* = W = \Delta G_{\text{solv}}^* \quad (10)$$

Considerando agora moléculas carregadas e o processo de carregar o espaço ocupado pela molécula de soluto, o trabalho realizado neste processo (em uma variação de carga) será a soma/integral de todos os elementos de carga dq e simplificando o processo chegamos à equação 11. (PLIEGO, 2006)

$$W = \frac{1}{2} \int \varphi(\vec{r}) \rho(\vec{r}) dV_r \quad (11)$$

Em que φ é o potencial eletrostático, $\rho(\vec{r})$ é a densidade de carga do soluto e dV_r é um elemento de volume. A equação serve para ambas as fases (gás e líquida).

3.3.1 Modelo de solvente implícito e explícito

Para se trabalhar solvatação, existem dois modelos que podem ser utilizados para os sistemas que se quer solvatar: o modelo de solvente implícito e o modelo de solvente explícito (NAMBA; SILVA; SILVA, 2008).

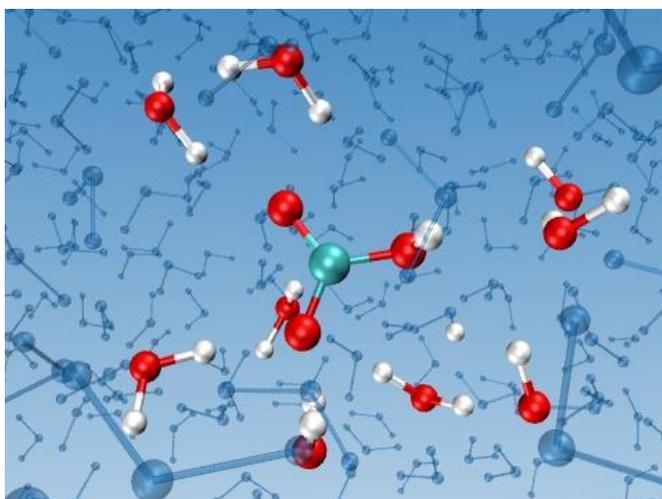
No modelo do solvente explícito, todas as moléculas são consideradas explicitamente interagindo com o soluto. Já no modelo de solvente implícito, considera a influência média de um solvente por estimativa direta da energia livre de solvatação (NAMBA; SILVA; SILVA, 2008). Em outros termos, no modelo implícito, o solvente é tratado como um contínuo dielétrico.

Em termos de precisão, o modelo explícito seria melhor para descrever as contribuições das interações soluto-solvente, mas isso não elimina a utilidade do modelo contínuo, uma vez que tem a vantagem de um custo computacional mais baixo (PLIEGO, 2006).

No modelo contínuo, todas as moléculas de água são substituídas (diferente do modelo explícito, que considera as moléculas explicitamente) pelo contínuo dielétrico e este tem a mesma constante dielétrica do solvente (LIMA, 2010).

A figura 1 representa o processo de solvatação do íon HCO_3^- , utilizando o modelo do solvente explícito. A figura foi obtida computacionalmente através de cálculos de Dinâmica Molecular.

Figura 1. Representação da primeira camada de solvatação para o íon HCO_3^- .



Fonte: Os autores (2017)

3.3.2 O Modelo de Born para Solvatação

O modelo aqui descrito é um modelo relativamente simples que nos permite calcular a energia livre de solvatação se considerarmos algumas restrições. Este talvez seja o primeiro modelo a ser utilizado para explicar a energia livre de solvatação para íons e segundo Born, devemos tratar o solvente como um contínuo dielétrico e considerarmos o íon como uma esfera rígida com certo raio R e com carga pontual (FREITAS; SILVA, 1995).

O modelo de Born serve para prever algumas informações sobre como a energia livre de solvatação varia com alguns parâmetros, sendo eles: carga, raio da cavidade e constante dielétrica (PLIEGO, 2006). Sendo a equação de Born:

$$\Delta G^*_{\text{solv}} = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r} \left(1 - \frac{1}{\kappa} \right) \quad (12)$$

Na equação 12, q representa a carga do íon, κ representa a constante dielétrica e r representa o raio do íon. A partir da equação de Born podemos estabelecer algumas relações. Uma carga +2, por exemplo, afeta a energia livre de solvatação. Nesse caso, a energia deverá quadruplicar, já que nesta equação a carga é elevada ao quadrado. No caso do raio, se este for aumentado, a energia livre de solvatação acaba diminuindo (PLIEGO, 2006).

O ΔG_{solv}^* pode ser obtido da seguinte forma:

Passo 1: Retiramos a carga do íon/molécula em fase gás (W_1);

Passo 2: Inserimos o íon descarregado na fase aquosa (no solvente) (W_2);

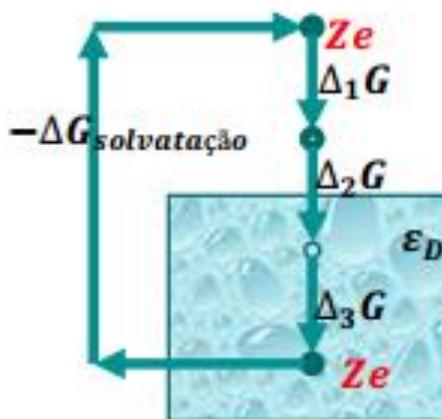
Passo 3: Carregamos o íon (W_3) e

Passo 4: Retiramos o íon do solvente para o vácuo (W_4).

Cada um desses passos pode ser visto na figura 2, onde representamos o esquema do modelo de solvatação, considerando o modelo implícito do solvente. Cada passo do ciclo termodinâmico pode ser considerado como trabalho W , pois temos que na Termodinâmica - $\Delta G = W_{\text{máx}}$ com pressão e temperatura constante, como é o caso do ΔG_{solv} . Pensando na equação 12, onde Born calcula a energia livre de solvatação a partir de alguns parâmetros, o W_2 é nulo, uma vez que o soluto não possui carga. Esse é o trabalho, relacionado ao trabalho de criar uma cavitação para inserir o íon na fase aquosa.

Considerando um ciclo termodinâmico em que: $W_1 + W_2 + W_3 - W_4 = 0$, e que $W_4 = G_{\text{solv}}$, teremos a relação: $\Delta G_{\text{solv}} = W_1 + W_2 + W_3$.

Figura 2: Esquema de Representação do ciclo de Born



Fonte: Própria

3.4 O ENSINO DE QUÍMICA ALIADO A *SOFTWARE*

Um aspecto que pode ser observado no ensino de química é a grande dificuldade dos estudantes compreenderem na totalidade aspectos a nível atômico e molecular. Por se tratar de uma forma mais abstrata de pensamento, muitos estudantes possuem essa dificuldade.

Uma das coisas que pode ser feita para ser quebrada essa dificuldade é o uso de Química Computacional no ensino. Pesquisadores atualmente concordam que o uso de *software* pode levar a uma melhor compreensão de aspectos atômicos e moleculares que em algumas situações são negligenciados (RAUPP; SERRANO; MARTINS, 2008).

No que diz respeito a essa situação, da aprendizagem em química mediada pelo computador, Ramos e Serrano (2013) apontam para a necessidade de um melhor desenvolvimento neste campo de pesquisa, pois poucos são os trabalhos desenvolvidos no período de uma década (2001-2011) no Brasil. Daí a importância de se fomentar trabalhos relacionados ao ensino de química aliados ao computador.

Segundo Ramos e Serrano (2013), os trabalhos produzidos dentro do período 2001-2011 apontam que a Química Computacional pode ser uma grande aliada ao ensino, sendo uma mudança estimulante com a introdução de *software* de modelagem molecular para a abordagem de vários tópicos, inclusive tópicos que requeiram a ideia conceitual do que se quer trabalhar.

Existe uma carência grande de trabalhos quando se fala em formação do conceito de solvatação e uma carência ainda maior quando se trata do conceito aliado ao uso de *software*,

considerando nesta perspectiva que a tecnologia não é um aspecto novo, já que há vários anos vem sendo desenvolvida.

Pensando dentro da perspectiva de que a tecnologia pode ser uma grande aliada da educação, ela não é algo novo. Ribeiro e Greca (2003) apontam que os *software* passaram a ser aliados ao ensino há pouco tempo atrás, foi só em 1995 que os *software* começaram a ser usados de forma efetiva em sala de aula. Alguns anos mais a frente aponta-se também o uso de *software* relacionados à autoaprendizagem, isso no caso do Brasil. A realidade no ensino superior já era bem diferente nesta época, programas computacionais já eram utilizados em modelagem molecular para prever propriedades físico-químicas em pesquisas de química aplicada e no ensino.

Embora tenha tido avanços consideráveis no uso da tecnologia percebemos que dentro do campo educacional passou-se muito tempo para que pudéssemos aliar tecnologia e educação e acreditar nas possíveis potencialidades do uso dessa ferramenta.

Atualmente já dispomos de ferramentas que nos proporcionam visualizações de modelos, dessa forma a aprendizagem deixa de ser puramente mecânica, no sentido de elaborar um conceito e pode ser um pouco mais flexível no sentido de que podemos modelar fenômenos e desenvolver compreensão conceitual (RIBEIRO; GRECA, 2003).

É dentro desta perspectiva que estão os programas de simulação e modelização. Eles descrevem um sistema real, seguindo modelos e teorias no qual este sistema se torna uma representação do modelo real, mas sem limitações, ou seja, vários aspectos do sistema podem ser “moldados” (RIBEIRO; GRECA, 2003).

Um bom exemplo de *software* de modelagem é o que utilizamos neste trabalho, o Gaussian09. Este *software* realiza diversos tipos de cálculos, dentre eles: ΔG de solvatação (que é o tipo de cálculo específico que faremos para compreensão do conceito de solvatação), cálculo de energia pontual, otimizações de energia, densidade eletrônica, potencial eletrostático, entre outros.

O uso de tais *software* é uma excelente ferramenta em sala de aula, auxiliando na resolução de problemas em química, tanto para o ensino quanto para indústria. Um exemplo bem claro é o uso de ferramentas de modelagem molecular na produção de fármacos (RAUPP; SERRANO; MARTINS, 2008).

Desta forma, se torna claro que *software* computacionais podem ser inseridos no meio educacional e que, de fato, eles se tornam grandes aliados quando existe a orientação de um professor ou de um par mais capaz. Neste sentido, o computador pode servir como uma Zona de Desenvolvimento Proximal, que discutiremos no tópico seguinte.

3.5 ZONA DE DESENVOLVIMENTO PROXIMAL

Dentro deste tópico, abordaremos questões que dizem respeito à como aprendemos e como se dá nosso desenvolvimento. Tais discussões serão feitas a partir do pensamento de Vygotsky, em que a linguagem e o desenvolvimento social são importantes para que se justifique como se dá a aprendizagem.

O desenvolvimento de uma criança começa mesmo antes da criança frequentar a escola, quer seja quando ela assimila nomes de coisas/pessoas que estão a sua volta ou quando se deparam com algumas situações em que precisam fazer operações matemáticas, por exemplo (VYGOTSKY, 1991).

Embora muitas vezes pudesse achar que a criança só realmente aprende quando está na escola e desenvolve aprendizados de uma forma “científica” mas, a criança/adolescente/adulto aprende dentro de qualquer contexto (aprendizagem de um modo mais amplo, não apenas o aprendizado escolar).

Dentro deste contexto, é comum afirmar-se que a criança deve aprender a ler e estudar matemática numa determinada faixa etária mas não podemos nos limitar a determinação de níveis de conhecimento se queremos saber a relação entre processo de desenvolvimento e capacidade de aprendizado (VYGOTSKY, 1991).

É a partir deste fundamento que Vygotsky define a Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP) quando se determina níveis de desenvolvimento da criança: O primeiro nível é chamado de desenvolvimento real, o nível em que já desenvolvemos algumas funções mentais que são resultado de um ciclo de desenvolvimento completado e o segundo nível é o chamado de desenvolvimento potencial, o nível em que resolvemos problemas com a ajuda de um adulto ou um par que seja mais capaz (VYGOTSKY, 1991).

E a ZDP é justamente a distância entre o nível real e o nível potencial, e em termos mais simples, é a distância entre o que a criança já sabe à o que ela pode aprender.

Nessa perspectiva, é importante ressaltar que a ZDP não leva a imitação, mas leva ao aprendizado. Por exemplo, se considerarmos que uma criança veja um adulto (ou o par mais capaz, que pode ser outra criança) fazer algo e mais a frente tenta fazer o mesmo, ela estaria imitando-o. Mas, somente o que a criança consegue fazer sem qualquer tipo de demonstração ou pistas é o que leva ao aprendizado. De acordo com Vygotsky (1991), um exemplo claro disso é quando uma criança não consegue resolver um problema de matemática e o professor o resolve, a criança consegue assimilar a solução rapidamente, mas se o professor resolvesse o

problema utilizando uma forma mais complexa, a criança não conseguiria compreender a solução embora copiasse ‘n’ vezes.

Aprender também perpassa algumas outras questões, em um dos exemplos citados em seu livro Zittoun et. al (2011), sugere que não apenas aprendemos com um professor ou um colega, afinal também aprendemos quando lemos um livro, observamos fenômenos, e a partir disto nós construímos novos significados e também temos a possibilidade de construir uma ZDP. Arruda, Filho e Siqueira (2016), apontam também que a partir de uma intervenção utilizando *software*, o uso das ferramentas e interações possibilitaram o surgimento de uma ZDP.

Agora se pensarmos na perspectiva de Química Computacional e no que foi explicado sobre a ZDP, o computador pode ser o sujeito mais capaz no processo de aprendizado, ou seja, o computador pode criar uma ZDP para que o aluno alcance o segundo nível de desenvolvimento, o nível de desenvolvimento potencial (uma vez que o aluno já tenha tido orientação para usar a ferramenta ou saiba utilizá-la).

Pensando dentro deste contexto, que o aluno possua o mínimo domínio da ferramenta, e levando em consideração que o computador pode desenvolver no aluno habilidades, no sentido de que na modelagem molecular ele pode testar hipóteses e ter o controle sobre algumas variáveis como por exemplo, se ele utilizar o método de dinâmica molecular, temperatura e pressão podem ser variadas, nos deixa mais clara a ideia de que o computador pode servir como construtor de uma ZDP.

De acordo com Salomon; Globerson e Guterman (1989), o computador pode ser uma ferramenta que realiza a função de orientação servindo como guia metacognitivo ao aluno e que poderia ser internalizado por eles, no sentido de que ainda teriam um resíduo cognitivo da tarefa executada.

Pensando nesta perspectiva de que o par mais capaz, o par que orienta pode ser um agente metacognitivo, Fino (2001) atenta que podemos comparar o trabalho do professor ao trabalho de um andaime em um edifício que o sustenta a medida que vai sendo construído e vão sendo retirados quando a estrutura já consegue se sustentar sem ajuda. Em outros termos, o professor orienta o aluno de tal forma, que a medida que ele vai se desenvolvendo ele já pode realizar algumas tarefas sozinho, ou seja, quando o aluno chega ao aprendizado.

Logo, se pensarmos no computador como o par mais capaz ele pode desempenhar essa mesma função de orientação (a partir do momento que ele já tenha um domínio mínimo do uso da ferramenta) e o aluno a partir do momento que o utiliza e desenvolve habilidades, ele pode internalizá-las.

O que se espera desta atividade experimental, é que os participantes consigam interferir um na ZDP do outro, a partir das atividades que serão explicitadas na metodologia e também que o computador possa servir como ZDP (a partir do momento que o aluno interage com a ferramenta) para o que o aluno consiga (re)construir o conceito de solvatação, levando em consideração que o participante pode vir a ter duas formas de alcançar o que estava na sua Zona de Desenvolvimento Potencial e agora passa a estar na Zona de Desenvolvimento Real.

4 METODOLOGIA

A pesquisa teve uma abordagem qualitativa, pois aqui não estávamos preocupados com as quantidades numéricas obtidas e sim com o aprofundamento das informações que foram obtidos neste trabalho de conclusão de curso (GERHARDT E SILVEIRA, 2009), buscando compreender como os alunos do curso compreendem sobre o tema solvatação. A pesquisa foi realizada no laboratório Andorinhas da UFPE/CAA e numa sala de aula.

O universo da pesquisa foram os estudantes do curso de Química-Licenciatura da UFPE/CAA que já tinham cursado ou estavam cursando a disciplina de Físico-Química II. Tal especificidade se deu ao fato de que os estudantes precisavam ter concepções prévias sobre a variação da energia livre de Gibbs, a variação da energia livre de Helmholtz, variação de entropia e potencial químico, para uma melhor compreensão da energia livre de solvatação.

A pesquisa foi realizada com um grupo de 6 alunos voluntários que se dispuseram a participar da pesquisa, já que esta foi realizada em mais de um momento. Os estudantes que se voluntariaram a participar deveriam preencher um cadastro que foi disponibilizado online no grupo do Facebook, onde a comunidade do curso está inserida, mais especificamente o grupo do Diretório Acadêmico do Curso de Química (DAQ).

Após este cadastro prévio, os alunos passaram pelas etapas desta pesquisa. Antes de a pesquisa iniciar os alunos assinaram um Termo de Consentimento Livre Esclarecido (TCLE), a fim de que as dúvidas sobre as pesquisas fossem sanadas, mas a qualquer momento os estudantes poderiam procurar o pesquisador para que algo que não tivesse ficado claro fosse esclarecido. O TCLE está disponível no APÊNDICE A.

Abaixo estão descritas as etapas que foram realizadas a fim de atender os objetivos específicos descritos nesta pesquisa. Foram realizadas basicamente 4 etapas, as quais estão listadas a seguir:

Etapas 1: Pré-teste sobre o conceito de solvatação e energia livre de solvatação que será discutido na pesquisa;

O pré-teste teve a pretensão de conhecer o que os estudantes já entendiam por solvatação, desde o conceito até a compreensão do processo e energia livre do processo. Também teve a pretensão de conhecer o que eles já entendiam por modelagem molecular, *software* de modelagem, etc. Já que os mesmos fizeram uma atividade utilizando dados de um programa de modelagem molecular. O pré-teste teve 6 questões discursivas. As questões estão apresentadas na tabela 2.

Tabela 2. Questões que foram aplicadas no pré-teste.

Questões
1. O que você entende quando se fala em solvatação?
2. Para você solvatação é um processo que se dá com alteração de energia do sistema? Isto é, que precisa absorver ou liberar energia para ocorrer?
3. Você já ouviu falar em Química Computacional? O que você supõe que seja?
4. O que você entende por modelagem molecular?
5. Para que servem os programas computacionais (<i>software</i>) de modelagem molecular? Você já usou algum? Qual?
6. Descreva brevemente o que você entende por métodos clássicos e métodos quânticos.

Etapa 2: Breve explicação sobre os métodos computacionais e sobre o ciclo termodinâmico de Born;

Como os participantes não trabalharam com modelagem molecular ou não conheciam, foi realizada esta etapa com o intuito de que os participantes compreendessem como é o processo de modelagem molecular e sua utilização nos ramos da Química. Esta etapa foi realizada em uma sala de aula. Vale ressaltar aqui que o propósito desta etapa não foi que os alunos soubessem como usar todos os métodos computacionais, mas se ter uma ideia das aplicações e como executar a atividade que foi proposta neste trabalho, já que a maior parte dos participantes não conheciam os métodos computacionais.

De uma forma bem geral, foram explicados aos participantes os principais ramos da Química Computacional: a mecânica clássica e a mecânica quântica e os métodos utilizados para descrever átomos e moléculas, nestes modelos.

Outra breve explicação foi feita para os participantes sobre o ciclo termodinâmico de Born, a ideia era que os estudantes soubessem qual a função do ciclo e como se calculava energia livre a partir dele. Também explicamos nesta etapa, a ideia do modelo de solvente implícito e explícito bem como suas diferenças. Neste momento, foi feita uma pergunta sobre o ciclo de Born, a qual os alunos responderam individualmente.

Etapa 3: Aplicação da atividade computacional com os participantes da pesquisa;

A aplicação desta atividade foi realizada no laboratório de informática Andorinhas, no CAA. Os alunos se dividiram em duplas para trabalhar com a simulação proposta, as duplas foram escolhidas pelos próprios participantes, acreditamos que assim a pesquisa se desenvolveria melhor, no sentido de que cada um escolheu alguém com quem teria mais afinidade e assim, possivelmente haveria maior interação entre os pares. Como o programa proposto inicialmente na pesquisa é um programa pago, este não pode ser instalado nos computadores do laboratório. Então, fizemos uma simulação computacional para alguns íons calculando sua energia livre de solvatação e os resultados desta simulação foram entregues

aos participantes e orientamos as atividades que se prosseguiram. O programa utilizado aqui (como dissemos na introdução e no tópico 3.4 da nossa revisão de literatura) foi o Gaussian09, utilizando para este tipo de cálculo o modelo do solvente implícito. Detalhes da simulação que fizemos e como foi feito este tipo de cálculo, pode ser visto no APÊNDICE B, caso o leitor se interesse e queira realizar a simulação.

Durante a aplicação da atividade computacional, foram feitos “*quick tests*” estes testes tiveram o propósito de avaliar o quanto os alunos estavam entendendo sobre o processo de solvatação. Os “*quick tests*” foram feitos em tempo real (com o auxílio do email do Google). Todas as respostas também foram guardadas em tempo real, com o intuito de que os alunos não poderiam alterar o que já tinham escrito. A dupla pôde discordar entre si, já que eles poderiam também conversar entre si. Se houvesse discordância de opiniões, eles precisaram registrá-las e identificá-las com um nome fictício ou um número para que fosse feita uma melhor análise.

Os estudantes também calcularam valores de energia livre para alguns íons, a partir do ciclo termodinâmico de Born, os dados de raio iônico e constantes foram fornecidos para que os estudantes pudessem fazer os cálculos, nesta etapa eles também compararam com resultados experimentais e discutiram sobre a discrepância de valores, com os “*quick tests*”.

Os resultados de energia livres obtidos computacionalmente foram comparados com resultados experimentais e os resultados que foram obtidos pelos próprios participantes, utilizando a equação de Born, tomando como base o ciclo termodinâmico de Born.

Ainda sobre a pesquisa, por estarmos levando em conta uma teoria interacionista para explicarmos como se deu o processo de aprendizagem, a atividade exposta nesta etapa foi filmada com intuito de verificarmos com uma maior precisão os momentos em que houve interações entre participante-participante, participantes-computador e participantes-pesquisador.

A atividade citada foi orientada pelo pesquisador.

Etapa 4: Análise dos pré-testes e “*quick tests*” para a elaboração dos resultados.

Os pré-testes tiveram como objetivo analisar o que os alunos já compreendiam sobre solvatação, processo de solvatação e métodos de modelagem molecular, para que pudessemos dar prosseguimento com as atividades, como foi explicitado na descrição da primeira etapa da metodologia. Serão também apresentadas nos resultados tais concepções para que possamos entender se houve alguma evolução durante o processo de aplicação desta pesquisa.

Já os “*quick tests*” foram analisados de acordo com 3 critérios que partiram dos referenciais teóricos sobre ZDP e que são listados a seguir: 1 -suporte com o computador; 2 - Interação entre os pares e 3- Interação com alguém mais experiente.

Para o primeiro critério de análise foi considerado o envolvimento dos alunos com a atividade experimental no computador, se eles foram ativos no processo no sentido de se engajarem na atividade. Também foi considerado aqui se os alunos conseguiram (re)construir o conceito de solvatação e o entendimento do processo através do cálculo de energia livre do processo, saber se nesse sentido, eles conseguiram entender quais as contribuições que existem para o cálculo de energia livre.

Para o segundo critério foi considerado o nível de interação entre os pares/duplas durante as atividades se eles concordaram ou discordaram muito, e se conversaram muito entre si. Se por meio do diálogo e interações os alunos/duplas conseguiram construir novas interpretações, novos conhecimentos e ampliação destes novos conhecimentos.

Para o terceiro critério, consideramos um alguém mais experiente. Nesta atividade, o alguém mais experiente pode ser um dos alunos da dupla e também o pesquisador, já que este fez a mediação das perguntas e o encaminhamento durante o processo de aplicação da atividade experimental.

O que é interessante aqui e que vale destacar é que a ZDP possibilita a conversação entre mais de duas pessoas (no caso deste trabalho, será a dupla na atividade e o pesquisador fazendo a mediação online).

Neste sentido, as pessoas envolvidas podem apresentar concepções diferentes e que uma pode interferir na ZDP da outra, fazendo com que assim, se discutam diferentes pontos de vista sobre determinados aspectos e que a partir destes puderam emergir novas concepções para o estudo em questão.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste tópico, discutiremos os resultados que foram obtidos nesta pesquisa a partir das etapas propostas na metodologia. Os resultados e discussões serão discutidos de acordo com a ordem de atividades propostas no tópico de metodologia. Primeiro serão apresentados os resultados das análises dos pré-testes e após isso, os resultados dos *quick tests* levando em consideração os critérios explicitados no tópico da metodologia. Os nomes dos participantes foram alterados com o intuito de preservar suas identidades, por vezes daremos nomes ou daremos números que representem as duplas. Fizeram parte desta pesquisa: Ícaro e Eros (dupla 1), Aquiles e Isis (dupla 2) e Maia e Íris (dupla 3).

5.1 ANÁLISES DOS PRÉ-TESTES

Com relação às perguntas, traremos aqui as que nos chamou mais atenção e faremos uma análise geral, trazendo os principais pontos que os estudantes conseguiram descrever acerca do tema solvatação e do uso de Química Computacional. O pré-teste, pode ser visualizado integralmente no APÊNDICE C.

Com relação à primeira pergunta, quando questionados sobre o que era solvatação, alguns alunos até trouxeram termos que faziam relação com o tema, mas que não se aproximava do conceito que era pedido na questão. Algumas citações como forças intermoleculares, íons, substâncias, efeito quelato, não interações, energia e a ideia de cargas parciais estavam nas respostas. Por exemplo:

Eros: A solvatação é descrita como sendo a interação entre substâncias, por exemplo, um íon positivo disperso na água é solvatado, pois há interação intermolecular entre o íon e o átomo de oxigênio que possui carga parcial negativa, e com isso o íon é incapaz de reagir, pois está solvatado, é o que na inorgânica chama-se de efeito quelato onde os íons dos metais não reagem, pois os ligantes polidentados doam seus pares de elétrons ao íon e o estabilizam, como o ligante etileno diamina.

O que percebemos é o que o participante começa definindo solvatação como Atkins e Jones (2012) definem o termo solvatado, que diz que moléculas ou íons estão solvatados quando estão cercados por moléculas de solvente e tem interações com o solvente, e estar solvatado por água os autores definem como sendo hidratação. O participante começa

definindo o fenômeno parcialmente correto ,porém, mais a frente ele tenta rebuscar as palavras e foge do tema, pois ao tratar de efeito quelato¹, este não apresenta relação direta com solvatação.

No geral, os participantes não conseguiram chegar a uma definição de solvatação que fosse correta, mas chegaram a descrever várias coisas que também fazem parte do processo de solvatação, como interação intermolecular, por exemplo. No entanto, como estávamos buscando o entendimento dos mesmos em relação ao tema é normal que eles não soubessem a definição totalmente correta (cientificamente aceita), já que durante o curso a definição do processo, é pouco explorada

O que vemos no geral, como aponta Silva, Eichler e Del Pino (2012) é que o fenômeno de solubilidade é explicado pelos professores através da solvatação, mas, no fim não fica claro o que seria solvatação, pois a solubilidade é representada pelos livros e professores como um conjunto de moléculas do solvente para as partículas de soluto.

Segundo a IUPAC (2006), solubilidade é a composição analítica de uma solução saturada, que é expressa através de termos da proporção de um soluto qualquer em um solvente qualquer. Em termos mais simples, podemos dizer que solubilidade é o quanto de soluto que pode ser dissolvido em um solvente.

A confusão de conceitos pode ser devido ao fato de que, quando o professor desenha no quadro uma representação para solvatação, uma molécula de soluto rodeada por moléculas de solvente, o estudante acaba pensando que isso é a solubilidade e não solvatação.

Com relação à energia do processo, todos os participantes exceto um, acreditam que a solvatação é um processo energético, ou seja, um processo que necessita de energia para ocorrer. A participante que não concordou (Isis) escreveu como resposta: “forças intermoleculares”. Neste caso, acreditamos que a participante não entendeu a pergunta e por alguma razão não tirou sua dúvida.

Com relação ao entendimento dos estudantes sobre Química Computacional e modelagem molecular, percebemos que metade dos participantes conseguiu falar sobre o tema e dar respostas adequadas (Aquiles, Eros e Ícaro). Isso se deve ao fato destes estudantes terem cursado uma eletiva que é oferecida no curso, de Introdução a Química Computacional. Outras 2 participantes (Íris e Maia) conseguiram também trazer alguns aspectos que trazem a ideia geral da Química Computacional, aspectos como: técnicas computacionais, métodos

¹ O efeito quelato se refere a quando um complexo que tem um ligante que seja polidentado adquire uma maior estabilidade quando se comparado a um análogo que tenha um ligante monodentado (Shriver; Atkins, 2003).

teóricos, modelos para a aprendizagem, tipo de técnica para resolução de problemas envolvendo computador etc. foram citadas pelas estudantes.

A participante Maia, por exemplo, sobre a função dos *software* de modelagem molecular, citou: “Para auxiliar no processo de ensino e aprendizagem”. Esta é apenas uma das funções dos *software*. Como discutimos na revisão de literatura e introdução deste trabalho, inicialmente a Química Computacional utilizava estes *software* com o intuito de prever propriedades moleculares, físico-químicas, estimar arranjo de geometria, etc. Aproveitando a fala da participante, esta é a possibilidade que este trabalho pretende ter, utilizar a modelagem molecular/*software* para o ensino.

Quando questionados sobre métodos clássicos e métodos quânticos, as três participantes (Íris, Isis e Maia), que não tinham cursado a eletiva do curso, não souberam opinar sobre, respondendo, por exemplo: “não tenho entendimento sobre o assunto”. Os outros três participantes que cursaram a eletiva conseguiram trazer as ideias principais da mecânica clássica e a mecânica quântica.

Ícaro, por exemplo, respondeu: “*Nos métodos clássicos utiliza-se as teorias e experimentos com cálculos avançados da física clássica e os quânticos, da física quântica*”. O estudante responde a ideia bem geral dos métodos, mas que em resumo é uma ideia correta no que diz respeito ao questionamento.

As respostas dadas pelos participantes foram dentro do que esperávamos, pois é muito comum que eles não saibam o que é solvatação e tenham uma ideia pouco aprofundada do conceito e que nem mesmo saibam sobre as ideias de Química Computacional.

Tais resultados corroboram para o que o foi discutido durante o desenvolvimento deste trabalho. Ainda que a Química Computacional seja bastante difundida dentro do campo científico e que já esteja bastante consolidada, poucos são os estudantes que conhecem e entendem o porquê de se usá-la. Assim como o tema solvatação, pois mesmo já existindo modelos que são consolidados, devido à deficiência que existe nos componentes curriculares do curso, os estudantes não tem conhecimento sobre o tema.

5.2 ANÁLISE DOS *QUICK TESTS*

Assim como no tópico anterior, trataremos aqui as respostas que nos chamaram atenção e analisaremos de acordo com os três critérios propostos na metodologia, os quais partiram dos referenciais teóricos sobre ZDP. Porém, todos os quick tests podem ser observados no APÊNDICE C.

Assim que foi iniciada a explicação sobre o modelo de Born para solvatação e mostradas às etapas, bem como a ideia do modelo de solvente implícito e explícito a seguinte pergunta foi feita:

“Você consegue relacionar o processo de hidratação, com algum (uns) processo(s) descrito(s) no ciclo de Born?”

Como a pergunta foi respondida individualmente neste momento, a mesma foi feita novamente mais a frente no momento em que eles já estavam trabalhando em duplas e sendo assim, pudemos comparar se houve uma mudança na concepção dos mesmos.

Com relação à resposta a esta pergunta, 4 dos participantes acreditaram que a etapa 3 do ciclo de Born representaria a hidratação do íon e 2 dos participantes acreditaram que a etapa 4 do ciclo de Born representaria o processo de hidratação. A resposta que esperávamos era que o processo de hidratação é o próprio processo de solvatação, ou a soma dos processos $\Delta G_1 + \Delta G_2 + \Delta G_3$. Isso corrobora com a definição do Atkins e Jones (2012) quando os autores definem o termo solvatado, o íon estaria solvatado (hidratado) quando estivesse rodeado por moléculas de solvente, neste caso, a água. Os dois participantes que acertaram a resposta, conseguiram perceber que a similaridade entre o processo de solvatação com o processo de obtenção de energia livre de solvatação, uma vez que este processo é representado por $-\Delta G_{\text{sol}}$. Quanto aos demais alunos, acreditamos que eles se equivocaram e associaram o termo hidratação com a única etapa que envolve de fato o contato com do íon com o meio aquoso. Neste caso, podemos inferir que as respostas surgiram possivelmente da construção de uma Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP), uma vez que os estudantes nunca tiveram acesso ao tema de forma que fossem explicados alguns modelos para o entendimento de solvatação.

Esta ZDP, possivelmente foi construída com ajuda do par mais capaz, nesse caso, o pesquisador. Esta inferência também pode ser feita, uma vez que os participantes estavam envolvidos na atividade, de forma que se engajaram no processo de responder e à medida que surgiam dúvidas, estas poderiam ser tiradas junto ao pesquisador. O ciclo termodinâmico de Born foi explicado pelo pesquisador duas vezes, pois ficaram algumas dúvidas dos participantes na primeira explicação.

Mesmo algumas respostas sendo equivocadas, não significa que não houve o surgimento da ZDP. Uma vez que os estudantes mudaram suas concepções, isso mostra que houve o surgimento de uma ZDP, pois ela está relacionada ao fato de construir aprendizado por meio das interações e não relacionada ao fato de ser equivocado ou não.

Num segundo momento, com os estudantes já em dupla refizemos a pergunta acima, e sendo assim, agora podemos aplicar os três critérios com base no referencial teórico. Uma vez

que os estudantes já estavam trabalhando no computador e em duplas, pudemos observar a partir do material escrito e filmagens. Dessa forma, tentamos entender se houve o surgimento de uma ZDP, ou seja, se o estudante conseguiu sair da Zona de Desenvolvimento Real e alcançou a Zona de Desenvolvimento Potencial, baseando-se na ideia proposta por Vygotsky (1991).

No que refere ainda à pergunta que fizemos os estudantes além de já terem tido uma explicação prévia do modelo de Born para solvatação, como descrito, eles também receberam uma imagem por e-mail no dia da atividade (em tempo real) que mostrava o processo. Sendo assim, e com acesso a estes materiais, a resposta dos participantes foi unânime, todos acreditaram que o processo que representava a hidratação era o processo 4 ou o ΔG_{sol} . Diálogos ainda que curtos, entre as duplas, conseguiram construir estas novas interpretações. Como explicado na metodologia, os participantes escolheram suas duplas, de modo que cada um ficou na dupla que se sentia mais confortável, favorecendo assim uma maior interação. O que podemos inferir deste processo, é que a interação participante-ferramenta e participante-participante auxiliou no processo de construção de uma possível ZDP, uma vez que a ideia do processo tinha sido entendida e discutida entre as duplas. Acreditamos também que a imagem do processo deixou mais claro o entendimento dos mesmos.

Após explicar de maneira geral o ciclo de Born, o pesquisador mostrou aos estudantes como obter o ΔG_{sol} utilizando uma fórmula, (esta também proposta por Born) a partir da contribuição de cada energia presente no ciclo. Depois disso, perguntamos aos estudantes se eles esperariam que o ΔG_{sol} calculado seria igual ao experimental e por quê. As respostas foram unânimes, todos disseram que a energia seria diferente para ambos os casos, quando comparados. Os porquês divergiram, mas de certa forma todos perceberam a ideia geral. As respostas foram as seguintes:

Ícaro e Eros (dupla 1): Não. Devido ao fato de existirem aproximações matemáticas no cálculo rodado pelo computador que resumem a resolução das equações empíricas utilizadas, além das aproximações das constantes no cálculo feito manualmente.

Aquiles e Isis (dupla 2): Não. O resultado obtido experimentalmente será mais preciso, ou seja, menos possibilidades de erros. Já os resultados obtidos através da fórmula apresentada teremos uma taxa de erro maior, seja pelo arredondamento de valores já obtidos para as espécies ou por outras informações que não teremos acesso.

Íris e Maia (dupla 3): O ΔG é diferente, pois na parte experimental pode ocorrer alguma interferência externa e modificar o resultado teórico.

Apenas a segunda dupla conseguiu chegar a uma resposta adequada, porém, percebemos que todas chegaram ao mesmo consenso (acreditarem que não seria o mesmo resultado para as duas situações). No caso da primeira dupla, eles compararam o valor obtido por cálculos computacionais e experimentais. De fato, a depender do método utilizado, aproximações são feitas para a resolução do problema computacionalmente, no entanto essas aproximações são melhores e na maioria dos casos, sempre chega próximo ao resultado experimental.

No cálculo manual aproximações mais bruscas são utilizadas. No caso da dupla 2, embora deixe a questão da menor possibilidade de erro experimental aberta, acreditamos que essa possibilidade de erro que eles citaram seja o fato de estarmos tratando do sistema real, e que agora, nenhuma aproximação é feita e também nos cálculos feitos manualmente existiria um erro associado aos arredondamentos de cálculo. A dupla 3 acreditou que poderia ocorrer alguma interferência no ambiente e que isso afetaria o resultado dos cálculos, o que podemos perceber é que de certa forma é algo possível de acontecer a depender do processo experimental, no entanto, todas essas possibilidades de erros são reduzidas.

Novamente aqui podemos fazer as mesmas inferências, uma vez que os participantes estavam em dupla e com acesso a atividade em tempo real no computador, isso pode fazer com que surja uma ZDP. Durante toda a pesquisa os estudantes mantiveram o nível de interação, conversando, trocando ideias sobre o processo, tentando sempre chegar a um consenso e também mantendo o envolvimento com a atividade (considerando que eles estavam dispostos a chegar numa conclusão, pelo que pudemos ver no vídeo), isso faz com que as inferências sejam validadas. Considerando dentro desse contexto que agora o par mais capaz é a própria dupla.

Como eles fizeram a primeira inferência apenas analisando a fórmula de energia livre e tentando comparar com os resultados experimentais, pedimos agora que cada dupla calculasse a energia livre para um íon escolhido por eles, dentre três que pedimos que eles escolhessem (Na^+ , Ca^{2+} e Al^{3+}), a partir de cálculos computacionais disponibilizados para os mesmos de cada etapa considerando o ciclo de Born.

Uma vez que o *software* que precisaríamos para a atividade não estava instalado no laboratório já que era um *software* pago e não conseguimos fazer a atividade no nosso laboratório de pesquisa, os resultados de energia obtidos para cada fase que se encontrava o íon foram disponibilizados para os participantes no dia da atividade em tempo real. Dessa

forma, como os participantes não tinham tido acesso a *software* de modelagem molecular, os ensinamos (de forma rápida) a obter a informação que precisávamos, nesse caso, a encontrar dentro do output (arquivo de saída do programa) a energia livre de solvatação, após a realização do cálculo computacional.

O cálculo deveria ser feito da seguinte forma, por exemplo: para o $\Delta G_1 = \text{Na (gás)} - \text{Na}^+ \text{ (gás)}$, para o $\Delta G_2 = \text{Na (sol)} - \text{Na (gás)}$ e para o $\Delta G_3 = \text{Na}^+ \text{ (sol)} - \text{Na (sol)}$, o cálculo foi feito de forma análoga pra os outros íons considerando as fases que se encontravam. Esse cálculo também foi explicado aos participantes.

De posse dos dados de cada fase dos íons, os participantes calcularam o valor da energia livre de solvatação (ΔG_{sol}), tomando como base para fazer o cálculo, o modelo proposto por Born para solvatação, utilizando para o cálculo cada contribuição isolada (fornecida) e somando as três contribuições no final, já que $\Delta G_{\text{sol}} = \Delta G_1 + \Delta G_2 + \Delta G_3$. A dupla 1 escolheu o íon Al^{3+} , a dupla 2 escolheu o íon Ca^{2+} e, sendo assim, a dupla três ficou com o íon Na^+ .

Na tabela 3, mostraremos os resultados que os estudantes obtiveram a partir dos cálculos que disponibilizamos para eles, que foram feitos computacionalmente, de casa fase do íon (considerando o ciclo termodinâmico de Born). Os valores obtidos pelos mesmos foram comparados aos resultados que foram obtidos para os íons experimentalmente.

Tabela 3. Valores de energia obtidos por cada dupla para a solvatação dos íons a partir dos dados fornecidos.

Íons	Valor obtido (kJ/mol)	Valor experimental (kJ/mol) ²
Na^+	- 375, 2	- 406,0
Ca^{2+}	- 1466,9	-1582,3
Al^{3+}	- 2492,0	- 4599,2

Os dados obtidos pelos alunos foram simplificados, para que o leitor tivesse uma leitura mais clara dos valores, a partir de cada fase que o íon se encontrava que foi fornecido.

Nesta parte, todas as duplas apresentaram uma interação ainda maior. Acreditamos que isso se deve ao fato de que, por ser uma atividade que precisava de atenção, já que os participantes precisariam fazer cálculos, o nível de interação entre eles aumentou, assim como o nível de interação entre eles e o computador. Por vezes, eles voltavam à imagem de como calcular a energia a partir do ciclo termodinâmico e iam seguindo fazendo o que a atividade

² ATKINS, P. W. Data Section 2.16. In: ATKINS, P.W. **Physical Chemistry**. 5ed. New York: Oxford University Press, 2009. p. C16.

pedia. Surgiram também por vezes algumas divergências de opiniões entre as duplas, o que fez com que eles enriquecessem ainda mais a discussão para chegar a uma conclusão.

A dupla 3 errou um dos passos do cálculo de energia livre, fazendo com o que o resultado divergisse do valor experimental, ambas acabaram se confundindo com as etapas. No caso delas, esse seria o íon que mais se aproximaria do resultado experimental, por ser um íon pequeno. Num dos momentos dessa atividade em que Íris perguntou algo a Maia, ela fez um sinal de negação com a cabeça, informando que não sabia como fazer alguma etapa, ou chegar ao resultado final e alguns sorrisos nervosos apareceram durante a atividade. Perto do término da atividade, o pesquisador tirou algumas dúvidas delas em relação ao cálculo, mas ainda assim elas acabaram se confundindo.

No caso das outras duas duplas, o cálculo foi feito corretamente. A grande divergência nos resultados pode ser explicada a partir do próprio ciclo de Born, uma vez que no ciclo a energia de cavitação ou o ΔG_2 é desconsiderado quando se trata de íons, já que seria relativamente pequeno um íon. Alguns dos participantes notaram esse fato, como poderá ser visto mais à frente.

Os participantes também fizeram o cálculo de energia livre pela fórmula de Born e obtiveram os seguintes valores: $\text{Na}^+ = -699,72 \text{ kJ/mol}$, $\text{Ca}^{2+} = -2919,6 \text{ kJ/mol}$ e $\text{Al}^{3+} = -13722 \text{ kJ/mol}$. Vale lembrar que todos os valores que eram tabelados, (como o raio iônico que os participantes precisariam para fazer este tipo cálculo) foram disponibilizados para eles, no dia da atividade em tempo real. Aqui eles calcularam corretamente as energias, mas quando comparados aos valores experimentais há uma grande divergência nos valores, perguntamos também o que eles poderiam supor para explicar esta divergência e obtivemos as seguintes respostas:

Ícaro e Eros (dupla 1): A grande discrepância no resultado pode ser ocasionada devido ao fato de que não calculou-se a energia de cavitação na etapa 2.

Aquiles e Ísis (dupla 2): O valor encontrado não bate com o tabelado. O motivo pode ser porque não realizamos uma etapa/ passo do cálculo.

Íris e Maia (dupla 3): Uma das causas pode ser a demanda de energia livre quando realizado na prática experimental.

Como podemos ver aqui nas respostas apresentadas, tanto a dupla 1 quanto a dupla 2 atribuem a divergência de valores ao mesmo motivo, algum passo deixou de ser calculado.

Quanto a isso, eles responderam corretamente uma vez que no ciclo de Born, a energia livre do passo 2 pode ser desprezada (pensando na equação de Born (eq.12) para o cálculo de energia livre deste passo, o íon por sua vez estará descarregado, acarretando assim, em um $\Delta G_{\text{sol}} = 0$). Mas, agora quando comparamos ao resultado experimental isto é uma falha no modelo, já que podemos perceber que claramente as interações intermoleculares e a energia de cavitação também contribuem significativamente para a energia livre de solvatação.

A nossa última pergunta como forma de *quick test* foi a seguinte: “Após vocês terem calculado algumas formas de obtenção de energia livre e entender o funcionamento do ciclo de Born, como vocês definiriam agora solvatação?”. Então, obtivemos as seguintes respostas:

Dupla 1: É a energia mínima necessária para romper as interações intermoleculares do solvente com o íon favorecendo a mudança do estado de agregação aquoso para gás a partir da liberação de energia pelo sistema atômico-molecular estudado.

Dupla 2: É um processo que demanda energia para poder ser realizado, pois como trabalhamos com moléculas iônicas e propriamente íons isolados. Ao podermos realizar a solvatação temos que transformar o caráter iônico do átomo em neutro para depois, em solução, ionizarmos ele novamente, e todo esse processo necessita de energia para acontecer.

Dupla 3: É um processo energético em que é retirado a carga de um íon para ser imerso a um solvente, ou seja, combina-se moléculas de uma substância dissolvida com moléculas de um solvente.

No caso da primeira dupla, eles reconheceram que solvatação é um processo energético, que demanda energia para ocorrer, descrevendo a direção de passos que tomamos quando nos referimos ao ciclo de Born. Novamente, a dupla considera que a solvatação é o último passo do ciclo, no qual obtemos a energia livre de solvatação.

No caso da dupla 2, eles conseguiram chegar bem próximo da definição formal (cientificamente aceita). Eles já reconhecem solvatação como um processo energético e que cada passo de um ciclo energético, demanda certa quantidade de trabalho para ocorrer.

Em relação à dupla 3, elas conseguiram também enxergar a solvatação como um processo que demanda energia para ocorrer. O processo de solvatação elas relacionaram apenas com a primeira etapa, que é a etapa de remoção da carga de íon para inseri-lo no solvente. Neste caso, elas deveriam ter considerado o processo como um todo, desde a

remoção da carga até a inserção da carga novamente e considerar as fases gás e aquosa. Quando elas falam sobre as moléculas de substâncias dissolvidas, acreditamos que elas se referiram ao íon que seria solvatado pelo solvente. Mas, de nenhuma forma deixa invalidado o processo. Uma vez que os participantes reconhecem solvatação como um processo energético e conseguem calcular energia livre a partir de alguns dados, esta parte já é, possivelmente, resultado da construção de uma ZDP.

Neste sentido, ainda que houvesse algum tipo de erro na atividade, pudemos perceber que possivelmente surgiu uma ZDP em todos os momentos da atividade, já que ao conversarem entre si, a dupla consegue modificar suas concepções. Se voltarmos ao referencial teórico deste trabalho e lermos novamente na revisão de literatura como Vygotsky (1991) define a ZDP e as implicações dela quando tratamos do par mais capaz, podemos inferir que nesta atividade houve essa possibilidade de existência do par mais capaz, o par que orienta.

Quando observamos o vídeo, o que se pode notar é que sempre um dos pares iniciava a discussão sobre as perguntas feitas. Dessa forma, pudemos entender que um interferia na ZDP do outro. Os estudantes Ícaro, Aquiles e Maia, sempre iniciavam essas discussões. Isso faz com que a interação seja positiva, no sentido de propiciar uma maior discussão e assim, chegar a um consenso.

Consideraremos três possibilidades para o surgimento da ZDP, as mesmas que serviram de base de análise para os dados obtidos:

1- O computador: já que os participantes tiveram acesso a partir do objeto e com ele conseguiram ter um nível de envolvimento significativo, sendo ativos nos processo da busca por mais significados. Levando em consideração que toda a participação foi realizada on-line e os resultados dos cálculos computacionais eram vistos no computador, o que favoreceu bastante a interação participante-objeto e que esta interação leva a segunda interação;

2 – Interação entre as duplas: já que quase toda a atividade foi realizada em dupla e os mesmos conseguiram construir novas interpretações e significados ampliando seus conhecimentos no que diz respeito a alguns aspectos, como por exemplo, quando comparamos a atividade em que perguntamos qual seria o processo que representaria a hidratação. Tanto a parte individual quanto a parte em dupla (quando comparadas), percebemos que houve uma evolução, no sentido da reconstrução, de um novo significado, uma vez que eles mudaram suas concepções e por fim;

3- Interação com alguém mais experiente: entende-se por alguém mais experiente/par mais capaz, aquele que estaria um passo a frente do outro, em outras palavras, quando se estabelece o diálogo um participante que não estava entendendo um termo ou conceito e agora

passa a entender. Esse alguém mais experiente, consideramos o pesquisador e o colega da dupla. Durante toda a atividade houve esse tipo de interação em que os participantes estavam em constante diálogo para conseguir chegar a um consenso, sendo a interação entre pares e interação participante-ferramenta que possibilita o surgimento de uma ZDP.

As atividades realizadas nesta pesquisa contribuíram de forma significativa para a construção de conceito dos participantes. Levando em consideração este contexto e com os resultados que obtivemos com esta pesquisa, principalmente a parte dos resultados que foram extraídos através da parte escrita dos participantes, quando os mesmos tiveram acesso ao output do *software* Gaussian09 que foi disponibilizado para os mesmos, podemos inferir alguns aspectos:

1- A Química Computacional tem potencial para ser inserida no contexto de aprendizagem no ensino superior;

A Química Computacional mostrou-se como uma ferramenta que pode auxiliar no aprendizado, uma vez que os estudantes agora mostraram compreender o fenômeno de solvatação no caso das três duplas, mesmo que parcialmente, mas, já mostra que a ferramenta tem o potencial para desenvolver outros conceitos que são investigados nos campos da Química de uma forma mais geral.

2- O computador enquanto objeto tem o potencial de desenvolver uma ZDP e;

Nesse caso, sendo a Química Computacional considerada uma ferramenta de aprendizagem, sendo uma ferramenta de ampla utilidade, quando o participante tem acesso a ferramenta no computador, a interação estudante-computador possibilita o surgimento de uma ZDP, já que neste sentido, todas as informações de cálculos teóricos são mostradas no computador e dele são extraídos os dados que se procura.

3- A Química Computacional contribuiu de forma significativa no que diz respeito à aprendizagem de solvatação.

Dentro deste contexto, sendo uma ferramenta que contribui para a aprendizagem e sendo uma ferramenta que possibilita a construção de uma ZDP, a Química Computacional contribuiu de forma significativa para a construção de significados no que diz respeito à solvatação. Sendo este um processo que ocorre no nível atômico/molecular os *software* são de grande utilidade para a aprendizagem deste importante conceito.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, propomos uma forma diferente de ensinar o conceito de solvatação a estudantes do Ensino Superior, utilizar o computador como uma ferramenta de aprendizagem. Para entendermos de que forma consideraríamos se houve algum tipo de mudança na formação de conceito, usamos a teoria proposta por Vygotsky (1991) que é a Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP).

Dessa forma, após a aplicação da atividade no computador com os estudantes, percebemos que a interação que foi propiciada aos estudantes que participaram desta pesquisa favoreceu a construção de novos significados e novas formas de enxergar o conceito. Sendo assim, os alunos passaram a ter uma melhor compreensão do tema. Para este fim, foram proporcionados momentos que eles puderam participar ativamente da construção do próprio significado que tema tinha para os mesmos.

O computador mostrou-se como uma ferramenta que pode oferecer o aprendizado a cerca do tema, sendo uma ferramenta bastante útil nesse processo. Diante dos resultados que obtivemos, pudemos constatar que tanto a interação com o computador quanto a participação dos estudantes em dupla, forneceram momentos em que possíveis ZDP'S apareceram.

Sendo assim, quando o estudante é orientado por alguém mais capaz e sabe utilizar o computador como ferramenta, acreditamos que este poderá conceder o entendimento de vários conceitos referentes à área de Química, por se tratar de uma área em que precisamos de um nível maior de abstração para entendermos o que acontece na totalidade a nível atômico/molecular. Uma vez que o computador pode auxiliar nas representações e dessa forma, auxiliar na compreensão de diversos temas.

Além disso, acreditamos também que o computador também pode ser utilizado para outras áreas, como a física e a biologia, por exemplo. Já que dispomos atualmente de diversos *software* que podem simular sistemas reais.

Esperamos que o trabalho sirva para que os estudantes pesquisem e consigam refazer os cálculos de energia livre de solvatação que fizemos aqui e até que comparem com nossos resultados. A ideia é que os estudantes utilizem a ferramenta da Química Computacional, para prever alguns fenômenos físico-químicos e acreditamos que esta poderá ser uma ferramenta eficiente para a (re)construção de significados nos estudantes e que a ferramenta sirva como pontapé para a curiosidade dos estudantes. Esperamos também termos colaborado com as discussões de *software* no ensino de Química e ter contribuído de forma positiva para a aprendizagem do conceito de solvatação.

REFERÊNCIAS

ANTHONY, S. I. **Cognitive and instructional factors relating to students' development of personal models of chemical systems in the general chemistry laboratory II. Solvation in supercritical carbon dioxide/ethanol mixtures studied by molecular dynamics simulation.** 2014. 403 f. Thesis P.H.D. Colorado: Colorado State University.

ARRUDA, J. S.; FILHO, J. A.C.; SIQUEIRA, L. R. C. **O uso de tecnologias digitais na facilitação da emergência de zonas de desenvolvimento proximal em sala de aula.** In: V Congresso Brasileiro de Informática na Educação, 5., 2016. Anais dos Workshops do V Congresso Brasileiro de Informática na Educação. Uberlândia: Sociedade Brasileira de Computação – SBC, 2016. p. 771-780.

ATKINS, P. W. Data Section 2.16. In: ATKINS, P.W. **Physical Chemistry.** 5ed. New York: Oxford University Press, 2009. p. C16.

ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente.** 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.

BEM-NAIM, A. **Solvation thermodynamics of water in aqueous solutions. I. Theory and limiting effect of solutes.** J. Chem. Phys. v. 82, n. 10, p. 4662-4667. Maio, 1985.

CRAMER, C. J. **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models.** Jhon USA: Wiley & Sons LTD, 2002.

FINO, C. N. **Vygotsky e a Zona de Desenvolvimento Proximal (ZDP): três implicações pedagógicas.** Revista Portuguesa de Educação, v. 14, n. 2, p. 273–291, 2001

FREITAS, L. C. G.; SILVA, L. B. **Cálculo da energia livre de solvatação de íons e moléculas neutras utilizando o método de Monte Carlo.** Química Nova, v. 19, n. 2, p.166-172. 1996.

Gamess. **Introduction to GAMESS.** Disponível em: <
<http://www.msg.ameslab.gov/tutorials/gamessintro.pdf>>. Acesso em: 11/12/ 2017.

Gaussian 09, Revision A.02, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.

GERHARDT, T. E.; SILVEIRA, D. T.. **Métodos de Pesquisa.** 1º edição. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2009.

IUPAC. **Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book")**. Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). XML on-line corrected version: <http://goldbook.iupac.org> (2006-) created by M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; updates compiled by A. Jenkins. ISBN 0-9678550-9-8. Disponível em: < <https://doi.org/10.1351/goldbook> >. Acesso em: 11 dez. 2017.

LEWARS, E. G. **Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Chemistry**. 3rd Edition. Peterborough, Ontario. Springer International Publishing.

LIMA, G. F. de. **Desenvolvimento e teste de um modelo QM/MD/PCM para descrever solvatação e reações em solução usando resposta linear**. 2010. 132 f. Dissertação (Mestrado em Química). Minas Gerais: Universidade Federal de Minas Gerais.

MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. **Physical Chemistry: A Molecular Approach**. Sausalito, California. University Science Books. 1997.

NAMBA, A. M.; SILVA, C. H. T. P. **Dinâmica molecular: teoria e aplicações em planejamento de fármacos**. Eclética Química, Araraquara, v. 33, nº 4, p. 13-23, 2008.

NETO, O. P. V. **Projeto, otimização, simulação e predição de propriedades de nanoestruturas através de técnicas da inteligência computacional: nanotecnologia computacional inteligente**. 2009. 163 f. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica). Rio de Janeiro: Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

PLIEGO, J. R. JR. **Modelos contínuos do solvente: fundamentos**. Quim. Nova, v. 29, nº. 3, p. 535-542, 2006.

RAMOS, A. F.; NETO, A. S. **Estudo da aprendizagem mediada por computador: as contribuições da modelagem molecular para o ensino de química**. Novas tecnologias na educação, Rio Grande do Sul, v. 12, nº 2, p. 1-10, julho. 2014.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. **A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química**. Revista Liberato, Novo Hamburgo, v. 9, n. 12, p. 13-22, jul./dez. 2008.

RIBEIRO, A. A.; GRECA, I. M. **Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada**. Quim. Nova, v. 26, n. 4, p. 542-549, 2003.

SALOMON, G.; GLOBERSON, T.; GUTERMAN, E. **The Computer as a Zone of Proximal Development: Internalizing Reading-Related Metacognitions From a Reading Partner**. Journal of Educational Psychology, v. 81, n. 4, p. 620-627, jun. 1989.

SANTOS, H. F. **O conceito da modelagem molecular**. Cadernos temáticos da química nova na escola, nº 4, p. 4-5, mai. 2001.

SANT'ANNA, C. M. R. **Métodos de Modelagem Molecular para Estudo e Planejamento de Compostos Bioativos: Uma Introdução**. Revista Virtual de Química, V. 1, n. 1, p. 49-57, mar. 2009.

SHRIVER, D. F; ATKINS, P.W. **Química Inorgânica**. 3 ed. São Paulo: Bookman, 2003.

SILVA, S. M.; EICHLER, M. L; DEL PINO, J. C. **Concepções Alternativas de Calouros de Química para o Fenômeno da Dissolução**. In: XVI Encontro Nacional do Ensino de Química (XVI ENEQ) e X Encontro de Educação Química da Bahia (X EDUQUI). 16, 2012, Salvador. Anais do XVI Encontro Nacional do Ensino de Química/X Encontro de Educação Química da Bahia. Salvador: 2012.

SPITZNAGEL, B; PRITCHETT, P. R.; MESSINA, T. C.; GOADRICH, M.; RODRIGUEZ, J. **An Undergraduate Laboratory Activity on Molecular Dynamics Simulations**. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, v. 44, n.2, p. 130-139, abr. 2016.

SPOEL, D. van der; LINDAHL, E.; HESS, B. and the GROMACS development team, **GROMACS User Manual version 4.6.5**, www.gromacs.org (2013).

TRZENIAK, D. **Modelagem quântica de inibidores enzimáticos**. 2002. 161 f. Dissertação (Mestrado em Física). São Paulo: Universidade de São Paulo.

VYGOTSKI, L. S. A formação social da mente. **Psicologia**, 4. ed. São Paulo: Ltda. 1991.

YOUNG, D. C. **Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems**. New York. John Wiley & Sons, Inc. 2001.

ZITTOUN, T.; VALSINER, J.; VEDELER, D.; SALGADO, J.; GONÇALVES, M.; FERRING, D. **Melodies of living: Developmental science of human life course**. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

APÊNDICE A – TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO

Esclarecimentos

Este é um convite para você participar da pesquisa: Química Computacional como Estratégia de Ensino do Conceito de Solvatação: Uma Possibilidade de Construção de uma ZDP, que tem como pesquisador responsável William Daniel Alves Bezerra da Silva.

Esta pesquisa pretende compreender as contribuições que a Química Computacional pode trazer para o ensino de solvatação, através de cálculos de energia livre do processo.

O motivo que nos leva a fazer este estudo é que a compreensão do processo de solvatação se torna importante, por exemplo, para tentar explicar como se dá a solubilidade de cristais iônicos e como ocorrem os vários processos biológicos como o transporte de proteínas, íons, sais, hormônios bem como a hidratação do nosso corpo. Levando também em consideração que muitas vezes o conceito de solvatação é associado de forma errônea e confundido com dissolução e até mesmo com solubilidade, pois dentro das disciplinas esse conceito é passado de forma batida e os estudantes não conseguem diferenciá-lo.

Caso você decida participar, você deverá inicialmente fazer um pré-teste com o objetivo de saber o que você já compreende sobre o tema que será explorado neste trabalho e saber também o que você já entende sobre os métodos computacionais, o pré-teste terá 6 questões discursivas. O segundo passo é você participar de uma oficina onde o pesquisador abordará os métodos de Química Computacional de maneira geral para que você possa realizar a atividade computacional, esta terá duração de 4 horas. A terceira parte é que você receberá materiais escolhidos pelo pesquisador para um estudo sobre métodos computacionais e o último passo é que você participe da atividade experimental que será aplicada em dois dias (4h por dia) que terá como objetivo entender como a Química Computacional poderá contribuir para a construção de uma Zona de Desenvolvimento Proximal nos participantes a cerca do tema da pesquisa. Todo o material será guardado online no *Google Drive*.

Durante a realização você será submetido a uma atividade no computador e esta será filmada, a previsão de riscos é mínima, ou seja, o risco que você corre é semelhante àquele sentido num exame físico ou psicológico de rotina.

Você tem o direito de se recusar a participar ou retirar seu consentimento, em qualquer fase da pesquisa, sem nenhum prejuízo para você.

Os dados que você irá nos fornecer serão confidenciais e serão divulgados apenas em congressos ou publicações científicas, não havendo divulgação de nenhum dado que possa lhe identificar.

Esses dados serão guardados pelo pesquisador responsável por essa pesquisa em local seguro e por um período de 5 anos.

Este documento foi impresso em única via e ficará com o pesquisador responsável William Daniel.

Consentimento Livre e Esclarecido

Após ter sido esclarecido sobre os objetivos, importância e o modo como os dados serão coletados nessa pesquisa, além de conhecer os riscos, desconfortos e benefícios que ela trará para mim e ter ficado ciente de todos os meus direitos, concordo em participar da pesquisa Química Computacional como Estratégia de Ensino do Conceito de Solvatação: Uma Possibilidade de Construção de uma ZDP, e autorizo a divulgação das informações por mim fornecidas em congressos e/ou publicações científicas desde que nenhum dado possa me identificar.

Caruaru, ____/____/____

Assinatura do participante da pesquisa: _____

Assinatura do Pesquisador: _____

APÊNDICE B – INPUT'S DOS CÁLCULOS REALIZADOS

Como exemplo deixamos disponíveis os inputs para o cálculo do ciclo de Born, do átomo/ íon Na / Na⁺. Utilizando o mesmo programa que usamos para fazê-lo, o Gaussian.

Na_iefpcm.gjf

Nesse input calculamos a energia do átomo em solução.

```
%mem=3000Mb
%nprocshared=8
#p ub3lyp/6-31G(d) scrf(pcm,solvent=water)
```

Na atom solution

```
0 2
Na 0.0 0.0 0.0
```

1. Na_vac.gjf

Nesse input calculamos a energia do átomo no vácuo.

```
%mem=3000Mb
%nprocshared=8
#p ub3lyp/6-31G(d)
```

Na atom neutral

```
0 2
Na 0.0 0.0 0.0
```

2. Na+_iefpcm.gjf

Nesse input calculamos a energia do íon em solução.

```
%mem=3000Mb
%nprocshared=8
#p ub3lyp/6-31G(d) scrf(pcm,solvent=water)
```

Na+ ion solution

```
1 1
Na 0.0 0.0 0.0
```

3. Na+_vac.gjf

Nesse input calculamos a energia do íon no vácuo.

```
%mem=3000Mb
%nprocshared=8
#p ub3lyp/6-31G(d)
```

Na ion vácuo

```
1 1
Na 0.0 0.0 0.0
```

APÊNDICE C – QUICK-TESTS

1. Você consegue relacionar o processo de hidratação, com algum (uns) processo(s) descritos no ciclo de Born?

2. Você espera que os valores de ΔG calculados sejam idênticos aos valores obtidos experimentalmente? Por quê?

Atividade .

a) Calcular a energia de solvatação dos íons Na^+ , Ca^{+2} , Al^{3+} .

b) Comparar com os valores experimentais.

3. Na sua opinião, os resultados calculados estão de acordo com os resultados experimentais? Explique qualquer relação que você conseguir observar;

4. Cite os principais motivos, que na sua opinião, para que os resultados calculados não fossem idêntico ao experimental.

5. Na sua opinião, qual dos modelos é melhor para calcular energias de solvatação, o calculado pelo ciclo de Born ou o calculado computacionalmente? Justifique.

6. Qual o motivo dos resultados calculados computacionalmente e os resultados experimentais não serem idênticos?