



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



JOSÉ RENAN DA SILVA

**QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO: CONTRIBUINDO NO
APRENDIZADO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS E TEORIA DO ORBITAL
MOLECULAR**

**Caruaru-PE
2018**

JOSÉ RENAN DA SILVA

**QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO: CONTRIBUINDO NO
APRENDIZADO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS E TEORIA DO ORBITAL
MOLECULAR**

Trabalho de Conclusão de Curso de graduação,
apresentado à disciplina de Trabalho de Conclusão de
Curso II, do curso de Química - Licenciatura da
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, como
requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Roberta Dias

Co-Orientador: Prof. Dr. João Roberto R. Tenório da
Silva

**CARUARU
2018**

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

S586q

Silva, José Renan da.

Química Computacional no Ensino: contribuindo no aprendizado de ligações químicas e Teoria do orbital molecular. / José Renan da Silva. – 2018.
74 f. : 30 cm.

Orientadora: Roberta Pereira Dias.

Coorientador: João Roberto Ratis Tenório da Silva

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

Inclui Referências.

1. Ligações químicas. 2. Orbitais moleculares. 3. Química – Estudo e ensino. 4. Professores - formação. I. Dias, Roberta Pereira (Orientadora). II. Silva, João Roberto Ratis Tenório da (Coorientador). III. Título.

CDD 371.12 (23. ed.)

UFPE (CAA 2018-366)



**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

JOSÉ RENAN DA SILVA

**“QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO: CONTRIBUINDO NO APRENDIZADO
DE LIGAÇÕES QUÍMICAS E TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR.”**

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

Caruaru, 13 de Dezembro de 2018.

BANCA EXAMINADORA:

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

Profa. Dra. Juliana Angeiras Batista da Silva (CAA/UFPE)
(Examinadora 1)

Prof. Dr. Júlio Cosme Santos da Silva (CAA/UFPE)
(Examinador 2)

AGRADECIMENTOS

Primeiramente à Deus, por ser meu guia e iluminar sempre os meus caminhos, me dando discernimento e sabedoria para lidar com as adversidades da vida, além de saúde e força para atingir os meus objetivos.

Para a elaboração desse trabalho, contei com o apoio de amigos, em especial Marayza que me deu apoio do início ao fim do trabalho e que sempre esteve ao meu lado durante o curso, Lucelma e Anny por sempre me ajudarem com o possível durante toda essa trajetória e outros amigos da universidade e fora da universidade, que sempre me apoiaram. A minha família, em particular minha mãe e tia Betânia por acreditarem em mim, me darem apoio e assistência durante todo o período.

Ao professor João Tenório por me auxiliar no desenvolvimento deste trabalho e por ser responsável por parte da minha formação, e aos demais professores por me ajudarem a chegar até aqui.

Meu agradecimento especial à professora Roberta Dias, que sempre esteve presente em mais da metade do meu tempo como graduando, ela que, desde de 2015, me acolheu como estudante de iniciação científica, com 3 anos de bolsa, e que sempre acreditou no meu potencial.

RESUMO

Ligações químicas é um assunto desenvolvido nos Ensino Fundamental e Médio e é conhecido por apresentar muitos problemas de compreensão dos conceitos e dos limites dos modelos abordados. Muitas vezes, esses problemas são trazidos para o Ensino Superior se tornando um obstáculo para o avanço do aprendizado. Pelo fato de Ligações Químicas ser um dos assuntos centrais na Química, é necessário que esse tema inicial seja bem compreendido pelo aluno para que os demais conteúdos de Química sejam entendidos com mais facilidade. A proposta desse trabalho de conclusão de curso se baseia na dificuldade dos alunos de graduação em entender como funciona e qual a importância de estudar a Teoria do Orbital Molecular (TOM). Nesse mesmo foco, tentar encontrar meios e recursos capazes de resolver esse problema, baseados em métodos quânticos, através de simulações computacionais, gráficos e outras ferramentas. Na explicação e utilizando algumas dessas propostas, serão abordados conteúdos diretamente ligados à Físico-Química, Química Inorgânica, Química Quântica e Química Geral, os quais explicação teorias (como Lewis e a Teoria de Ligação de Valência – TLV), postulados, resultados experimentais, entre outros, que auxiliará no desenvolvimento e compreensão de meios capazes de solucionar as adversidades no ensino e compreensão das Ligações Químicas e dos Orbitais Moleculares.

Palavras-chave: Teoria do Orbital Molecular. Ligações. Simulação. Ensino. Formação de Professores.

ABSTRACT

Chemical Bond is a subject developed in Elementary and Middle School and is known to present many problems of understanding the concepts and limits of the models addressed. Often these problems are brought into higher education becoming an obstacle to the advancement of learning. Because Chemical Bond is one of the main subjects in Chemistry, it is necessary that this original theme is well understood by the student so that the other contents of Chemistry can be understood more easily. The purpose of this final course assignment is based on the difficulty of undergraduate students in understanding how it works and how important it is to study Molecular Orbital Theory (MOT). In this same focus, try to find means and resources capable of solving this problem, based on quantum methods, through computational simulations, graphs, and other tools. In the explanation and using some of these proposals, will be approached contents directly linked to Physical Chemistry, Inorganic Chemistry, Quantum Chemistry and General Chemistry, which explain theories (like Lewis and the Valence Bond Theory - VBT), postulates, experimental results, among others, that will help in the development and understanding of means capable of solving the adversities in the teaching and understanding of Chemical Bond and Molecular Orbitals.

Keywords: Molecular Orbital Theory. Chemical Bond. Simulation. Teaching. Teacher Training.

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 - Distribuição dos participantes que realizaram a questão e que obtiveram resultados que variam entre “sem domínio”; “domínio parcial”; “total domínio” e que “não foi respondida”.	46
Gráfico 2 - Análise das 5 questões do questionário Q1	47
Gráfico 3 - Análise detalhada das questões do questionário Q1 para os 5 participantes da oficina	50
Gráfico 4 - Desempenho dos participantes na primeira atividade realizada com o uso do Avogadro.	54
Gráfico 5 – Resultado da análise da segunda atividade	60
Gráfico 6 – Resultado da análise do questionário Q2	63
Gráfico 7 - Comparação dos resultados das análises dos questionários Q1 e Q2.	66
Gráfico 8 - Comparação dos resultados das análises dos questionário, formulários e atividades.	66

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Exemplo de estrutura tridimensional visualizada no programa Avogadro.....	24
Figura 2 - gráfico do aumento e diminuição da densidade eletrônica, obtido após formação de MO's ligantes (esquerda), e antiligante (direita).	27
Figura 3 - Diagrama de níveis de energia de OM's para a molécula de H ₂	29
Figura 4 - Representação dos orbitais moleculares da ligação entre dois átomos de carbono, com diferentes ângulos de ligação para diferentes tipos de ligações.	31
Figura 5 - Representação de orbitais em 2D e 3D e na região inferior direita é possível visualizar a função de onda do hidrogênio, no estado excitado	33
Figura 6 - Representação da A) ligação iônica entre o cloro (esfera lilás) e o sódio (esfera verde) e da B) ligação covalente entre dois átomos cloro (cada átomo representado por uma esfera verde)	37
Figura 7 - imagem da tela do computador ao abrir o arquivo contendo informações sobre o átomo	38
Figura 8 - Imagens da tela do computador ao abrir o arquivo com os dados do nitrogênio, em um	39
Figura 9 - Roteiro da primeira atividade realizada na oficina.	40
Figura 10 - Continuação do roteiro apresentado na imagem 05.....	40
Figura 11 - Continuação do roteiro presente na figura 13	41
Figura 12 - Resposta do participante 21, sobre qual a teoria atual que se baseiam as ligações químicas, no questionário Q1	52
Figura 13 - Resposta do participante 21, sobre qual a teoria atual que se baseiam as ligações químicas, no formulário F2	52
Figura 14 - tabela preenchida pelo participante 04.....	55
Figura 15 - tabela preenchida pelo participante 10.....	56
Figura 16 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 04 ...	57
Figura 17 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 10 ...	57
Figura 18 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 22 ...	57
Figura 19 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 21 ...	57
Figura 20- Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 32. ...	57
Figura 21 - Resposta referente ao participante 10	67
Figura 22 - Resposta referente ao participante 22	67
Figura 23 – Fragmento do formulário F2 do participante 10	68
Figura 24 – Fragmento do questionário Q1 do participante 04.....	68
Figura 25 - Fragmento do formulário F2 do participante 04.....	69

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	10
2.	OBJETIVOS	11
2.1.	OBJETIVO GERAL.....	13
2.2.	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	13
3.	REVISÃO DA LITERATURA.	14
3.1	TIC'S NO ENSINO DE QUÍMICA	14
3.2	QUÍMICA COMPUTACIONAL.....	15
3.2.1	Modelagem computacional.....	19
3.2.2	Simulação.	20
3.1.	PROGRAMAS COMPUTACIONAIS.	22
3.3.1	Avogadro.	24
3.4	LIGAÇÕES QUÍMICAS E TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR	26
4	METODOLOGIA	35
4.1	PARTICIPANTES	35
4.2	LOCAL	36
4.3	INTERVENÇÃO.....	36
4.4	FERRAMENTA DE ANÁLISE	41
4.5	COLETA DE DADOS	42
4.5.1	Questionários	44
4.5.2	Formulários e Atividades	45
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	46
5.1	ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO Q1	46
5.2	ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS FORMULÁRIOS.....	50
5.3	ANÁLISE E DISCUSSÃO DAS ATIVIDADES	53
5.3.1	Primeira Atividade.....	53
5.3.2	Segunda Atividade.....	58
5.4	ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO Q2	62
5.5	ANÁLISE E DISCUSSÃO GERAL	64
6	CONCLUSÕES	70
	REFERÊNCIAS	72
	APENDICE A – ROTEIRO DA OFICINA	74

1 INTRODUÇÃO

Não é novidade que a Química é um assunto que apresenta algum nível de dificuldade para muitos estudantes, independente se são alunos do ensino fundamental e médio ou ensino superior com assuntos mais aprofundados. Essa dificuldade se dá, principalmente, quando os estudantes precisam mentalizar condições em escalas atômicas e ainda, muitas vezes, relacionar esse modelo criado com os fenômenos macroscópicos. Um exemplo dessa dificuldade é imaginar ou construir um modelo mental, de átomos e moléculas e como elas interagem.

Esse desenvolvimento mental apresenta maior resistência nessa nova geração de estudantes, os estudantes da geração Z. A geração Z, são aquelas pessoas que nasceram ao final da década de 90 e apresentam, como característica, aprender conteúdos diferentes e rapidamente, e conseqüentemente, tendem a ter menos paciência para aprender ou tomar conhecimento de um determinado assunto através da leitura de livro. (KYLE, BACON et al., 2011)

Atualmente, muito dos alunos que estão sendo formados como professores de Química de Ensino Médio, também fazem parte da geração Z. Assim é um desafio apresentar à eles a importância que a química tem como ciência central de diferentes áreas como novas tecnologias e engenharias. O curso de Química demanda uma quantidade significativa de conhecimento fundamental de estrutura eletrônica da matéria, para que os estudantes apliquem esse conhecimento e correlacionem com estrutura e propriedades, para que só então possam prever as propriedades de novos materiais. Mesmo que sejam alunos de licenciatura em Química, esses estudantes de graduação precisam ter esse conhecimento fundamental para estarem aptos a ensinar e explicar, aos seus futuros alunos de ensino médio, as novas tecnologias que já existem e que ainda poderão existir.

Desta forma, intervir com abordagens diferenciadas é de extrema importância para que o graduando em química se torne um profissional da educação, com o mínimo de instrução necessária para que possa lecionar. A partir dessa questão, foi notada a necessidade de buscar meios para que os estudantes possam entender conceitos e teorias que rodeiam as ligações químicas, e mais especificamente os Orbitais Moleculares (OM).

Antes de chegar à Teoria do Orbital Molecular (TOM) os alunos já encontram dificuldade de definir o que seria uma ligação química, de como ela ocorre, os diferentes tipos de ligações, a diferença entre ligação e interação, entre outros. Para ensinar o conteúdo de ligações, é necessário saber que “a escolha do modelo no ensino de ligações químicas deve ser compatível com o modelo atômico adotado” (TOMA, 1997 apud CHASSOT, 1996, p.8).

Entender o modelo quântico (orbitais) é fundamental para o aluno entender vários processos que ocorrem na ligação, descrição de estruturas, propriedades físico-químicas, e ainda mais agora que o uso de programas computacionais tem se tornado mais frequente em todos os níveis educacionais. (TOMA, 1997)

O modelo de Lewis é bastante útil na descrição qualitativa das ligações químicas. Porém, quando se quer discutir questões energéticas, geometrias ou aspectos de natureza espectroscópica, torna-se necessário lançar mão de teorias quânticas que enfocam a ligação química em termos da combinação de orbitais. (TOMA, 1997, p. 9)

O que Toma (1997) aponta nesse trabalho, é que a mecânica clássica é fundamental para o ensino, pois a utilização de modelos e teorias dessa abordagem é de suma importância para se trabalhar na educação, pois, um modelo simples (levando em consideração que o professor deve possuir um conhecimento mais completo, para que possa simplificar ao máximo necessário, a partir da necessidade dos seus alunos) facilita o aprendizado em níveis de ensino menores, favorecendo a construção do conhecimento. Entretanto, por exemplo, quando se trata das questões de energia, é necessário entrar na mecânica quântica para obter resultado.

De maneira geral, é necessário que o estudante saia da universidade com formação consolidada, podendo, ao se tornar um profissional licenciado em química, contribuir para a formação dos seus alunos de forma correta. Por exemplo, abordando os conceitos da química quântica e clássica, no que se refere as ligações químicas, com a intenção de proporcionar uma abordagem metodológica mais simples, mas sem ignorar os conceitos mais atuais.

Poucas teorias tem o impacto que a TOM tem na Química. Ela é ensinada de várias formas, em todos os níveis, desde a Química Geral até cursos de nível de pós-graduação. Com razão, pois é uma teoria extraordinariamente poderosa que fornece uma visão considerável da estrutura eletrônica básica da matéria.

A Teoria do Orbital Molecular se baseia em fundamentos da mecânica quântica e se torna indispensável para resolver questões fundamentais e obter informações específicas das moléculas, tais como energia cinética dos elétrons, potencial eletrostático (DUARTE, 2001). Desta forma, é perceptível que qualquer estudante que sai da universidade com limitações no aprendizado, no que diz respeito à TOM, provavelmente não conseguirá obter informações básicas e essenciais sobre qualquer molécula, tais como, densidade eletrônica, construção dos orbitais moleculares, entre outros, por mais simples que seja.

Pensando nisso e levando em conta a dificuldade de alunos que estão tendo pela primeira

vez o contato com a química, em entender como funciona todos esses conceitos e teorias, baseando-se apenas em modelos, ter que lidar com o abstrato, é complexo e também complicado. Em termos comparativos, é bem mais fácil o estudante imaginar um corpo em movimento à uma sobreposição de orbitais.

Com isso, o esforço em formar novos professores é essencial para que não ocorra dois grandes problemas. O primeiro deles é formar professores sem domínio de conteúdo, pois não adianta possuir didática, demonstrar ser um bom professor e não dominar a teoria. O segundo está totalmente intrínseco no primeiro que é, além de não entender ou não saber interpretar os conteúdos, dificulta ou constrói junto com o aluno, conhecimentos errados, prejudicando-os em suas formações.

Pensando em como contornar essa falha, de entender os processos e teorias por trás das ligações químicas, é fundamental problematizar a seguinte questão: como a utilização do programa computacional AVOGADRO pode contribuir para a melhoria no aprendizado de alunos do curso de Química-Licenciatura do Centro Acadêmico do Agreste (UFPE – CAA) no que diz respeito à Teoria do Orbital Molecular?

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Analisar como alunos de um curso de licenciatura em Química aprendem os conteúdos de Ligações Químicas (LQ) e Teoria do Orbital Molecular (TOM) a partir do uso do *software* Avogadro.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar possíveis dificuldades de aprendizagem para os conteúdos de LQ e TOM;
- Propor a utilização do *software* Avogadro para auxiliar na aprendizagem dos conteúdos em questão;
- Propor um material de instrução para o ensino de LQ e TOM para posterior publicação.

3 REVISÃO DE LITERATURA

Iniciando o tópico, é importante ressaltar a importância das teorias por trás do que se pretende entender ou analisar. A leitura e pesquisa por diversos autores/trabalhos, torna a pesquisa mais completa e com perspectivas diversas que só tende a contribuir para o que está sendo trabalhado.

Toda leitura é feita a partir de alguma perspectiva teórica, seja esta consciente ou não. Ainda que se possa admitir o esforço em colocar entre parênteses essas teorias, toda leitura implica ou exige algum tipo de teoria para poder concretizar-se. É impossível ver sem teoria; é impossível ler e interpretar sem ela. Diferentes teorias possibilitam os diferentes sentidos de um texto. Como as próprias teorias podem sempre modificar-se, um mesmo texto sempre pode dar origem a novos sentidos (MORAES, 2003, p. 193).

3.1 TIC'S NO ENSINO DE QUÍMICA

Não é de hoje que a tecnologia vem ganhando espaço na sociedade, escolas e universidades. Nesses ambientes, os computadores têm se tornado cada vez mais presentes e continua ganhando espaço (ESTEBAN LOPEZ; STEPHANY PETRONILHO, 2017). Ultimamente, a utilização dessa ferramenta tem se mostrado uma ótima ferramenta metodológica para o avanço e correção de alguns problemas na educação e, sem dúvidas, em algumas áreas específicas como a Química, no qual o “invisível”, empírico e abstrato estão sempre presentes (RIBEIRO et al., 2003; VIEIRA, 2004). No que se refere ao uso das tecnologias, “alguns pesquisadores, sobretudo durante as décadas de 70 e 80, apresentaram-se extremamente otimistas quanto ao seu uso, atribuindo à tecnologia a possibilidade de solução dos problemas educacionais” (RIBEIRO et al., 2003, p. 542).

Levando em consideração que nem todos são a favor da utilização dessas tecnologias em sala, nesses casos, acaba sendo um desafio trabalhar as TIC's no ambiente escolar (ESTEBAN LOPEZ; STEPHANY PETRONILHO, 2017; RIBEIRO et al., 2003). Cabe a cada um saber interpretar o ponto de vista e a referência trazida por alguns autores. Alguns pesquisadores apontam que levar a tecnologia para dentro das salas, é um passo largo na construção e desenvolvimento de um “tecnicismo desumanizado” inevitável (RIBEIRO et al., 2003).

Atualmente, mesmo em um período de grandes avanços tecnológicos, as aulas são quase que exclusivamente realizadas de maneira convencional, principalmente nas escolas

públicas, no qual a porcentagem de professores com o acesso à internet é inferior, se comparados aos professores de escolas particulares (ESTEBAN LOPEZ; STEPHANY PETRONILHO, 2017).

Sendo assim, a utilização dos computadores em sala deve apresentar, inicialmente, um foco, uma finalidade, pois não basta haver capacitação por parte dos professores, facilidade do manuseio com ferramentas computacionais (tanto aluno como professor), se não houver construção de conhecimento. Em resumo, “a tecnologia deve se adequar à Educação e não o contrário” (RIBEIRO et al., 2003, p.1).

O uso da tecnologia na escola já é percebido há alguns anos, desde a utilização de elementos como áudio e vídeo, que a cada ano vem avançando e sendo, aos poucos, implantados na escola como ferramenta que auxilie na formação de alunos e nas abordagens mais metodológicas no processo de ensino e aprendizagem. (VIEIRA, 2004).

A utilização de computadores no ensino, além de ser uma forma de implementação das TIC's, é um meio mais atraente de o aluno aprender e de ter autonomia na construção do seu conhecimento. Esse aprendizado pode ser realizado a partir de diversas ferramentas, como jogos, utilização da internet para fins de pesquisas, *softwares* de ensino, uso de simulação, entre outros. Sendo assim, as Tecnologias de Informação e Comunicação (TIC's), quando utilizadas por profissionais capacitados, se torna uma ótima ferramenta no processo de aprendizado. (VIEIRA, 2004)

3.2 QUÍMICA COMPUTACIONAL

Químicos vêm fazendo cálculos há séculos, mas o campo que conhecemos hoje como “química computacional” é um produto da era digital. Martin Karplus, Michael Levitt e Arieh Warshel ganharam o Prêmio Nobel de Química em 2013¹ pelo trabalho que fizeram na década de 1970, lançando as bases para os atuais modelos computacionais que combinam princípios da física clássica e física quântica para replicar melhor os detalhes de processos químicos. Em 1995, três químicos computacionais, Paul Crutzen, Mario Molina e F. Sherwood Rowland, ganharam o Prêmio Nobel de Química por construir modelos matemáticos que usaram leis termodinâmicas e químicas para explicar como o ozônio se

¹ <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2013/summary/>

forma e se decompõe na atmosfera². No entanto, a química computacional não era geralmente considerada como seu próprio campo de estudo até 1998, quando Walter Kohn e John Pople ganharam o Prêmio Nobel de Química por seu trabalho na teoria do funcional de densidade e métodos computacionais em química quântica³.

O trabalho cotidiano dos químicos computacionais influencia nossa compreensão do modo como o mundo funciona, ajuda os fabricantes a projetar processos mais produtivos e eficientes, caracteriza novos compostos e materiais e ajuda outros pesquisadores a extrair conhecimento útil de uma grande quantidade de dados. A química computacional também é usada para estudar as propriedades fundamentais de átomos, moléculas e reações químicas, usando a mecânica clássica, mecânica quântica e a termodinâmica.

Químicos computacionais usam algoritmos matemáticos, estatísticas e grandes bancos de dados para integrar teoria química e modelagem com observações experimentais. Alguns químicos computacionais criam modelos e simulações de processos físicos, e outros usam técnicas estatísticas e de análise de dados para extrair informações úteis de grandes corpos de dados. Os avanços nas capacidades de visualização por computador possibilitam que o químico computacional apresente análises complexas de uma forma prontamente compreensível, que podem ser usadas para projetar experimentos e novos materiais e validar os resultados (ZONCA, 2014)

Os cientistas podem usar simulações para identificar sítios em moléculas de proteínas com maior probabilidade de se ligar a uma nova molécula de droga ou criar modelos de reações de síntese para demonstrar os efeitos da cinética e da termodinâmica na quantidade e nos tipos de produtos. Eles também podem explorar os processos físicos básicos subjacentes a fenômenos como supercondutividade, armazenamento de energia, corrosão ou mudanças de fase.

A indústria farmacêutica, um importante empregador de químicos computacionais, tem se concentrado historicamente na descoberta e no *design* de novas terapias moleculares. Recentemente, no entanto, há uma tendência de aplicar a química computacional e a quiminformática (um campo que combina dados laboratoriais, modelagem química e métodos da ciência da informação) ao desenvolvimento de processos, química analítica e

² <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1995/summary/>

³ <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/summary/>

produtos biológicos (medicamentos fabricados usando ou extraídos de fontes biológicas).⁴

Os químicos computacionais podem usar computação de alto desempenho (supercomputadores e *clusters* de computação) para resolver problemas e criar simulações que exigem grandes quantidades de dados. Ferramentas de químicos computacionais incluem métodos de estrutura eletrônica, simulações de dinâmica molecular, relações quantitativas estrutura-atividade, cheminformatics e análise estatística completa.

A química computacional não é o mesmo que a ciência da computação, embora os profissionais nos dois campos geralmente colaborem. Os cientistas da computação dedicam seu tempo a desenvolver e validar algoritmos de computador, produtos de *software* e *hardware* e recursos de visualização de dados. Químicos computacionais trabalham com cientistas de laboratório e teóricos para aplicar esses recursos à modelagem e simulação, análise de dados e visualização para apoiar seus esforços de pesquisa.

Muitos químicos computacionais desenvolvem e aplicam códigos e algoritmos de computação, embora a prática de químicos computacionais possa ter carreiras recompensadoras sem trabalhar no desenvolvimento de códigos. As habilidades de programação incluem compilar um código FORTRAN ou C, executando shell scripts com bash, Tcl / Tk, python ou perl, realizando análise estatística usando R ou SPSS e trabalhando em um ambiente Windows, MacOS ou Linux.

À medida que as ferramentas de cheminformática e plataformas de modelagem computacional se desenvolvem, fica mais fácil definir tarefas de fluxo de trabalho por meio de ambientes de bancada baseados em gráficos. Uma tendência recente em modelagem de ordem reduzida e métodos similares está permitindo que ferramentas computacionais bastante poderosas sejam implementadas em dispositivos portáteis, incluindo *tablets* e *smart phones*. Isso permite que os pesquisadores realizem cálculos "e se" e experimentem vários cenários enquanto estiverem na fábrica ou no campo⁵.

“O computador fruto da revolução tecnológica dos últimos tempos constitui uma importante ferramenta de auxílio na prática pedagógica do professor que almeja realizar

⁴ <https://www.acs.org/content/dam/acsorg/careers/salaries/chemcensus/chemcensus2010-report.pdf>

⁵ <https://www.acs.org/content/dam/acsorg/careers/salaries/chemcensus/chemcensus2010-report.pdf>

inovações em seus métodos de ensino.” (PACHECO, JOSÉ; BARROS, 2013, p.7). A utilização dessas máquinas como ferramenta de aprendizagem, sem dúvida, tem se tornado mais frequente e possibilitando professores a desenvolver metodologias e meios capazes de auxiliar o aprendizado dos alunos, a partir de ferramentas que auxiliem no entendimento de fenômenos macro e microscópico. (MICHEL; SANTOS; GRECA, 2004; PACHECO, JOSÉ; BARROS, 2013).

Pacheco (2013) e colaboradores apontam, em seu texto, que a prática da utilização de computadores, associados ao uso de algum *software* ou algum outro recurso da informática, levam à formação do aluno mais criativo e com espírito investigativo, no qual o aluno consegue, com mais facilidade, levantar hipóteses para solucionar problemas (PACHECO, JOSÉ; BARROS, 2013).

O computador, para ter alguma finalidade no aprendizado, precisa apresentar recursos capazes de fornecer informações importantes. É com base nesse fornecimento de informações que torna viável a utilização desse recurso como auxílio para o professor. (MICHEL; SANTOS; GRECA, 2004).

Esse tipo de informação está muito relacionada à área da ciência na qual está sendo trabalhada (MICHEL; SANTOS; GRECA, 2004). Como nesse trabalho existe a totalidade de conteúdos relacionados à química, os dados normalmente informado/buscado por aqueles que optam por utilizar ferramentas computacionais, são:

- Aquisição de dados e análise de experimentos (ADEXP): São programas de análise e organização de dados experimentais. Os mesmos possibilitam a construção e formação de gráfico e tabelas para melhor visualizar e distribuição dos dados de análises/resultados. (MICHEL; SANTOS; GRECA, 2004).
- Base de dados simples (DBS); Base de dados/modelagem (BDM);
- Base de dados hipertexto e/ou multimídia (BDH): A definição de cada um está no próprio nome, pois são de fato, base de dados, de fácil acesso que apresentam conteúdos específicos descritos em sua definição, como dados de modelagens para cálculos computacionais, vídeos, textos, entre outros. (MICHEL; SANTOS; GRECA, 2004).
- Cálculo computacional (CC): Os *softwares* responsáveis por essa função normalmente são de extrema importância para expressar informações teóricas, que normalmente são utilizados (na química) para se obter geometria

de moléculas, formação de estruturas, dados termodinâmicos, etc. (MICHEL; SANTOS; GRECA, 2004).

- Exercício e Prática (EP);
- Produção de Gráficos e Caracteres Específicos (PGCE);
- Simulação (SML).

3.2.1 MODELAGEM

Sendo uma das principais ferramentas científicas na produção do conhecimento, a modelagem é bastante utilizada para representar teorias, tornando-se fundamental para a construção do conhecimento. Modelos, independente da área que são estabelecidos, não são cópias fieis da realidade, e tampouco a própria realidade. São estruturas que, mesmo possuindo funções importantes na química, como também em outras ciências, possuem limitação e estão sempre sujeitos à alteração/atualizações. (SANTOS; MALDANER, 2010)

Um dos problemas mais preocupantes na utilização de modelos na química é a má formação de profissionais. Muitos professores formados e em formação, do ensino básico ao superior, entendia modelos como a própria reprodução da realidade. Entretanto, a questão que mais assusta é que esses professores são formados em química. (SANTOS; MALDANER, 2010) Uma frase de destaque encontrada no trabalho de Santos e Maldaner (2010) é que “boa parte dos estudantes pensa, por exemplo, que o átomo ‘é’ o que está desenhado no livro, que os desenhos de modelos atômicos nos livros são aplicações do átomo, ou que o modelo atômico mais recente é perfeito.” (SANTOS; MALDANER, 2010, p. 211).

Para que os alunos consigam entender o funcionamento por trás dos modelos, os mesmos precisam entender que os modelos representam os processos e ideias para a ciência. Sendo assim, inicialmente cada modelo deve ser criado pensando no público alvo, para só então ser pensado o motivo pelo qual tal modelo será criado. Alguns pontos podem ser especificados acerca da importância da utilização de modelos no ensino: “simplificar entidades complexas [...] favorecer a comunicação de ideias; facilitar a visualização de entidades abstratas [...] fundamentar a proposição e a interpretação de experimentos sobre a realidade [...] ser mediador entre a realidade e a teoria” (SANTOS; MALDANER, 2010, p. 212).

A criação dos modelos se baseiam em um cronograma com seis tipos diferentes, que podem ser classificados em: modelos mentais, expressos, consensual, científico e histórico.

Especificando cada um de acordo com suas definições, o modelo mental é o criado por alguém ou um grupo de pessoas, tal que a informação seja criada e permaneça apenas nesse meio. O modelo expresso nada mais é que o modelo mental disponibilizado para ao público, fazendo com que o mesmo alcance uma quantidade maior de pessoas. O modelo consensual se refere à quando uma quantidade grande de pessoas, observam um modelo expresso e o torna (para os envolvidos) real/consentem com as informações expressadas. Já o modelo científico é formado quando o grupo que analisa e consentem com a informação são cientistas da área na qual está relacionado tal modelo. O modelo histórico é um modelo científico que não cabe mais à época atual. (SANTOS; MALDANER, 2010)

3.2.2 SIMULAÇÃO

Os *softwares* de simulação têm um papel fundamental na representação de modelos e teorias, pois a função do mesmo é de apresentar os resultados mais reais possíveis. Uma das principais qualidades de trabalhar com essa ferramenta é a facilidade de realizar tarefas sem que haja interferências indesejadas do meio e as limitações encontrados em um sistema real (RIBEIRO et al., 2003).

O uso da simulação no ensino torna possível ao aluno materializar, computacionalmente um problema que o mesmo esteja investigando. No campo da simulação, é possível seguir dois rumos que poderão levar a essa “materialização” de problemas estudados, que são eles: o método exploratório e o expressivo. O primeiro deles se baseia na investigação e exploração de modelos já existentes; o segundo consiste em criar, a partir de *softwares* de simulação, uma nova representação gráfica do que está sendo investigado. (CAMILETTI; FERRACIOLI, 2002)

Simulações computacionais, dentro da química, é uma ferramenta extremamente importante, pois, como a disciplina está muito relacionada a elementos impossíveis de serem visualizados, ou abstratos, facilita o desenvolvimento do raciocínio e aprendizado dos alunos (CRISTINA; CATUNDA, 2015). Essa ferramenta tem a capacidade de

auxiliar professores que buscam a inserção de simulações interativas em suas aulas, bem como de possibilitar uma melhor compreensão dos fenômenos químicos [...] Permitem a exploração de diferentes conteúdos com informações conceituais e simulações experimentais, que podem ser utilizadas em diferentes níveis de ensino, com possibilidades de avanços durante o processo de ensino e aprendizagem desta ciência. (CRISTINA; CATUNDA, 2015, p.1).

Quando comparado o uso da experimentação em bancada e experimentação computacional, é possível identificar quesitos positivos em ambas as práticas, entretanto, como o foco é a utilização de simuladores, é possível apresentar algumas propriedades que proporcionam um desenvolvimento concreto na vida acadêmica e profissional dos estudantes que têm contato direto com essa experimentação. Uma das principais qualidades de se trabalhar com a simulação está em o aluno ter mais liberdade, não se preocupar com o tempo, utilização/ perda/ contato direto com materiais trabalhados. (RIBEIRO et al., 2003)

Partindo para o aprendizado materializado que o aluno adquire, o mesmo ao ter contato com simulação, ele passará a obter resultados com maior rapidez e precisão, se destacando em atividades práticas em diversas áreas da química. Exemplo disso é o “trabalho prático com instrumentação para espectroscopia, técnicas de separação, métodos eletroquímicos, bem como a aquisição e análise de dados computadorizados”. (RIBEIRO et al., 2003, p. 544)

Uma das dificuldades encontradas, tanto no ensino básico, como no superior, é a falta da utilização de recursos que possibilite o aluno entender e interpretar informações relacionados ao *simbólico* (que são as equações, gráficos, cálculos, tabelas...) e ao nível microscópico (representação de modelos, interações, ligações, é tudo aquilo que existe mas não pode ser visualizado), limitando os mesmos aos conhecimentos *macroscópicos*. (CRISTINA; CATUNDA, 2015)

Então, é percebido que quando um professor capacitado faz a utilização de simulações com seus alunos, os mesmos, em termo de informação e experimentação dos conteúdos *submicroscópico*, os alunos conseguem compreender e absorver informação mais úteis e relevantes. Entretanto, o mesmo não ocorre quando o professor não possui domínio a respeito dos modelos representativos, ou qualquer outro conteúdo dentro do contexto, ou não apresente domínio na utilização das ferramentas de simulação. (CRISTINA; CATUNDA, 2015)

Uma das maiores preocupações acerca do mau uso de ferramentas computacionais ou a falta de domínio que professores do ensino superior tem ao construir o conhecimento *submicroscópico*, é o aprendizado desses alunos que, ao formar conceitos e conhecimentos errados, acabam se tornando professores e perpassando informações erradas, criando um ciclo vicioso de dados e informações inoportunas. (CRISTINA; CATUNDA, 2015) “Com o ensino tradicional, acredita-se que a interpretação imprópria das visualizações construídas

durante o processo de aprendizagem possibilita a compreensão errônea dos conceitos químicos.”. (CRISTINA; CATUNDA, 2015, p.3)

Ainda utilizando a fala dos autores, é possível observar que, por exemplo, “a observação é de que é muito difícil ensinar de modo tradicional quando se pretende explicar a estereoquímica, as interações intermoleculares, arranjos moleculares, efeitos eletrônicos, entre outros” (CRISTINA; CATUNDA, 2015, p.3). Com isso, é possível perceber que, quando o professor faz uso de simulação (dominando a ferramenta computacional), é possível levar seu aluno a um outro patamar na aprendizagem e possibilita também um maior desenvolvimento para a ciência. (CRISTINA; CATUNDA, 2015)

Quanto às próprias ferramentas de simulação, dentro da química, pesquisadores da Universidade do Colorado, nos Estados Unidos da América, estruturaram um projeto denominado de PhET – *Interactive Simulations*⁶, no qual

Fornecem aos usuários a interatividade com o recurso e as condições para compreensão de causa e efeito quando realizam determinado mecanismo proposto na simulação. Neste sentido, pode-se afirmar que estes envolvem os alunos para a compreensão das ciências, principalmente a partir da investigação, e com conexões com o mundo real. (CRISTINA; CATUNDA, 2015)

Na plataforma online do PhET é possível encontrar diversos tipos de Simulação em áreas da química, como a Química Geral, Físico-Química, Química Orgânica, Química Quântica e as suas respectivas subáreas, possibilitando para o profissional da educação, a utilização de materiais de Simulação prontos e de qualidade, para tornar possível, ao aluno, a visualização da química em um aspecto mais completo e dinâmico.

Mesmo com uma interface limpa e de fácil acesso, o PhET pode apresentar informações de caráter não apenas de ensino básico, mas também do ensino superior. A partir dessa plataforma, é possível o aluno de graduação obter informações como Energia de Spin; Modelo de Fóton de luz; IRM Simplificada; Efeito fotoelétrico; entre outros. Além de apresentar esses conteúdos, os mesmos podem ser trabalhados, dentro do site, de maneira interativa e contextualizada.

⁶ https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulations/category/chemistry

3.3 PROGRAMAS COMPUTACIONAIS

O uso de ferramentas tecnológicas em áreas investigativas, como a química, tem se tornado bem comum. Uma dessas ferramentas são os programas computacionais ou *software*, que na escola, são utilizados como ferramenta metodológica no auxílio do aprendizado efetivo de diversos conteúdos, desde o mais simples aos mais avançados. (MACHADO, 2016)

As tecnomídias, que, nesse caso são representadas pelos *softwares* educacionais, são ferramentas também denominadas de TIC's, por serem responsáveis por promover informação e comunicação, além de serem amplamente utilizados nos processos de aprendizado escolar, atualmente. Essas tecnomídias apresentam duas definições: os *softwares* Educativos (SE) e o Objeto de Aprendizagem (OA). Ambos auxiliam no processo de aprendizado, proporcionando maior capacidade de memória, percepção, atenção e outros. (MACHADO, 2016)

Esses tipos de ferramentas, utilizadas como Objeto de Aprendizagem, têm papel importante na sociedade, como o enriquecimento do ensino na educação pública, proporcionando ao aluno, de maneira prática e muitas vezes mais econômica, do que os materiais didáticos e paradidáticos convencionais, aqueles que não dependem do uso de computadores, levando o ensino a se adaptar e usar ao seu favor o avanço da tecnologia no cotidiano dos discentes. (MACHADO, 2016; PACHECO, JOSÉ; BARROS, 2013)

Os *softwares* possuem uma gama de utilidades e finalidades, pois são empregados em vários campos do conhecimento, atuando com diversas funções, entre elas estão os “tutoriais, programação, aplicativos, exercícios e práticas, multimídia e internet, simulação e modelagem e jogos.” (MACHADO, 2016, p.2)

Entretanto, para que os usos de ferramentas computacionais venham para somar e não subtrair os índices de aprendizado dos alunos, é necessário que haja a formação dos educadores para utilizar essas ferramentas. O uso correto dos *softwares* torna-os uma ótima ferramenta educativa, dinâmica e metodológica, para ser utilizada em casa e na instituição de ensino. (PACHECO, JOSÉ; BARROS, 2013)

Pacheco (2013) e colaboradores afirmam que o uso dessas ferramentas, quando utilizadas corretamente, só tendem à contribuir na educação e formação dos discentes. O uso de ferramentas computacionais, além de evoluir a escola e educação, trazendo-a à realidade

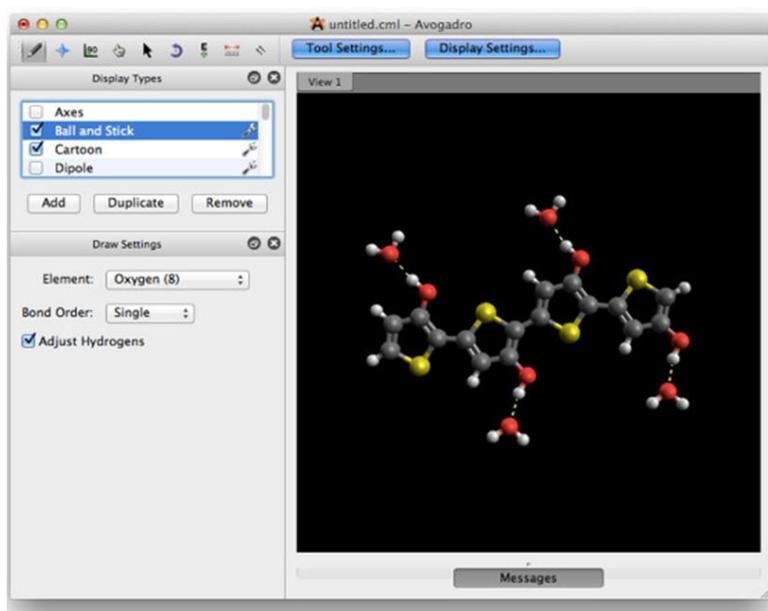
dos alunos, fornece “suporte escolar para a realização de atividades em sala de aula que possibilitam a aprendizagem ativa do aluno ao permitir-lhe se sentir mais envolvido com os conceitos a medida que estes fazem uso da informática educativa para desenvolver suas teorias”. (PACHECO, JOSÉ; BARROS, 2013, p.6)

3.3.1 Avogadro

A utilização de ferramentas computacionais é a principal maneira de demonstrar conceitos quânticos, tanto no que diz respeito à simulação de trajetórias, realização de cálculos, ou até mesmo na interface gráfica. Uma dessas ferramentas é o programa Avogadro, que é um *software* grátis e de fácil acesso, que pode ser instalado em máquinas simples, sem a necessidade de grande quantidade de processadores para rodar suas principais funções. (AVERY et al., 2018)

O programa Avogadro é um avançado editor e visualizador de moléculas, projetado para uso em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e outras áreas relacionadas (HANWELL et al., 2012; ADASME et al., 2011) . Ele pode ser utilizado pelos estudantes para a visualização molecular e simulação tridimensional de moléculas; o usuário pode minimizar suas estruturas terciárias e visualizá-las de todos os ângulos e perspectivas concebíveis. (veja a Figura 1)

Figura 1 - Exemplo de estrutura tridimensional visualizada no programa Avogadro



Fonte: Própria

Avogadro possui uma interface gráfica amigável que pode ser facilmente manipulada pelo usuário para visualizar as estruturas de moléculas de vários ângulos, em três dimensões. É muito divertido para os alunos criarem suas próprias estruturas multicoloridas, que parecem boas, e isso pode fazer com que eles comecem a fazer perguntas e vincular estruturas a propriedades. Essa ferramenta pode aproximar os alunos das moléculas, revelando detalhes no nível microscópico e aproximar os alunos de uma melhor compreensão das leis da química, propriedades químicas, reações químicas e outros fenômenos da química. Por exemplo, o usuário pode aprender, através de simulações em 3D, porque o isômero trans-2-buteno é mais estável que o isômero cis-2-buteno.

A visualização em Química é ponto fundamental, pois sua aprendizagem envolve habilidades visuoespaciais que dão suporte para realizar determinadas operações cognitivas espacialmente. É através destas operações que nos tornamos capazes de internalizar as visualizações externas, para, então, manipularmos as estruturas mentalmente, podendo externalizá-las após esse processo.

Gilbert (2007) em um extensivo trabalho de revisão sobre o tópico de raciocínio visuoespacial, chega a afirmar que, para a compreensão das estruturas 3D, o uso de modelos desempenha um papel fundamental. Os modelos utilizados podem variar desde construção de moléculas com materiais simples (palitos e bolas de isopor) até modelos construídos computacionalmente. Wu e Shah (2004) concordam, pois afirmam que a experiência com a manipulação de modelos, bem como uso de ferramentas de construção de modelos parecem ser cruciais no desenvolvimento das habilidades visuoespaciais e esse desenvolvimento ocorrendo, conseqüentemente auxilia os alunos na resolução de problemas químicos e representação de conceitos no nível microscópico e simbólico. Sendo assim, podemos citar Silva e Ribeiro (2008) ao argumentar que:

“Para superar essas dificuldades [de compreensão de modelos químicos], pesquisadores e educadores têm sugerido uma variedade de abordagens instrucionais, como, por exemplo, os modelos e ferramentas tecnológicas.”

A pesquisa no impacto das representações computacionais em estudantes pode auxiliar na compreensão do papel das tecnologias de informação e comunicação no mundo atual. “A química é um campo extraordinariamente fértil para a aprendizagem visual. O sistema visual é, portanto, um poderoso recurso educacional”. (JONES et al. 2001)

3.4 LIGAÇÕES QUÍMICAS E TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR

“Aqui, o termo ‘orbital’ refere-se exclusivamente a orbitais de elétrons, isto é, funções de uma única coordenada eletrônica que são usadas para descrever a estrutura eletrônica de átomos e moléculas de muitos elétrons”. (AUTSCHBACH, 2012, p.2)

A teoria dos orbitais moleculares (MO) constitui uma alternativa para se ter uma visão da ligação. De acordo com este enfoque, todos os elétrons de valência têm uma influência na estabilidade da molécula (elétrons dos níveis inferiores também podem contribuir para a ligação, mas para muitas moléculas simples o efeito é demasiado pequeno). Além disso, a teoria MO considera que os orbitais atômicos, do nível de valência, deixam de existir quando a molécula se forma, sendo substituídos por um novo conjunto de níveis energéticos que correspondem à novas distribuições da nuvem eletrônica (densidade de probabilidade). Esses novos níveis energéticos constituem uma propriedade da molécula como um todo e são chamados, conseqüentemente, de orbitais moleculares.

O cálculo das propriedades dos orbitais moleculares é feito comumente assumindo que os AOs se combinam para formar MOs. As funções de onda dos orbitais atômicos são combinadas matematicamente para produzir as funções de onda dos MOs resultantes. O processo é remanescente da mistura de orbitais atômicos puros para formar orbitais híbridos, considerado na TLV, exceto que, na formação de orbitais moleculares, orbitais atômicos de mais de um átomo são combinados ou misturados. No entanto, como no caso da hibridização, o número de orbitais novos formados é igual ao número de orbitais atômicos originários da combinação.

Os MOs que são formados quando dois átomos idênticos se ligam numa molécula diatômica, usando um enfoque simples, no qual um AO de um átomo se combina com um AO de um segundo átomo para formar dois MOs, precisam que seja efetivo duas condições para que esse processo ocorra:

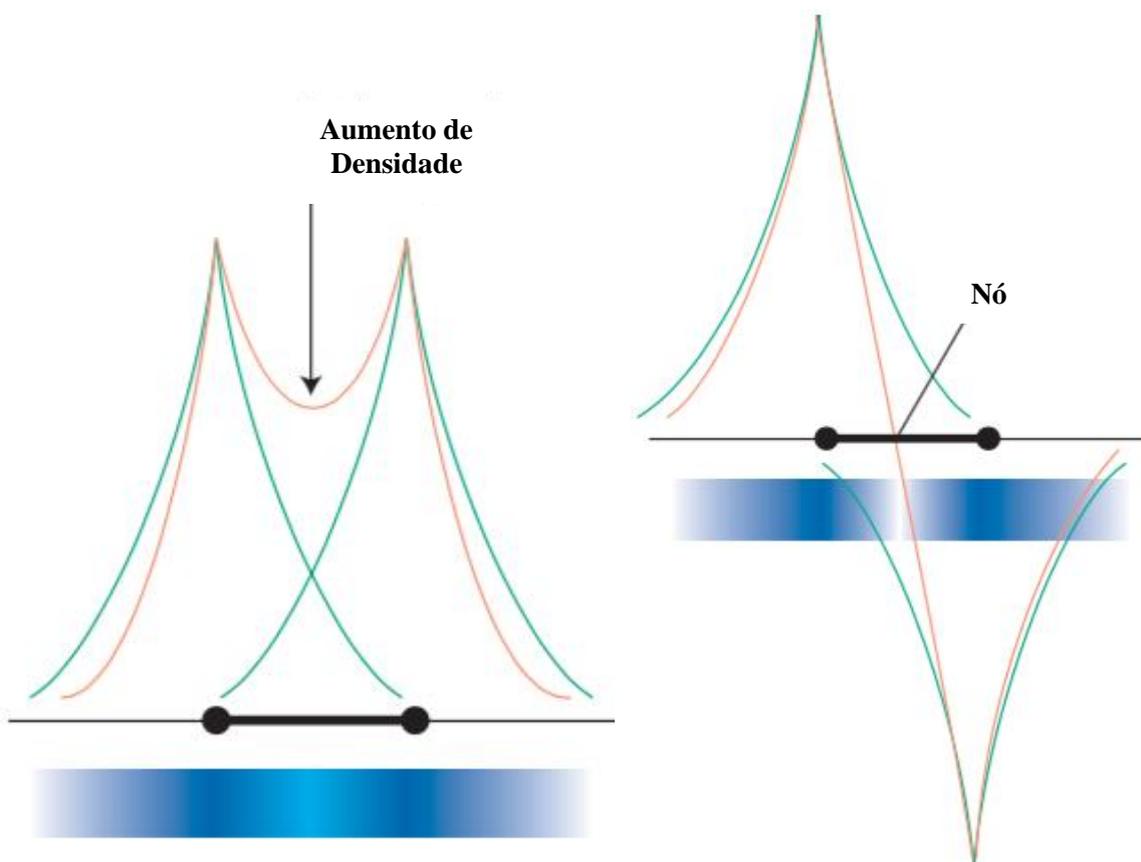
- 1) os AOs devem ter energias comparáveis;
- 2) eles devem se sobrepor de maneira significativa.

Os cálculos da mecânica quântica para a combinação dos AOs originais consistem em:

- 1) uma adição das funções de onda do AO;
- 2) uma subtração das funções de onda do AO.

Quando os dois átomos são diferentes, é incluído um fator que leva em conta o fato de que os dois AOs não contribuem igualmente para a formação dos MOs. Os resultados, então, são duas novas funções de onda MO, uma de adição e outra de subtração. Como sempre, o quadrado da função de onda para um elétron fornece informações acerca da probabilidade de encontrar este elétron em determinadas regiões do espaço. Quando isto é feito para um MO, resultam informações sobre a densidade de probabilidade para um elétron ocupando aquele MO e, a partir dessas informações, as superfícies limites correspondentes (e também os níveis energéticos) podem ser encontradas. Este método é conhecido como a combinação linear de orbitais atômicos, ou método LCAO (Linear Combinations Atomic Orbitals). Por esse método, o número de OA's envolvidos é igual ao número de OM's formados.

Figura 2 - gráfico do aumento e diminuição da densidade eletrônica, obtido após formação de MO's ligantes (esquerda), e antiligante (direita).



Fonte: (ATKINS, 2012).

A figura à esquerda mostra o gráfico do aumento da densidade eletrônica na região

internuclear, que surge da interferência construtiva entre os dois orbitais atômicos (linhas verdes) gerando o orbital molecular ligante (linha laranja). A figura à direita representa o gráfico resultante da interferência destrutiva da sobreposição de orbitais atômicos com sinais opostos (linhas verdes). Essa interferência leva à uma superfície nodal, ou apenas nó, na superfície do orbital molecular antiligante. Ainda pelo método de combinação linear dos orbitais atômicos, o número de orbitais moleculares ligantes formados é igual ao número de orbitais moleculares anti-ligantes.

Tendo-se em mente o procedimento Aufbau, pelo qual os elétrons são adicionados um a um ao diagrama de energia dos AOs com o objetivo de construir a configuração eletrônica dos átomos, usa-se técnica semelhante para preencher os níveis energéticos do diagrama de OM. A distribuição dos elétrons nos orbitais moleculares obedece aos mesmos princípios na distribuição dos orbitais atômicos: os princípios de Exclusão Pauli e a regra de Hund:

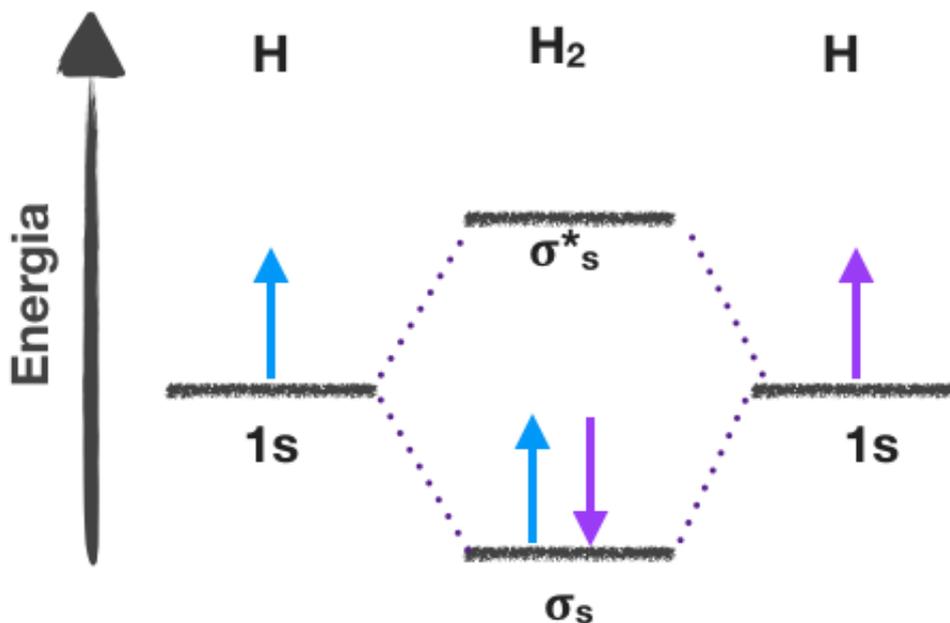
Na primeira regra do orbital molecular é que o mesmo número de orbitais moleculares OM formados é o mesmo de orbitais atômicos OA formadores fornecidos pelos átomos que se combinaram.

Na segunda regra é que o orbital molecular ligante OM tem nível mais baixo de energia do que os orbitais atômicos formadores. E o orbital antiligante tem nível mais elevado de energia.

Terceira regra, as distribuições dos elétrons na molécula partem dos orbitais de energia mais baixa até os de energia mais elevada segundo o princípio de exclusão de Pauli e a regra de Hund.

Empregando como exemplo a molécula de H_2 , a mais simples. A Figura 3 mostra, à esquerda e à direita, elétrons colocados em dois átomos de H não ligados e, no meio do diagrama, a molécula de H_2 no estado fundamental. Os dois elétrons $1s$ vão constituir um par (spins opostos) no orbital σ_s (ligante) da molécula. Este par constitui uma ligação simples.

Figura 3 - Diagrama de níveis de energia de OM's para a molécula de H₂.



Fonte: Própria

Na TOM, a ordem de ligação é definida como:

$$\text{Ordem de Ligação} = \frac{1}{2} (n^{\circ} \text{ de elétrons OML} - n^{\circ} \text{ de elétrons OMAL})$$

Sendo, OML os orbitais moleculares ligantes e OMAL os orbitais moleculares anti ligantes

Os orbitais são representações que são utilizadas para explicar fenômenos dentro de algumas áreas da química, como, por exemplo, na Química Quântica. Nela os Orbitais Moleculares servem como modelo para explicar a formação das ligações químicas, suas propriedades, e como ocorre a sobreposição dos orbitais atômicos para formar orbitais ligantes e antiligantes. (AUTSCHBACH, 2012). Outras características, que podem ser úteis na aplicação dos orbitais, é a explicação sobre o fenômeno de excitação dos elétrons, quando um dos elétrons emparelhados ganha energia, saindo do nível de menor energia (HOMO) e indo para um nível de maior energia (LUMO), proporcionando a possibilidade de gerar emparelhamento dos elétrons nas sobreposições de orbitais atômicos ou nas explicações de fenômenos como fosforescência e luminescência. (AUTSCHBACH, 2012)

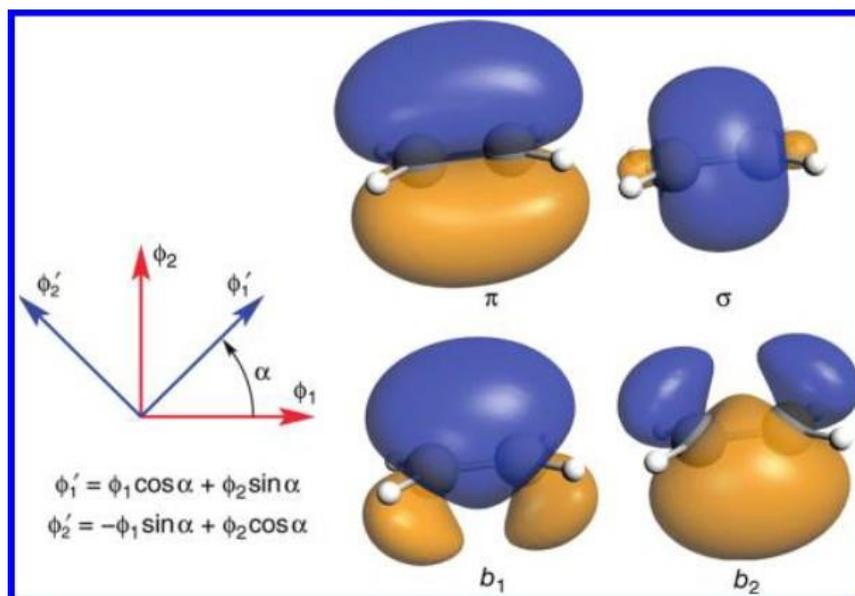
As ligações químicas, em basicamente todos os níveis de ensino, são representadas através da mecânica clássica, isto é, através do modelo de ligação massa-mola ou simplesmente traço-bola (no geral, isso ocorre pela facilidade), porém, nem sempre essa representação proporciona informações úteis necessárias. “Nos casos em que uma fórmula de Lewis não é auto-evidente, um cálculo de orbital molecular pode ser utilizado para melhor orientação.”(AUTSCHBACH, 2012, p.2)

A utilização da química quântica para explicar os fenômenos relacionados às ligações tem se mostrado extremamente necessária, tanto para entender situações e fenômenos, como também para explicá-los. As funções de onda é um exemplo desse fato, pois as mesmas são obtidas através de cálculos baseados em teorias quânticas que fornecem informação de ligações, como também informação sobre a estrutura das moléculas. (AUTSCHBACH, 2012)

Uma característica bem específica e bem conhecida sobre a utilização da mecânica quântica é que a mesma, frequentemente, corrige conceitos utilizados na mecânica clássica. Um dos erros mais comuns e ainda utilizado em sala de aula por muitos professores é o fato do Princípio de Pauli descrever separadamente os elétrons por orbitais ou por tipo específico. Isto é, o que a química quântica afirma é que (em relação à posição dos elétrons nos orbitais) todos os elétrons, seja ele mais próximo do núcleo atômico ou o elétron de valência, ambos são iguais, pois os elétrons são indistinguíveis. Já em relação à especificidade, é errado fazer afirmações do tipo: “elétron π ” está em determinada posição, pois não é possível identificar a posição em que se encontra a partícula no espaço. (AUTSCHBACH, 2012)

Os orbitais podem se particionar em diferentes tipos, de acordo com a ligação que está se tornando. Em um exemplo, visualizado na **figura 4**, no qual a ligação entre dois carbonos deve ser representada de acordo com seus orbitais, é possível identificá-los, com variação na quantidade, com diferentes ângulos da molécula, para diferentes tipos de ligação, formatos e conseqüentemente, geometrias da molécula. (AUTSCHBACH, 2012)

Figura 4 - Representação dos orbitais moleculares da ligação entre dois átomos de carbono, com diferentes ângulos de ligação para diferentes tipos de ligações.



Fonte: (AUTSCHBACH, 2012)

Outra questão a ser observada é a energia total de uma molécula, que não se resume à energia dos orbitais. Essa energia total é, além da soma das energias desses orbitais, a soma das repulsões nucleares e as repulsões dos elétrons. Uma forma aproximada de se obter esse valor é a partir dos diagramas de Walsh, que para moléculas pequenas, o valor de repulsão nuclear é ignorado e somado duas vezes o valor da repulsão dos elétrons, já que, para mesmas moléculas, a tendência de repulsão nuclear e dos elétrons se assemelham. (AUTSCHBACH, 2012)

“Teorias semi-empíricas de um único elétron, como a teoria de Hückel (estendida), são de natureza diferente porque não há repulsão efetiva de elétrons e elétrons e a energia eletrônica aproximada é a soma das energias dos orbitais. Isso pode se estender por longos períodos para a aplicação notavelmente bem-sucedida das teorias de Hückel a muitos problemas na química.³¹ As energias orbitais do diagrama de Walsh talvez também sejam mais bem compreendidas nesse sentido semi-empírico de um elétron” (AUTSCHBACH, 2012)

Autschbach (2012) aponta que, levando em consideração um átomo que apresente apenas um elétron, tanto a Teoria de Huckel como o diagrama de Walsh, são capazes de obter a energia total do átomo, já que, em ambas, essa energia total será a soma das energias dos orbitais. Porém, não são apenas esses fatores (incluindo a repulsão entre elétrons e do núcleo) que influenciam a energia total de átomos com um ou mais elétrons e de moléculas. Se faz necessário obter a energia de repulsão entre orbital, pelo fato de haver mudança de ocupação nos orbitais quando é adicionado, removido ou substituído orbitais na construção

das funções de onda dos elétrons, que ocorre quando se pretende criar configurações excitadas. (AUTSCHBACH, 2012)

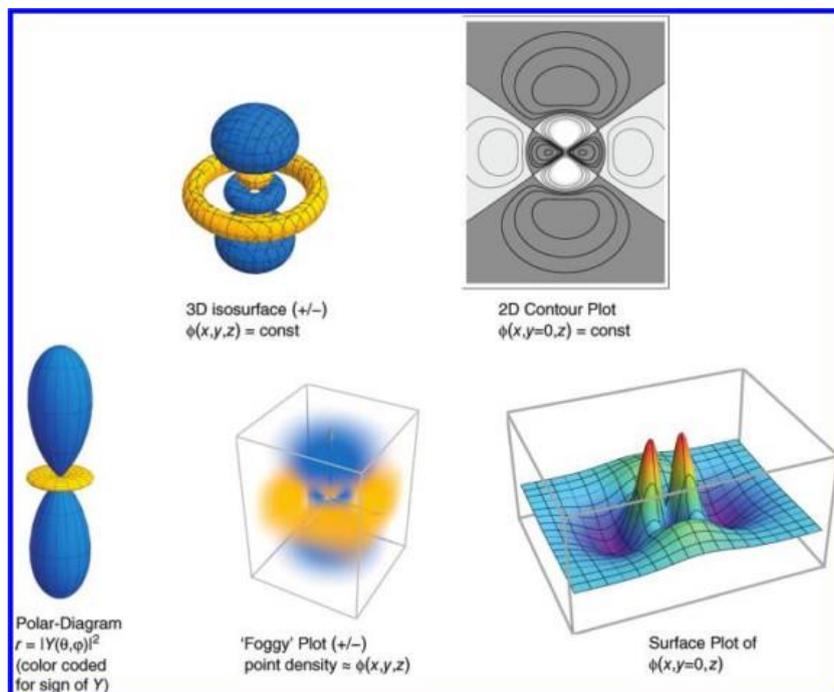
Quanto à transmitir informação com esse nível de complexidade para os alunos, no geral, os mesmos acabam ficando aflitos e confusos com as informações, sem saber definir a ordem de energia dos orbitais, a menos que sejam orbitais simples. (AUTSCHBACH, 2012)

É necessário estabelecer firmemente que os diagramas de nível de energia orbital são, em princípio, os resultados dos cálculos da química quântica. Um pesquisador ou educador pode frequentemente desenhar um diagrama orbital qualitativamente correto para uma molécula ou complexo ametal sem realizar um cálculo numérico, baseado na experiência com os resultados de tais cálculos que foram acumulados ao longo de décadas (AUTSCHBACH, 2012)

O que o autor indica é que o professor precisa conhecer os conteúdos de maneira quantitativa e passar as informação qualitativamente. Isto é, em situações em que o professor utiliza estrutura de Lewis e hibridização atômica, ele não necessita realizar cálculos de funções, todavia o professor precisa conhecer essas informações para poder transmitir de forma simplificada, porém correta, para o aluno. O mesmo ocorre, por exemplo, para Orbitais Moleculares que, por mais que seja uma informação obtida através da mecânica quântica, pode ser perpassado ao aluno de maneira mais acessível ao nível de estudo do mesmo. (AUTSCHBACH, 2012)

Para demonstrar, em sala, informação desse nível (quantizada) se faz necessária a utilização de ferramentas computacionais, pois, em lousa ou papel seria muito complexo desenhar estruturas tridimensionais, em um plano bidimensional. Ou seja, escrever à mão um gráfico ou objeto $\phi(x, y, z)$ se torna inviável. Na **figura 5** é possível ver como seria uma demonstração bidimensional e tridimensional (com auxílio de ferramentas computacionais) do orbital atômico e a função de onda do hidrogênio no seu estado excitado. (AUTSCHBACH, 2012)

Figura 5 - Representação de orbitais em 2D e 3D e na região inferior direita é possível visualizar a função de onda do hidrogênio, no estado excitado



Fonte: (AUTSCHBACH, 2012).

É importante salientar a importância do modo como são explicados aos alunos os vários tipos e formas dos orbitais. Quando o aluno se depara com a figura dos orbitais perfeitamente desenhados, o mesmo imagina que os elétrons ficam girando, compactado, dentro dos baldezinhas, e não em uma região de máxima e mínima probabilidade de serem encontrados. O autor recomenda apresentar os gráficos de densidade com isossuperfícies, que são os orbitais com formas fixas, ou de balões, paralelos aos *foggy Plot*, que mais se assemelham à neblinas de eletros, no qual uma série de pontilhados indicam regiões com maior densidade eletrônica nos orbitas (AUTSCHBACH, 2012)

Voltando para as representações qualitativas em termos de ligações, a utilização de estruturas de Lewis também é usada para comprovar ou identificar falhas em algumas teorias, como é o caso do princípio de eletroneutralidade de Pauling e a regra do octeto. (MARTINIE et al., 2011)

Em uma pesquisa utilizando moléculas diatômicas (N_2 , CO, BF), foi identificado que, mesmo sendo estruturas eletricamente semelhantes, apresentam ordens de ligações totalmente diferentes. Ou seja, é fundamental a consciência de que teorias nem sempre

proporcionarão resultados corretos quando se fala em ligações químicas. Fatores como a carga da molécula, por exemplo, pode ser suficiente para não completar o octeto. (MARTINIE et al., 2011)

“Embora as estruturas de Lewis sejam valiosas como uma ferramenta simples, a teoria de orbita molecular (TOM) é uma abordagem mais sutil, que, entre outras ideias, distingue entre σ e π orbitais antiligante e ligante.” (MARTINIE et al., 2011, p.1). Martinie afirma que a utilização da TOM se torna, em alguns casos, fundamental para questões acerca dos átomos e moléculas, como informações de energia, apresentado no mesmo parágrafo da citação. O que ele traz não é a necessidade de substituir os métodos de estruturas simples, como é o caso de Lewis, mas utilizar cada método de acordo com a necessidade. (MARTINIE et al., 2011)

4 METODOLOGIA

O trabalho realizado é de natureza aplicada e exploratória, utilizando métodos experimentais e de caráter qualitativo. A pesquisa tem seu papel no entendimento e interpretação dos dados obtidos, levando em consideração diversos aspectos. Seu caráter qualitativo se dá pelo fato de que a abordagem utilizada foi pensada em utilizar, na pesquisa, um grupo de cinco participantes, no qual se caracterizam como um grupo social. Outras características, como o uso de diversas fontes de dados, só reforça a utilização desse caráter. (SILVEIRA; CÓRDOVA, 2009)

4.1 PARTICIPANTES

O critério de escolha dos alunos foi baseado no nível de instrução que os mesmos deveriam apresentar a respeito de todos os conteúdos relacionados à Ligações Químicas. Ou seja, é esperado que os alunos de sexto período tenham uma base adequada dos conteúdos, já que os mesmos passaram por 5 disciplinas de química (Introdução à Química; Química Geral I; Química Geral II; Química Inorgânica I; Química Inorgânica II), nas quais apresentam em suas grades relações entre todas as propriedades específicas dos conteúdos de LQ.

Os participantes escolhidos são das turmas de Físico-Química I e II, do curso de química do centro acadêmico do agreste (UFPE-CAA). Em ambas as turmas houveram estudantes interessados em realizar o questionário e, no geral, foram obtidos 33 participantes, sendo que 19 da turma de Físico-Química I e 14 da turma de físico-química II.

Para participar da atividade, apenas 5 foram escolhidos, baseado no rendimento obtido nesses questionários. O critério da seleção foi inicialmente o interesse em participar, no qual ao realizar o questionário, aqueles que tinham interesse deixaria os dados em um espaço destinado no rodapé, (que após o fim da seleção, foi desconsiderado e adotado um número de referência como método de identificação do participante, que será explicado mais à frente).

Dos interessados, foram analisados os questionários mais diversos, desde os com melhores respostas aos com maior dificuldade nos quesitos apresentados. Dessa lista de 33 alunos, analisados em ordem aleatória, foram escolhidos os participantes com numeração 04 e 10, que estão matriculados na disciplina de Físico-Química I e os participantes de número 21, 22 e 32 que estão matriculados na disciplina de Físico-Química II. Os números descritos

no processo de seleção foram adotados como referência para identificação de cada um desses participantes.

4.2 LOCAL

Dois locais foram utilizados para realizar a sequência didática, sendo um deles o laboratório do Grupo de Química Computacional do Agreste – GQCA. Esse ambiente foi escolhido para informar aos estudantes como seria realizada a intervenção e apresentar alguns conceitos que serão citados no tópico da intervenção, a fim de entender o nível ao qual os participantes se encontram para poder elaborar as atividades.

O segundo local foi o laboratório computacional Andorinhas, do bloco administrativo do centro acadêmico do agreste, já que para realizar as atividades planejadas foi preciso o uso de computadores com o programa Avogadro instalado.

4.3 INTERVENÇÃO

Para iniciar a intervenção foi necessário, inicialmente, realizar uma primeira análise entre os 33 participantes do primeiro questionário. Após a análise e identificação dos participantes, foi planejada, de acordo com o perfil dos envolvidos, uma sequência didática.

Na realização da atividade de intervenção, foram necessários computadores com o *software* Avogadro instalado e o acesso à internet, já que o programa auxiliou no aprendizado dos conteúdos trabalhados e o uso da internet se fez necessário para a realização dos formulários/questionários online.

A atividade se baseia em uma sequência didática dividida em 3 etapas, na qual ocorram pequenas avaliações no decorrer do processo, para medir o desempenho dos alunos não apenas antes e depois da atividade.

Essas avaliações foram apresentadas aos estudantes de duas formas: no modelo de formulário online (formulário F1 e formulário F2), utilizando a plataforma gratuita do Google como ferramenta de coleta de dados; e duas atividades como forma de aplicação destes formulários.

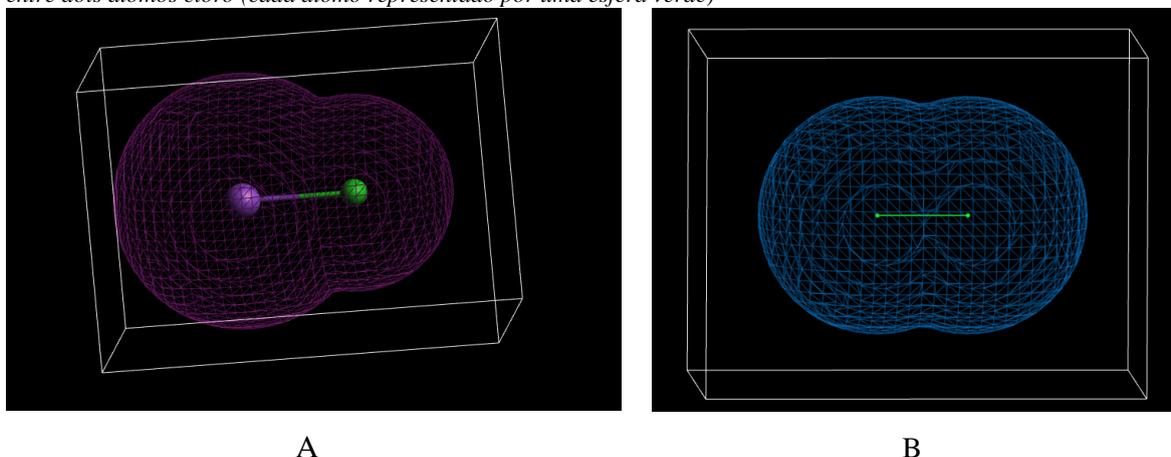
1º ENCONTRO

O primeiro encontro da intervenção ocorreu no laboratório do GQCA e nesse

momento foi discutido com os participantes como funcionaria a sequência didática, no qual a partir desse ponto será chamada de oficina. A oficina foi formalizada e recebeu o título de “*Ligações Químicas: Explicando Fenômenos e Conceitos Através do Programa Avogadro*” A mesma apresentou um roteiro que está anexado no apêndice.

Além das questões acerca da oficina, foram abordados alguns conceitos sobre as ligações químicas, sempre relacionando ao programa Avogadro. Os tipos de ligação, por exemplo, eram representados com imagens tiradas do programa, apresentando suas propriedades. Na figuras 6, estão dois exemplos adicionados ao slide que está, também, presente no apêndice, de ligação iônica e covalente, respectivamente.

Figura 6 - Representação da A) ligação iônica entre o cloro (esfera lilás) e o sódio (esfera verde) e da B) ligação covalente entre dois átomos cloro (cada átomo representado por uma esfera verde)



Fonte: Própria

Ao fim do primeiro encontro, todos, utilizando o *QR code* disponibilizado na última página do slide, responderam o primeiro formulário.

2º ENCONTRO

No segundo encontro foi apresentado aos participantes o programa a ser utilizado, suas funções e principais ferramentas no uso das representações das ligações químicas. Nesse encontro os mesmos tiveram a liberdade de criar moléculas e aprender de forma investigativa a utilizar a ferramenta. Em seguida, todos seguiram os passos para recriar as moléculas presentes no slide do primeiro encontro.

Após a familiarização do programa, todos foram instruídos, utilizando as moléculas criadas por eles, a identificar as possíveis informações presentes no *software* que seriam

pertinentes às ligações químicas, como a formação de dipolo, diferença de eletronegatividade, distância e ângulos de ligação, entre outros.

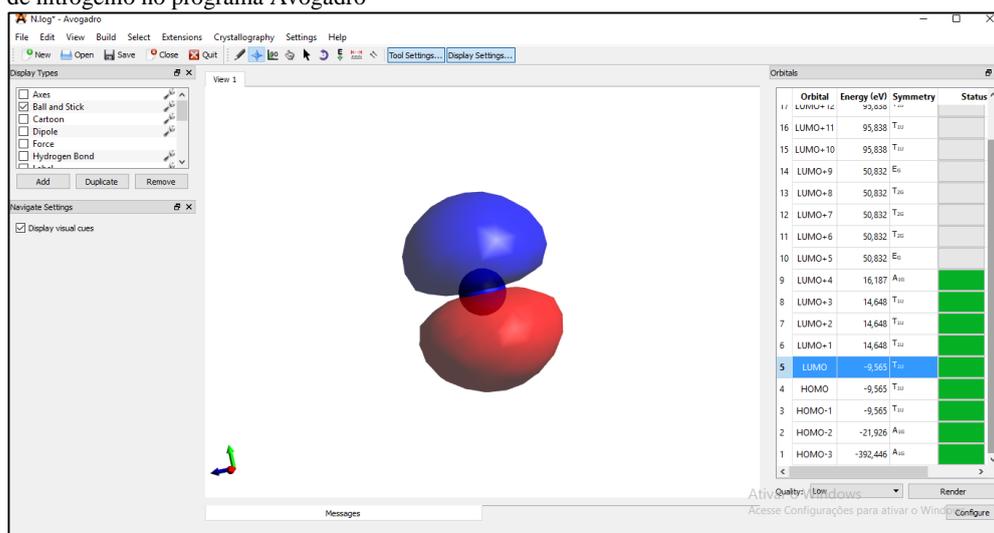
Ao fim da prática do segundo encontro, os participantes foram direcionados ao segundo formulário e, em seguida, foi encerrado o encontro.

3º ENCONTRO

No terceiro e último encontro, os participantes foram direcionados aos computadores, nos quais havia uma pasta contendo todo o material referente à prática do dia. Nessa pasta haviam duas atividades com roteiro, um questionário (Q2) e um termo de consentimento, que também estavam impressos sobre o teclado de cada participante.

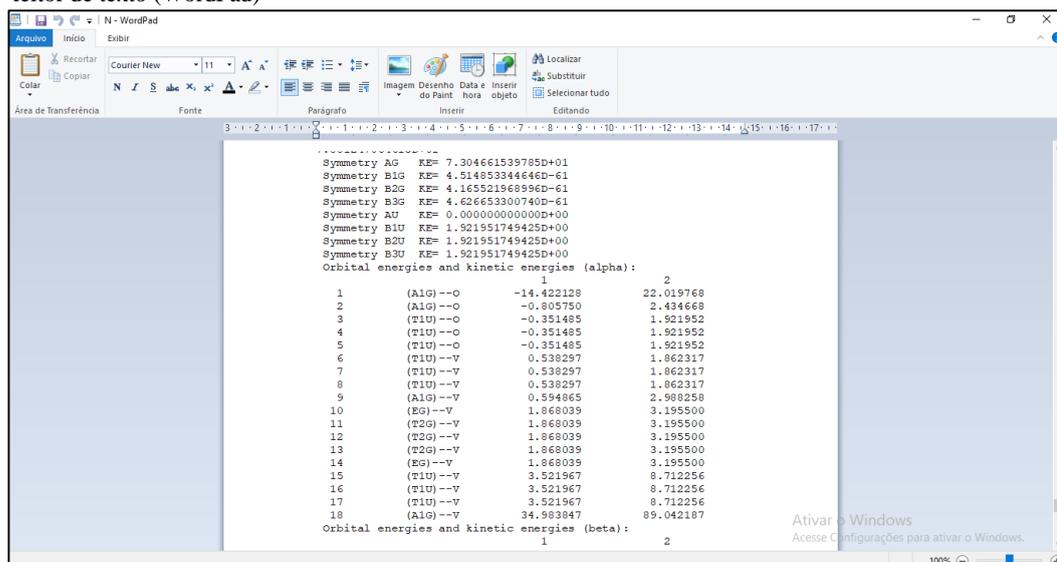
Além dos documentos citados, dentro da pasta continham arquivos de dados das moléculas, que poderiam ser abertos em algum leitor de texto, como também no próprio programa Avogadro. Esses arquivos de dados das moléculas eram os respectivos arquivos de *input* (entrada) e *output* (saída). Foram realizados previamente cálculos de estrutura eletrônica para as moléculas estudadas com o programa Gaussian e disponibilizados para os participantes da oficina. A principal função desses arquivos *output* era descrever as energias dos orbitais preenchidos dos átomos e moléculas. As figuras 7 e 8, mostram o mesmo arquivo aberto em um programa de leitura de texto e no Avogadro.

Figura 7 - imagem da tela do computador ao abrir o arquivo contendo informações sobre o átomo de nitrogênio no programa Avogadro



Fonte: própria

Figura 8 - Imagens da tela do computador ao abrir o arquivo com os dados do nitrogênio, em um leitor de texto (WordPad)



Fonte: Própria.

Na figura 7, é identificado o átomo de nitrogênio e na lateral direita as informações acerca das energias dos orbitais. Esses valores são utilizados para visualizar, como mostra na imagem, uma representação gráfica dos orbitais ao redor do núcleo do átomo. Em uma situação na qual os participantes teriam pouco conhecimento a respeito das ligações, a relação da imagem formada com os dados ao lado, tornaria possível os envolvidos assimilar como a variação nessa energia está ligada à algumas propriedades periódicas que os mesmos relacionam ao fato de ocorrer a ligação.

Na imagem 8, estão transcritos todos os dados presentes na imagem anterior. De 1 a 18 estão sendo descritos os orbitais preenchidos (O) e não preenchidos (V). Na coluna 1 estão mostradas as energias dos orbitais e na coluna 2, as energias cinéticas dos elétrons.

Todos esses dados foram construídos para o nitrogênio (N), oxigênio (O) e neônio (Ne), como também para as moléculas de LiF, HF e F₂. Os processos de construção desses arquivos de informação não são de importância para o trabalho, apenas o uso destes no programa Avogadro, para fins de investigação.

A utilização desses arquivos foi feita com o uso de dois roteiros presentes nas atividades que estão anexadas no apêndice, entretanto, nas figuras 09, 10 e 11, se encontram alguns dos passos utilizados para que os participantes fossem norteados a utilizar adequadamente o programa e os arquivos contendo as informações.

Figura 9 - Roteiro da primeira atividade realizada na oficina.



- Atividade 1 - Cálculo de orbitais atômicos e energia para os átomos de nitrogênio, oxigênio e neônio (DFT 6-31G*).

Estudantes comparam as energias dos orbitais dos três átomos ($Z_N = 7$, $Z_O = 8$, $Z_{Ne} = 10$)

- 1) Visualizar e compreender os inputs dos cálculos para os 3 átomos.

Aplicação do F1

- 2) Abrir o output dos cálculos em um leitor de textos.
- 3) Abra os respectivos arquivos N.log no programa Avogadro, depois o O.log e o N.log
- 4) Complete a tabela abaixo:

Orbital	Energia		
	Nitrogênio	Oxigênio	Neônio
1s			
2s			
2p _x			
2p _y			
2p _z			

1 a.u (atomic unit) = 27,2114 eV

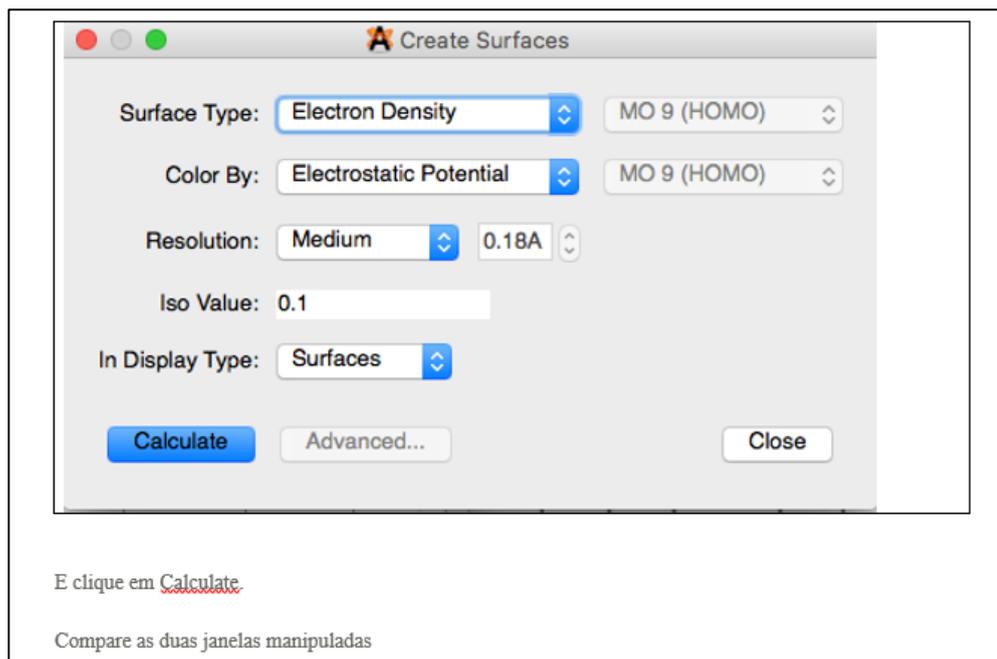
Fonte: Própria

Figura 10 - Continuação do roteiro apresentado na imagem 05.

4. Abra o arquivo **LiF_orb.log** no programa Avogadro e faça os mesmos procedimentos para mudar a cor do fundo do display.
5. Acesse a função do lado direito do programa para visualizar os orbitais moleculares formados e suas respectivas energias
6. Faça o mesmo procedimento para os arquivos **HF_orb.log** e **F2_orb.log**
7. Abra uma nova janela do Avogadro abra o arquivo LiF_dens.fchk (Mude o display para uma cor clara). E em outra janela abra o arquivo F2_dens.fchk.
8. Em cada janela siga o caminho Extensions > Create Surfaces
9. Configure a nova janela dessa forma

Fonte: Própria

Figura 11 - Continuação do roteiro presente na figura 13



Fonte: Própria.

Essas três imagens que compõem o roteiro apresentado aos participantes, estão divididos nas duas atividades. A primeira imagem é o fragmento encontrado na primeira atividade e ele auxilia o participante a investigar as propriedades, como a energia dos orbitais ocupados e não ocupados, como a energia cinética dos elétrons.

As duas imagens seguintes são referentes a parte do roteiro presente na atividade 2. Ambas apresentam a mesma finalidade, no entanto, a da segunda atividade possibilita o participante obter as informações citadas no parágrafo anterior, para as moléculas de HF, LiF e F₂.

A partir desse experimento realizado com os participantes, os mesmos foram instruídos, durante a prática, a realizar algumas questões que estão anexadas no apêndice, e as análises tornaram possível identificar algumas falhas que serão discutidas nos resultados.

Ao fim das duas atividades, os estudantes foram instruídos a responder o questionário Q2, logo após preencher o termo de consentimento, por concordarem em participar da pesquisa, por livre e espontânea vontade.

4.4 FERRAMENTA DE ANÁLISE

Partindo da utilização da Análise Textual Discursiva (ATD), no qual a mesma tem

como principais ferramentas o uso de questionário e entrevistas, é possível que o pesquisador obtenha informações, em termos de compreensão do que está sendo investigado, sem intenções de comprovar ou refutar dados. (MORAES, 2003)

Essa ferramenta de análise perpassa dois tipos diferentes de análises, sendo ambos para dados qualitativos, um deles a análise de conteúdo e o outro, a análise de discurso. Devido os dados coletados serem quase que exclusivamente escritos, a análise de discurso será pouco utilizada nessa pesquisa. (MORAES, 2006)

A utilização do método ATD se explica pelo fato do mesmo ser utilizado em pesquisas diversas em graduação, mestrado e doutorado. Outro quesito que o torna tão impactante e importante para o enriquecimento da pesquisa é que, além de abranger a educação, o mesmo ocorre para a psicologia, comunicação e áreas afins. (MORAES, 2003)

Outro fator bastante relevante é o método ATD, que pode ser utilizado associando-o paralelamente a outros métodos de análise, sendo assim, no decorrer da prática metodológica, se houver a necessidade de promover mais análises, segundo o autor, não prejudica ou desqualifica as anteriormente utilizadas. Além de ser recomendado para pesquisas cujas análises são propostas na intenção de corrigir ou propor solução a partir da investigação realizada. (MORAES, 2003)

Moraes (2003) em seu artigo traz um parágrafo que caracteriza de maneira sucinta o que seria esse método de análise:

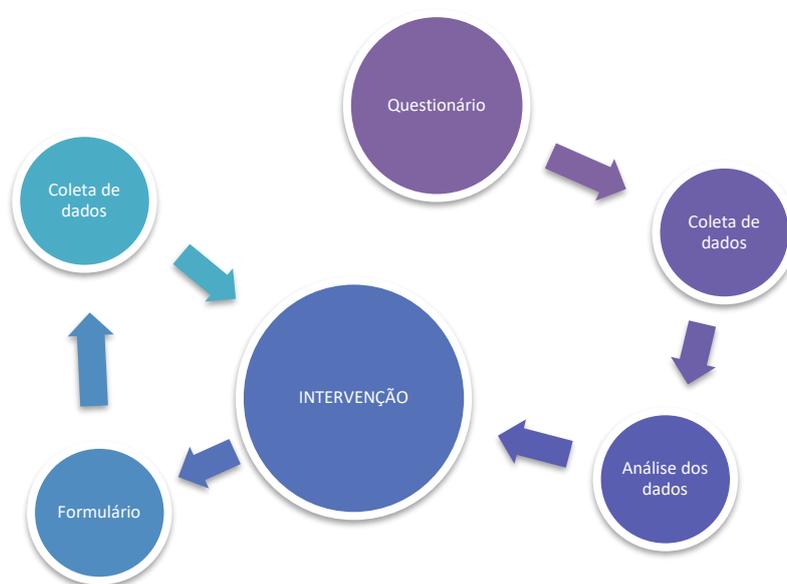
a análise textual qualitativa pode ser compreendida como um processo auto-organizado de construção de compreensão em que novos entendimentos emergem de uma seqüência recursiva de três componentes: desconstrução dos textos do corpus, a unitarização; estabelecimento de relações entre os elementos unitários, a categorização; o captar do novo emergente em que a nova compreensão é comunicada e validada. (MORAES, p. 192, 2003)

Sendo assim, a partir de percepções das falhas no aprendizado de alguns conceitos e conteúdo da química, desenvolvidas no curso de Química Licenciatura do Centro Acadêmico do Agreste (UFPE/CAA) se fez necessário entender onde, como e porquê dessa falha. Sendo assim, a ATD uma das melhores ferramentas de análise.

4.5 COLETA DE DADOS

Abaixo é possível visualizar um fluxograma criado para melhor entender o principal

processo de coleta e análise dos dados. Além das etapas presentes, existem outras que não foram adicionadas, mas que fazem parte do ciclo que se inicia durante a intervenção.



A coleta de dados realizada foi dividida em três etapas, como descrito no fluxograma acima. As coletas ocorreram antes da intervenção, durante a intervenção e após a intervenção.

Aqui, o principal foco foi propor uma análise com a finalidade de obter resultados positivos e negativos, no qual os positivos se resumiram a: informar como o aluno se encontra em termos de conhecimento sobre os conteúdos abordados (antes da intervenção), e principalmente observar os avanços dos alunos após a prática de intervenção. Os resultados negativos também foram um ponto importante, já que um dos critérios de análise foi o levantamento de erros. Os erros cometidos pelos alunos durante a realização dos questionários deixaram claro onde se encontram os principais problemas no aprendizado relacionado às Ligações Químicas e Teoria do Orbital Molecular.

Na ordem cronológica, foram descritas todas as ferramentas utilizadas na coleta dos dados. Inicialmente foi aplicado um questionário, definido como Q1, logo após foi realizada a análise desse questionário, de maneira bem qualitativa, sem a investigação de muitos detalhes, para serem selecionados cinco participantes, que fizeram parte da intervenção. Como será especificado com mais detalhe no tópico seguinte, foram filtrados cinco discentes de trinta e três.

As coletas dos dados seguintes foram realizadas com pouco mais de 15% dos estudantes que responderam o questionário Q1, e contaram com dois formulários, duas atividades e um

novo questionário. Durante e após a atividade de intervenção os participantes estavam sendo constantemente avaliados, para futuras análises de progresso.

4.4.1 Questionários

Questionário Q1

Para obter os primeiros dados da pesquisa, foi aplicado um questionário com as turmas de Físico-Química I e Físico-Química II, no qual todos os alunos participantes responderam ao questionário. Os alunos responderam algumas questões sobre conceitos químicos relacionados às ligações químicas.

No total foram respondidos 33 questionários, sendo 19 destes da turma de físico-química I e 14 da turma de físico-química II. Todos foram utilizados para entender o nível de instrução e compreensão que os estudantes de química possuem nesse nível do curso, no qual já passaram por todas as disciplinas que abordam os conceitos trabalhados, e entender quais as dificuldades e lacunas que têm se mostrado permanentes, mesmo em turmas diferentes.

Estes questionários também foram importantes para selecionar os alunos (a partir dos critérios discutidos no tópico “análise dos dados”) que participaram da oficina realizada como parte da pesquisa. Os estudantes interessados em participar da intervenção manifestaram interesse durante a realização do questionário e, por motivos de grande interesse, foram selecionados os que mais se encaixavam no perfil da pesquisa, ou seja, os mais diversos.

Levando em conta o que foi especificado no parágrafo anterior, a partir desse questionário, foram selecionados cinco estudantes que fazem parte das disciplinas de físico-química 1 (dois estudantes) e físico-química 2 (3 estudantes), para participar da oficina.

Questionário Q2

Diferente do questionário Q1, esse foi aplicado apenas com os participantes da oficina, não mais com os 33 iniciais. O Questionário Q2 será o instrumento de coleta de dados final, utilizado para coletar os últimos dados após o fim da intervenção.

Foram apresentadas nesse perguntas diferentes do questionário anterior, porém, com as mesmas perspectivas que o Q2 e com o mesmo nível de dificuldade. A partir desse, foi construído um gráfico dos resultados, no qual informa o avanço dos participantes após o

sequencia didática realizada com o uso do *software* Avogadro.

4.4.2 Formulários e atividades

Formulários 1 e 2

Utilizando a plataforma *online* de formulários do Google, os estudantes responderam questões anteriormente apresentadas a eles, para investigar se as respostas seriam as mesmas ou apresentariam informações diferentes das que foram adicionadas ao questionário Q1. Em outras palavras, as mesmas questões foram apresentadas aos estudantes em dois momentos: Antes da intervenção e durante a intervenção. Esses formulários foram aplicados nos dois primeiros encontros da intervenção.

Nesses mesmos formulários, além das perguntas repetidas, foram adicionadas novas perguntas que estavam completamente relacionadas as demais e com o mesmo nível de dificuldade. Além das perguntas encontradas, é possível identificar um espaço destinado a um número de referência, que é a forma de identificar e apresentar o estudante quanto participante da pesquisa.

Atividades 1 e 2

A fim de complementar os dados dos questionários e formulários, foram propostas duas atividades, visando aplicar ambos os formulários. Desta forma, utilizando a ferramenta computacional Avogadro, os participantes realizaram alguns experimentos a partir de um roteiro presente em ambas as atividades, sempre relacionado às questões presentes no questionário Q1, que também estão nos formulários F1 e F2, e, por isso, em cada atividade são encontrados dois tópicos “Aplicação do F1” e “Aplicação do F2”, com alguns quesitos distribuídos.

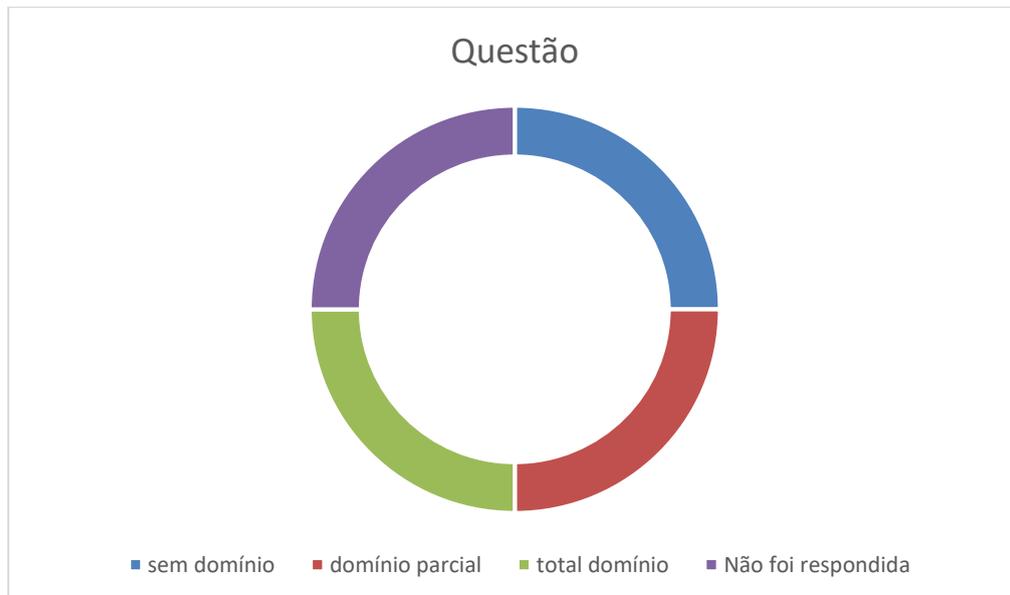
A finalidade desta atividade é que o aluno coloque em prática o uso do *software* e tenha a experiência de vivenciar “por conta própria” o uso da tecnologia digital, associada aos conceitos de ligações químicas. No apêndice se encontram ambas as atividades.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO Q1

Levando em conta que o método de análise ATD possui flexibilidade de utilizar, quando necessário, outros tipos de análises, sem comprometer o método ou a análise dos dados, sendo apenas necessário a descrição do método utilizados. Para a análise dos primeiros dados coletados a partir do questionário Q1, foi utilizado um método de análise por escala, a partir de critérios criados pelo próprio pesquisador durante a realização deste trabalho, cuja descrição deste método está apresentada no gráfico 1.

Gráfico 1 - Distribuição dos participantes que realizaram a questão e que obtiveram resultados que variam entre “sem domínio”; “domínio parcial”; “total domínio” e que “não foi respondida”.



Fonte: Própria

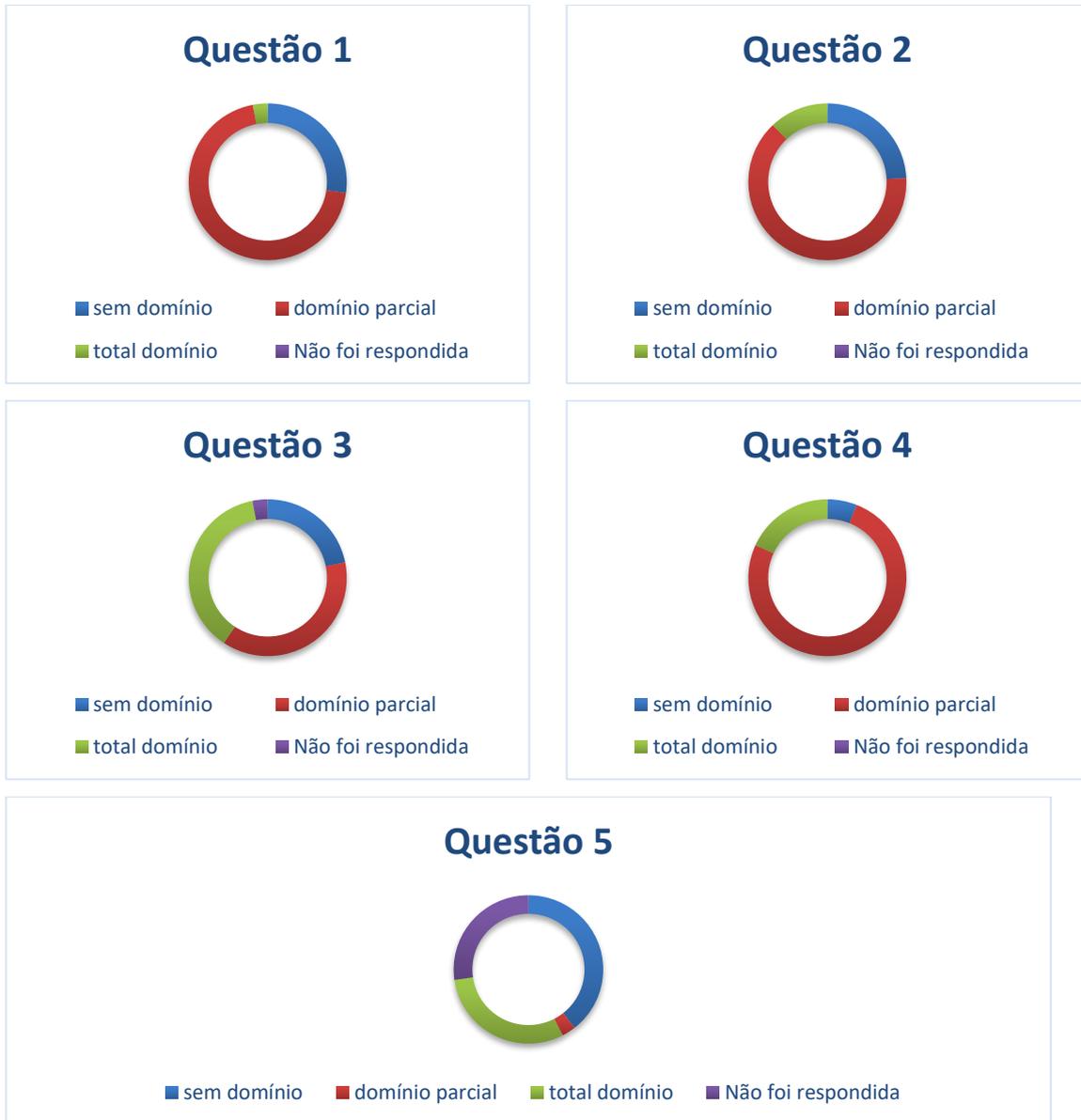
A primeira análise foi com os 33 questionários respondidos na primeira coleta de dados, utilizando o método descrito no gráfico 1, para todos os envolvidos, independente do interesse em participar da intervenção do projeto.

O primeiro questionário apresentou 6 questões (sendo uma delas desconsiderada na análise, pois era referente ao interesse dos estudantes em participar da oficina) e foram realizadas a análise e a construção do gráfico para cada uma das questões, com o intuito de compreender a situação dos estudantes em cada conceito abordado neste primeiro momento. A análise mais detalhada para esse questionário foi apenas realizada com os participantes da

intervenção.

Com isso, a primeira análise realizada com o questionário Q1, ficou da seguinte forma:

Gráfico 2 - Análise das 5 questões do questionário Q1



Fonte: Própria

Os gráficos acima foram produzidos a partir dos dados da tabela 1. Nela, encontra-se a quantidade de alunos que em cada questão não tiveram domínio, tiveram domínio parcial, domínio total ou não responderam à questão.

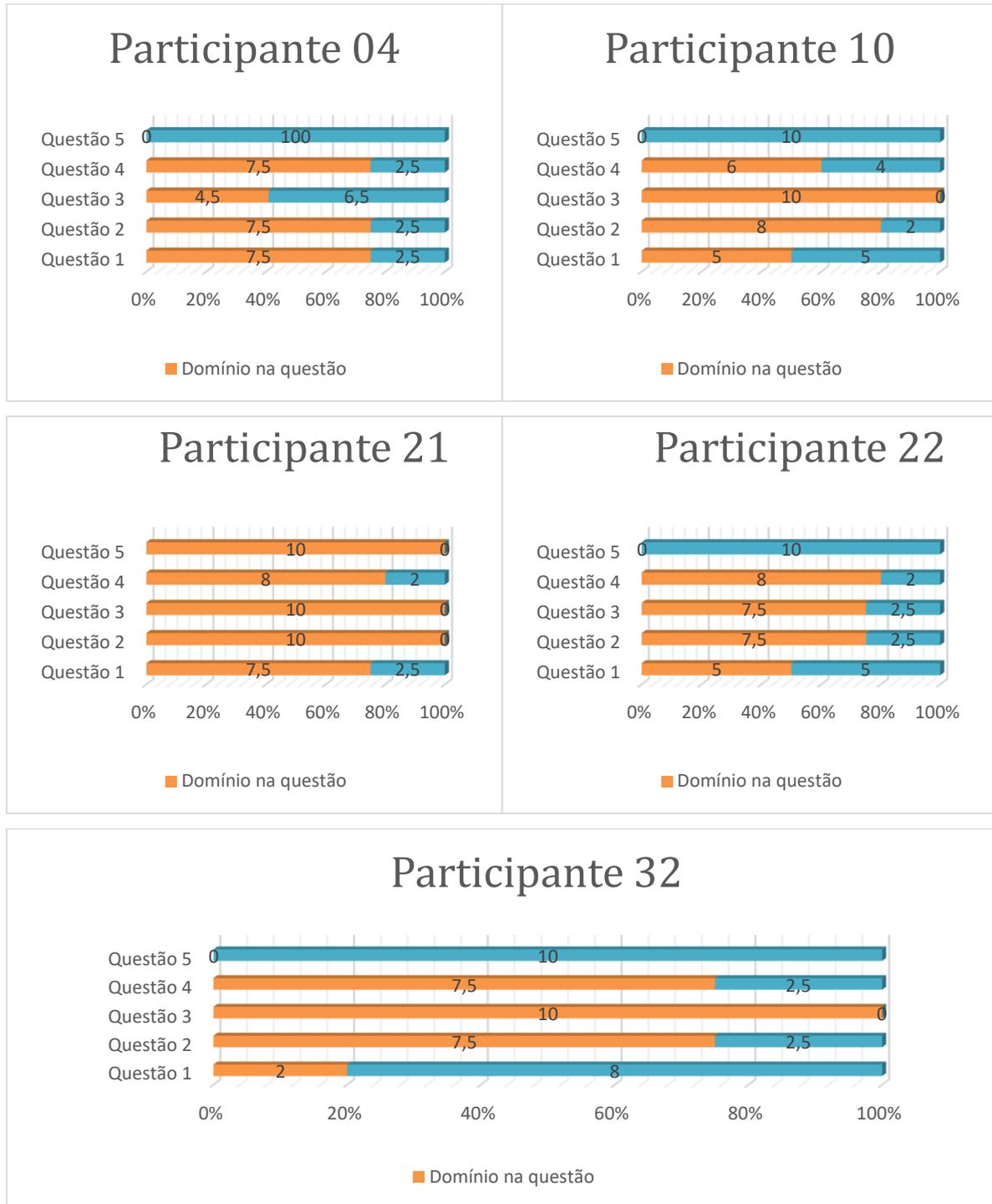
Tabela 1 – Domínio das questões, obtidos a partir da análise do questionário Q1 realizado com os 33 estudantes da físico-química I e II.

	<i>Sem domínio</i>	<i>Domínio parcial</i>	<i>Total domínio</i>	<i>Não foi respondida</i>
<i>Questão 1</i>	09	23	01	---
<i>Questão 2</i>	08	21	04	---
<i>Questão 3</i>	07	13	12	01
<i>Questão 4</i>	02	25	06	---
<i>Questão 5</i>	13	01	10	09

Fonte: Própria

Os gráficos 3 descrevem com mais detalhe o desenvolvimento dos discentes participantes da pesquisa no questionário Q1. Essa nova análise, com mais propriedade na análise, contou com um processo de correção ao qual o aluno poderia tirar qualquer valor, por questão, que estivesse na escala de 0 a 10. Com 0 discente ou não respondeu à questão ou errou por completo; 10 o mesmo apresentou total domínio e riqueza em detalhes na questão; entre 0.5 e 9.5 os alunos apresentam algum nível de conhecimento a respeito da questão, alguns mais e outros menos.

Gráfico 3 - Análise detalhada das questões do questionário Q1 para os 5 participantes da oficina



Fonte: Própria

Após visualizar esses gráficos, é possível perceber que os estudantes selecionados apresentam, a partir da análise do questionário Q1, perfis diferentes em termos de conhecimento das propriedades apresentadas a eles.

Levando em conta que foram escolhidos participantes que demonstraram ter bastante

domínio no conteúdo de ligações químicas, como também alguns que apresentam um pouco de dificuldade, foi aplicada a mesma metodologia para os cinco. É esperado que o uso da ferramenta Avogadro venha a contribuir no ensino de ligações química, para todos os alunos, desde os com mais dificuldade aos com maior domínio no conteúdo.

5.2 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS FORMULÁRIOS

Em nenhum momento foram questionadas as respostas apresentadas inicialmente pelos participantes no questionário Q1, mesmo as que estavam erradas. Nos formulários estavam presentes, além de novas perguntas, as perguntas já respondidas por esses, sendo possível o mesmo realizar um *feedback*, reescrevendo a resposta da mesma forma ou diferente. Com isso, foi percebido que os estudantes se autocorrigiam em praticamente todas as perguntas dos formulários, que estavam presentes no primeiro questionário, mesmo sem ter recebido correção das questões do questionário Q1, demonstrando mudanças na forma de pensar, sobre tais conceitos.

Na Tabela 2, estão apresentados os rendimentos obtidos por todos os participantes nos formulários F1 e F2 e a diferença entre o rendimento dos formulários, em comparação com o questionário Q1.

Tabela 2 – Valores atribuídos às questões dos formulários por participante e o avanço desses com relação ao questionário Q1.

Participante 04	1	2	3	4	5
Formulário F1	9,0	8,5	9,0	***	
Formulário F2	10,0	8,5	10,0	10,0	
Avanço/ <i>Regresso</i>	1,0	1,0	6,5	1,5	10,0
Participante 10	1	2	3	4	5
Formulário F1	9,0	8,0	7,5	***	
Formulário F2	7,5	8,0	10,0	10,0	
Avanço/ <i>Regresso</i>	3,0	0,0	0,0	1,5	10,0
Participante 21	1	2	3	4	5
Formulário F1	10,0	9,5	10,0	***	
Formulário F2	10,0	10,0	8,0	5,0	
Avanço/ <i>Regresso</i>	2,0	0,0	2,0	2,0	5,0
Participante 22	1	2	3	4	5
Formulário F1	9,0	7,0	10,0	***	
Formulário F2	10,0	10,0	8,0	0,0	
Avanço/ <i>Regresso</i>	2,0	2,5	2,0	2,0	0,0
Participante 32	1	2	3	4	5
Formulário F1	8,0	10,0	7,0	***	
Formulário F2	10,0	10,0	10,0	0,0	
Avanço/ <i>Regresso</i>	8,0	2,5	0,0	0,5	0,0

Fonte: Própria

Essa tabela foi produzida a partir das notas obtidas por cada participante, durante os dois formulários. O formulário F1 contando com 3 questões e o formulário F2 contando com 4, sabendo que, das 7 questões presentes nos formulários, 5 estavam presentes no questionário Q1. Foi feita uma comparação das respostas dessas 5 questões, respondidas no questionário Q1 e em ambos os formulários e percebeu-se que alguns participantes avançaram, permaneceram com a mesma resposta ou regrediram. Os valores em vermelho são referentes

ao regresso dos participantes. A ordem dos valores de “avanço/regresso” segue a ordem das questões do Questionário 1. Como exemplo, o participante 22 obteve bons resultados em todas as questões dos formulários, porém, quando comparados os valores numéricos dados às respostas e comparados com o questionário Q1, na questão 3 do questionário, o participante regrediu 2,0 pontos.

Ao visualizar os dados das tabelas, é possível perceber que, no geral, os participantes tiveram uma evolução desde o questionário Q1. Entretanto, além de em alguns casos, 80% dos participantes não terem evoluído em alguma questão, foi percebido que 3 participantes regrediram, sendo o participante 21 o que demonstrou o maior decaimento. (figuras 12 e 13)

Figura 12 - Resposta do participante 21, sobre qual a teoria atual que se baseiam as ligações químicas, no questionário Q1

5. Atualmente qual teoria de consenso científico para se descrever ligações químicas? *Uros.*
Como talado anteriormente existem diversas teorias cada qual com suas particularidades. A TOM e a teoria das cordas são teorias bastante complexas e renomadas.
Qual seu interesse em participar de uma oficina de aperfeiçoamento de conteúdo de ligações

Fonte: Própria

Figura 13 - Resposta do participante 21, sobre qual a teoria atual que se baseiam as ligações químicas, no formulário F2

Atualmente qual teoria de consenso científico para se descrever ligações químicas?

Existem diversas Teorias de ligações químicas capazes de explicar algumas coisas, mas muitas apresentam algumas limitações. Dentre estas, pode-se destacar a Teoria da ligação de Valência, Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons de Valência, Teoria do Orbital Molecular, Teoria das Cordas, Teoria do Campo Cristalino e Teoria do Campo Ligante. As duas últimas servem para explicar como os átomos do bloco d da tabela periódica se combinam mediante a formação de ligações coordenadas para formar compostos ou complexos de coordenação, sendo também muito importante. De acordo com o meu conhecimento e a leitura de alguns artigos a Teoria das Cordas, que utiliza uma combinação de diversos orbitais atômicos para formar diversos orbitais moleculares seguindo princípios de simetria molecular e química quântica, é a mais aceita atualmente pela comunidade científica.

Fonte: Própria

Isso se deu devido a formulação das questões, que anteriormente este apresentava mais de uma informação na resposta, no qual algumas das informações apresentadas estavam corretas. Exemplo disso foi na questão da teoria que explica as ligações químicas, que no primeiro questionário este participante demonstra estar em dúvida entre a Teoria do Orbital Molecular e a Teoria das Cordas. Já no formulário, ele acredita que entre elas, a que

provavelmente seja a correta seja a Teoria das Cordas. As respostas dos formulários e do questionário se encontram no apêndice.

5.3 ANÁLISE E DISCUSSÃO DAS ATIVIDADES

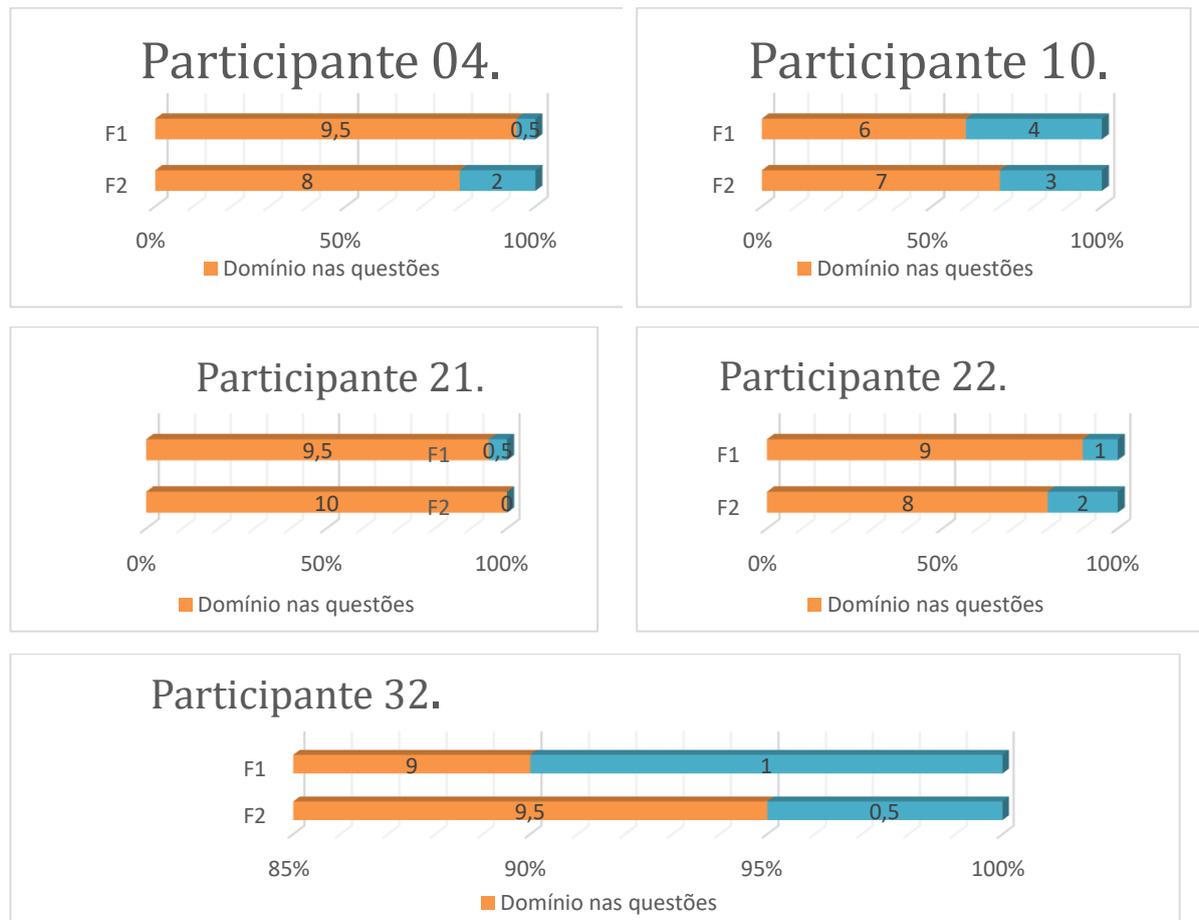
5.3.1 Primeira atividade

Ao analisar os dados da primeira atividade, foi percebido que 100% dos alunos conseguiram acompanhar o nível das explicações e utilizarem com êxito a ferramenta computacional utilizada na pesquisa.

Levando em conta que a atividade foi proposta para perceber o desempenho dos estudantes no conteúdo de LQ, utilizando o Avogadro, é comum que estes apresentem dificuldade ao tentar justificar uma questão que exige um grande nível de informações teóricas. Então, quando os participantes explicam de maneira informal, utilizando termos que facilmente podem ser assimilados às definições da literatura, pode-se considerar que o aluno obteve sucesso.

Foram construídos gráficos – um por aluno – no qual está expresso o nível de satisfação das respostas descritas pelos estudantes. Cada questionário apresenta dois tópicos com quatro alternativas cada (de “a” a “d”). Os tópicos são descritos como “Aplicação do F1” e “Aplicação do F2”, que são aplicações das perguntas presentes nos formulários F1 e F2. Uma observação é que a letra “d” do tópico “Aplicação F1” não foi respondida, pois exigia a utilização da internet e os computadores do laboratório Andorinha não estavam apresentando acesso à rede.

Gráfico 4 - Desempenho dos participantes na primeira atividade realizada com o uso do Avogadro.



Fonte: Própria

Descrevendo os dados encontrados nos gráficos, cada estudante foi avaliado de acordo com o seu desempenho nas questões realizadas durante a intervenção. Os gráficos apresentam valores em porcentagem, sendo assim, os alunos obtiveram pontuação de 0% à 100%, classificados da seguinte forma:

- Participante 04 obteve na primeira atividade um aproveitamento de 95% das questões do tópico “Aplicação do F1” e 80% das questões do tópico “Aplicação do F2”;
- Participante 10 obteve na primeira atividade um aproveitamento de 60% das questões do tópico “Aplicação do F1” e 70% das questões do tópico “Aplicação do F2”;
- Participante 21 obteve na primeira atividade um aproveitamento de 95% das questões do tópico “Aplicação do F1” e 100% das questões do tópico “Aplicação do F2”;

- Participante 22 obteve na primeira atividade um aproveitamento de 90% das questões do tópico “Aplicação do F1” e 80% das questões do tópico “Aplicação do F2”;
- Participante 32 obteve na primeira atividade um aproveitamento de 90% das questões do tópico “Aplicação do F1” e 95% das questões do tópico “Aplicação do F2”.

A partir dessa primeira atividade, foi possível identificar um pequeno avanço de cada um dos participantes, se comparado à análise realizada inicialmente com mais detalhes do questionário Q1. Entretanto, foi notada a dificuldade em alguns pontos, especialmente na construção dos gráficos, que será abordado mais à frente. Analisando os detalhes foi possível, ainda, perceber pontos interessantes de alguns, que em um dos casos prejudicou os participantes na execução das questões.

No que diz respeito ao participante 10, um dos motivos que foi percebido do mal rendimento nas questões, comparado aos demais, foi um erro de descrição da energia do oxigênio para o orbital 2pz, o que provavelmente o participante percebeu que havia uma tendência de repetições das energias dos orbitais P e não teve o cuidado de conferir adequadamente. As figuras 14 e 15, que apresentam dados corretos na tabela de um dos participantes (apesar de 80% ter apresentado dados corretos) e a outra do participante 10, com alguns dados incorretos.

Figura 14 - tabela preenchida pelo participante 04

Aplicação do F1
1s² 2s² 2p³

Complete a tabela abaixo:

Orbital	Energia		
	Nitrogênio	Oxigênio	Neônio
1s	-392,446	-529,991	-841,759
2s	-21,926	-27,478	-39,056
2p _x	-9,565	-12,289	-14,978
2p _y	-9,565	-12,289	-14,978
2p _z	-9,565	-10,231	-14,978

1 a.u (atomic unit) = 27,2114 eV

Fonte: Própria

Figura 15 - tabela preenchida pelo participante 10

Aplicação do F1

Complete a tabela abaixo:

Orbital	Energia		
	Nitrogênio	Oxigênio	Neônio
1s	- 34,2446	- 523,991	- 841,759
2s	- 21,926	- 27,478	- 39,056
2p _x	- 9,565	- 12,289	- 14,978
2p _y	- 9,565	- 12,289	- 14,978
2p _z	- 9,565	- 12,289	- 14,978

1 a.u (atomic unit) = 27,2114 eV

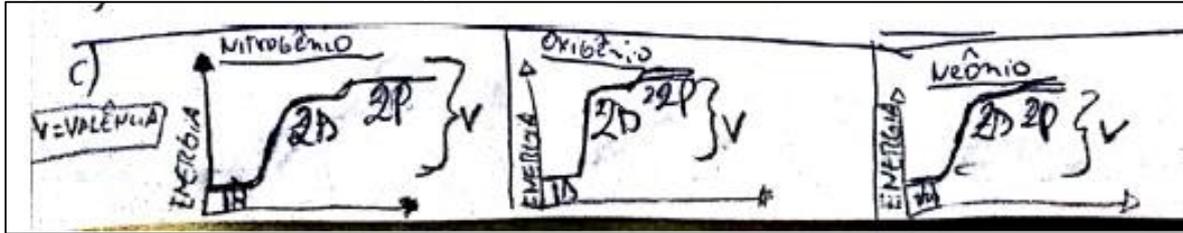
Fonte: Própria

É possível perceber que o participante 04 escreveu todas as energias dos orbitais corretamente, enquanto o participante 10 adicionou um dado incorreto no oxigênio para o orbital 2p_z.

Ainda no mesmo participante, a definição da primeira pergunta do segundo tópico estava correta, com pouco detalhe e explicação, porém, não havia erro. Entretanto, o estudante relacionou o fenômeno às sobreposições de orbitais, o que não ocorrem já que estava sendo analisado átomos e não moléculas. Se torna aceitável esse erro, pelo fato de estarmos anteriormente analisando as ligações do gás nitrogênio e oxigênio, que são formados por 2 dos 3 átomos investigados neste problema. No entanto, a questão não foi pontuada quanto a explicação, apenas a definição.

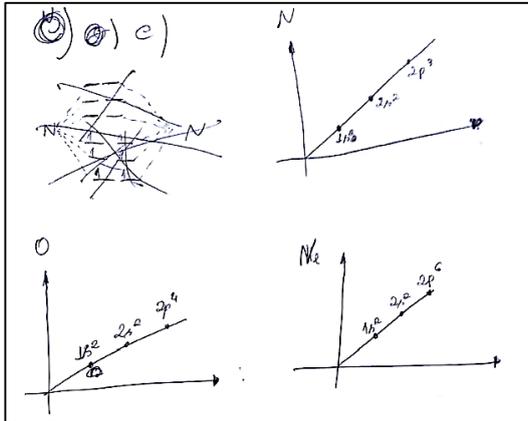
Alguns dos alunos cometeram erros durante a resolução de alguns problemas, porém, o que chamou a atenção foi a construção do gráfico para os diferentes níveis de energia entre os orbitais dos átomos de Nitrogênio, Oxigênio e Neônio. Foram construídos os perfis de energia de diversas formas e apenas um dos participantes conseguiram relacionar os dados preenchidos da tabela com todos os gráficos produzidos. Isso nos leva a identificar um problema presente até nos alunos com melhores rendimentos, selecionados entre os 33 estudantes presentes na seleção. Nas figuras 16 a 20 é possível visualizar os gráficos produzidos pelos 5 participantes.

Figura 16 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 04



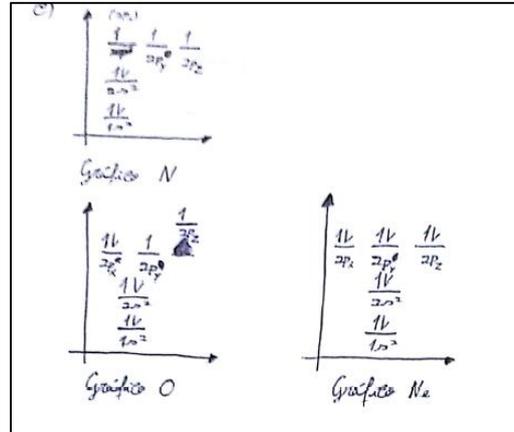
Fonte: Própria

Figura 17 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 10



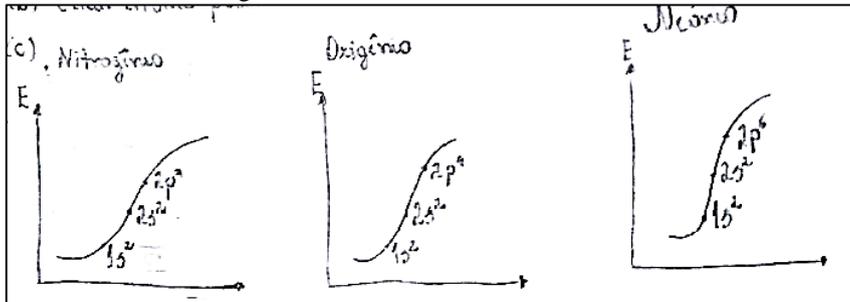
Fonte: Própria

Figura 18 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 22



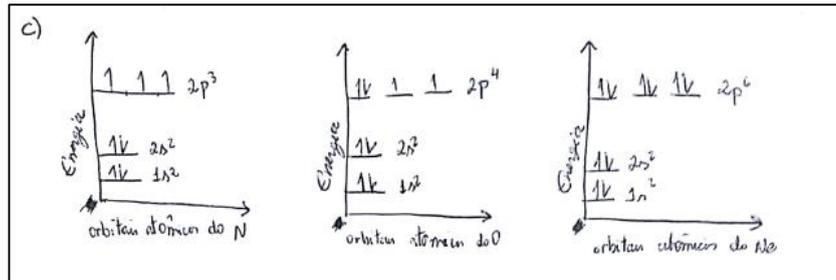
Fonte: Própria

Figura 19 - Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 21



Fonte: Própria

Figura 20- Gráficos dos níveis de energia dos orbitais atômicos do N, O e Ne. Estudante 32.



Fonte: Própria

Ao fazer a leitura desses gráficos, é percebido que os estudantes 04, 21 e 22 identificam um aumento constante dos níveis de energia de todos os orbitais, o que não se aplica aos estudantes 22 e 32. Entretanto, o 32 identifica uma constante na de todos os orbitais “p” para todos os átomos. O único que obteve sucesso na construção de todos os gráficos foi o participante 22.

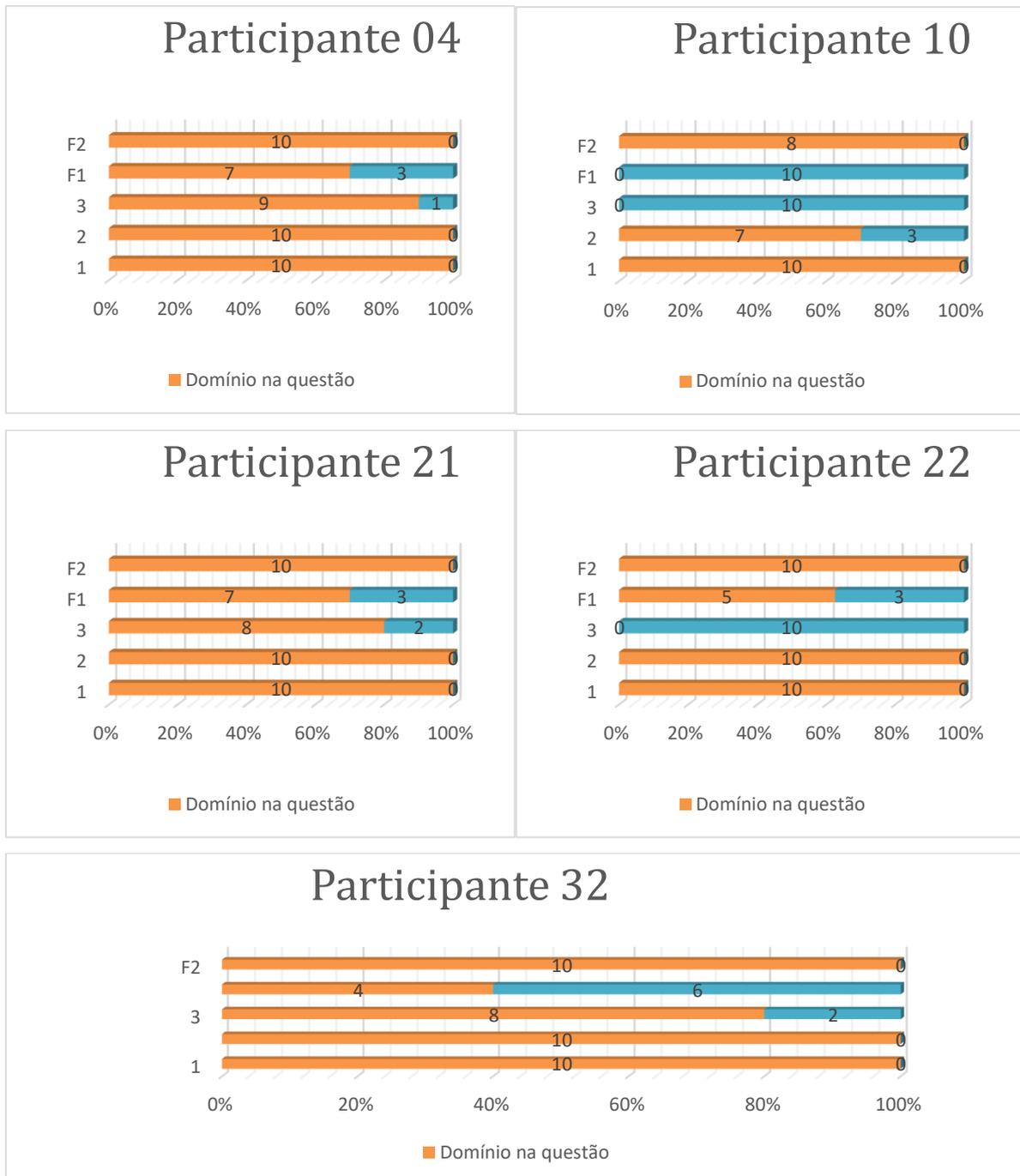
O que foi percebido nitidamente é que 80% dos Participante que participaram da pesquisa têm alguma dificuldade na construção de gráficos, levando em conta que os dados da tabela, utilizados para a construção do gráfico, não condiz com o desenho realizado por 4/5 dos licenciados.

5.3.2 Segunda atividade

Devido algum problema na leitura dos arquivos, o programa Avogadro não conseguiu ler o *output* (arquivo com dados das moléculas, criado para investigar informações a respeito delas) impossibilitando os estudantes de fazerem a leitura das energias dos orbitais, na terceira questão do segundo tópico.

Abaixo é possível visualizar o gráfico de rendimento alcançado por cada estudante nessa segunda atividade. Essa foi elaborada com 3 questões iniciais de 1 a 3 e mais algumas inseridas nos dois tópicos, como da primeira atividade, na qual cada questão e tópico possuem variação de 0 à 10, de acordo com o desempenho alcançado. Os dados obtidos estão mostrados no gráfico 5.

Gráfico 5 – Resultado da análise da segunda atividade.



Fonte: Própria

De acordo com a primeira análise, foi possível observar, individualmente, alguns detalhes, que, no geral, estão relacionados aos erros cometidos.

O estudante 04 obteve um resultado ótimo em todas as questões, apresentando domínio geral, entretanto, algumas informações chamaram a atenção. Na terceira questão, a justificativa não é a correta, mas há lógica no raciocínio dele quanto à deformação da nuvem

eletrônica, devido a diferença de eletronegatividade entre o H – F e o Li – F. No tópico F1, a primeira alternativa desse tópico está correta, porém, incompleta. A questão pede para especificar quais os orbitais fazem parte da ligação, e o estudante disse que eram os mais afastados, porém era para especificar, nesse caso, qual o mais afastado. Já na alternativa “b” deste mesmo tópico, o participante apenas realizou a distribuição eletrônica, sem identificar quantos orbitais existiam em cada átomo. Por mais que seja nítido que o mesmo saiba a resposta e imaginou que seria considerado pelo fato de a distribuição dar a resposta necessária, devido as demais questões corretas que o discente respondeu relacionadas à mesma proposta dessa questão, a resposta ainda se encontra incompleta.

O Participante 10 foi o que apresentou o menor rendimento entre os cinco, zerando uma questão e um tópico completo. Na terceira questão, percebe-se que esse discente, entre os outros, apresenta uma maior dificuldade no conteúdo. Nessa atividade em específico o mesmo define que Li – F realiza uma ligação iônica e não apresenta justificativa. O mesmo também não consegue explicar o comportamento eletrônico de nenhuma das três moléculas. O que chama a atenção é o fato deste ter explicado, durante a intervenção, a diferença de densidade eletrônica entre o H – Cl (molécula abordada no questionário Q1) baseado na diferença de eletronegatividade e formação de dipolo. É possível que os termos da questão não tenham sido claros no momento da leitura. De toda forma, a questão não foi pontuada. No tópico F1, ambas as questões não foram respondidas. No tópico F2, este obteve rendimento 8, mas um detalhe que chamou a atenção, justifica as demais notas, principalmente os zeros. O participante, nessa última atividade demonstrou ter caído, em termos de nota, quando comparada à atividade anterior e, como foi o caso da segunda alternativa desse tópico, o mesmo respondeu corretamente, porém, só justificou para uma ligação, na qual estava certa. O que têm sido percebidos não foi a falta de aprendizado ou que o uso da ferramenta não foi útil no processo de construção do conhecimento deste Participante, mas sim o desinteresse em realizar a atividade, visto que as poucas respostas curtas, estavam corretas ou com erros relacionado à falta de interpretação dos enunciados. Uma questão que pode explicar esse fato é o desinteresse na utilização das novas tecnologias para explicar fenômenos atuais. Mesmo na universidade, é sabido que o interesse nas novas tecnologias nem sempre acontece por parte dos alunos ou dos professores. Krüger e colaboradora, apontam que existem diversas formas de repassar o conhecimento, e a mais utilizada, inclusive na universidade, é a metodologia tradicional de ensino, na qual, inclusive, alguns alunos apontam ser a mais eficaz no processo de aprendizagem. (KRÜGER; ENSSLIN, 2012)

O participante 21 obteve um ótimo rendimento geral e apenas um ponto chamou a

atenção. No tópico F1, da mesma forma que o Participante 04, na primeira alternativa do primeiro tópico, este justifica apenas que os orbitais participantes na ligação são os mais externos ao núcleo. No segundo tópico, o estudante explicou com clareza que a quantidade de orbitais moleculares é proporcional à quantidade de orbitais atômicos, porém, esse considerou que cada distribuição eletrônica descreve apenas um orbital (o que de fato ocorre para os orbitais S, nas duas primeiras distribuições - preenchimento dos dois primeiros orbitais - mas não nas distribuições dos orbitais P), considerando, por exemplo, que o H – F apresenta 4 OM. Dessa forma, pela justificativa, o participante pontua parcialmente a questão.

O participante 22 segue no mesmo ritmo que o 04 e o 21, e apesar de zerar a terceira questão, por afirmar não conseguir responder, apenas o tópico F1 chamou a atenção. Único participante a responder corretamente a primeira questão desse tópico, descrevendo quais os orbitais estão presentes nas ligações das moléculas citadas. Contudo, afirmou que cada molécula apresentaria apenas um orbital molecular. Uma possível justificativa à essa resposta é que o estudante entende que a sobreposição dos orbitais atômicos forma um único orbital molecular, devido à visualização da densidade eletrônica de uma molécula.

O participante 32 também obteve um ótimo rendimento geral e como era de se esperar, o tópico F1 chamou mais uma vez a atenção. O estudante entende que todos os orbitais atômicos podem ser utilizados nas ligações, porém, não ocorre em todos os casos. Para o hidrogênio, seu único orbital é utilizado para realizar a ligação, ou outros dois citados apresentam, além dos orbitais ligantes, orbitais não ligantes.

Nessa atividade, em particular, foi percebido que todos os alunos apresentaram dificuldades variáveis no tópico F1, no qual era necessário descrever quais os orbitais fazem parte da ligação e quantos orbitais moleculares são formados. Sabendo que durante a realização da oficina foram realizadas algumas explicações acerca da produção e interpretação de diagramas de energia, é percebida a dificuldade dos estudantes em fazê-lo.

Por mais que não fosse necessário realizar a produção do diagrama, quando o discente sabe montar e interpretar o gráfico, este entende que em algumas moléculas, como algumas citadas nos enunciados, apresentam orbitais não ligantes. E que, de modo geral, sem utilização de cálculos matemáticos complexos para explicar o contrário, a quantidade de orbitais atômicos é proporcional à quantidade de orbitais moleculares formados na ligação, mesmo que alguns deles sejam não ligantes ou antiligantes.

Antes da aplicação das atividades, foram abordados todos os conceitos e informações necessárias para a realização das questões. Com isso, o objetivo dessas aplicações não é identificar se o aluno compreende ou não compreende de ligações químicas, mas entender

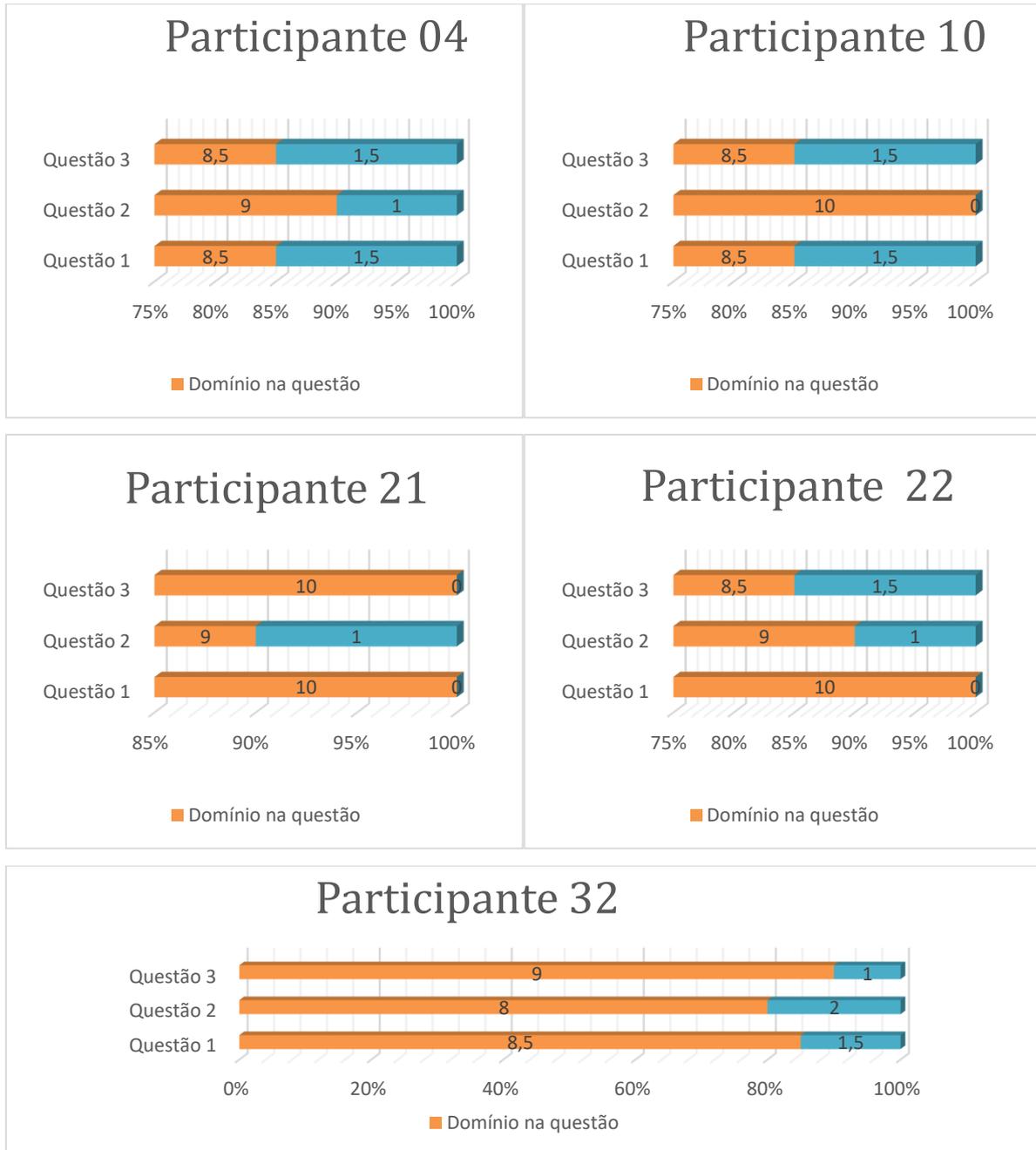
quais as dificuldades e o que estes entendem acerca do assunto.

Alguns problemas foram citados e, a partir dessa investigação, é possível promover novas intervenções com a mesma metodologia. Pois, por mais que tenham sido apresentados rendimentos com menos de 100% de satisfação, é percebido que todos os participantes avançaram bastante se comparado ao nível ao qual estavam antes da realização da oficina.

5.4 ANÁLISE E DISCUSSÃO DO QUESTIONÁRIO Q2

O questionário Q2 contou com 4 perguntas, sendo 3 delas sobre o conteúdo de ligações químicas e 1 a respeito da opinião dos alunos sobre a utilização do programa Avogadro como ferramenta metodológica no ensino de química. Os dados obtidos nas 3 primeiras questões foram avaliados de acordo com o nível da resposta, levando em conta o que foi abordado na oficina de intervenção. Logo após os gráficos das análises das questões (gráfico 6), será discutido sobre a opinião de cada participante sobre o uso da ferramenta.

Gráfico 6 – Resultado da análise do questionário Q2



Fonte: Própria

É percebido que ao visualizar os gráficos, todos os participantes tiveram rendimento igual ou superior a 8,5, quando analisada a média das questões por questionário, sendo, mais uma vez, percebido um grande avanço entre todos os envolvidos.

Síntese das respostas da 4ª questão apresentadas pelos 5 participantes:

- Participante 04 - Indica o uso do programa por representar de maneira mais clara e lúdica as interações que ocorrem durante uma ligação.
- Participante 10 - Indica e relata que utilizará. Comenta a utilidade para outros conteúdos além das ligações químicas e elogia a forma de representar o que os alunos entendem como abstrato, para o macroscópico, de maneira tridimensional.
- Participante 21 - Paralelo a justificativa do participante 10, este afirma que a ferramenta se mostrou útil para diminuir o nível de abstrações de fenômenos físico-químicos. Como também uma ferramenta que busca levar ao aluno representações o mais próximo possível da realidade.
- Participante 22 – Indica e comenta que a ferramenta pode ser útil na explicação de vários modelos representativos
- Participante 32 – Indica e afirma que a ferramenta possibilita, ao professor, deixar um pouco de lado o método tradicional de ensino e levar para a sala uma ferramenta que torna a aula mais interessante.

5.5 ANÁLISE E DISCUSSÃO GERAL

Visto que todos os participantes acertaram todas as questões, com nível de explicações diferentes, obtiveram excelentes rendimentos se comparado ao questionário Q1. Os níveis de ambos os questionários foram os mesmos e, por isso, torna possível apresentar mais a frente, uma análise comparativa entre os dois resultados (Q1 vs Q2). Essa análise não contará apenas com os dados obtidos antes da intervenção e após, também serão utilizados dados dos processos, que foram coletados através do formulário do Google, no qual apresenta as mesmas questões do questionário Q1 + duas novas questões, ao mesmo nível das demais questões, dividida em duas etapas (formulário F1 e formulário F2), e as atividades realizadas durante o uso do Avogadro.

A partir de todos esses resultados obtidos através dos formulários, atividades e dos questionários, foi montado um gráfico, comparando o desenvolvimento obtido por cada participante.

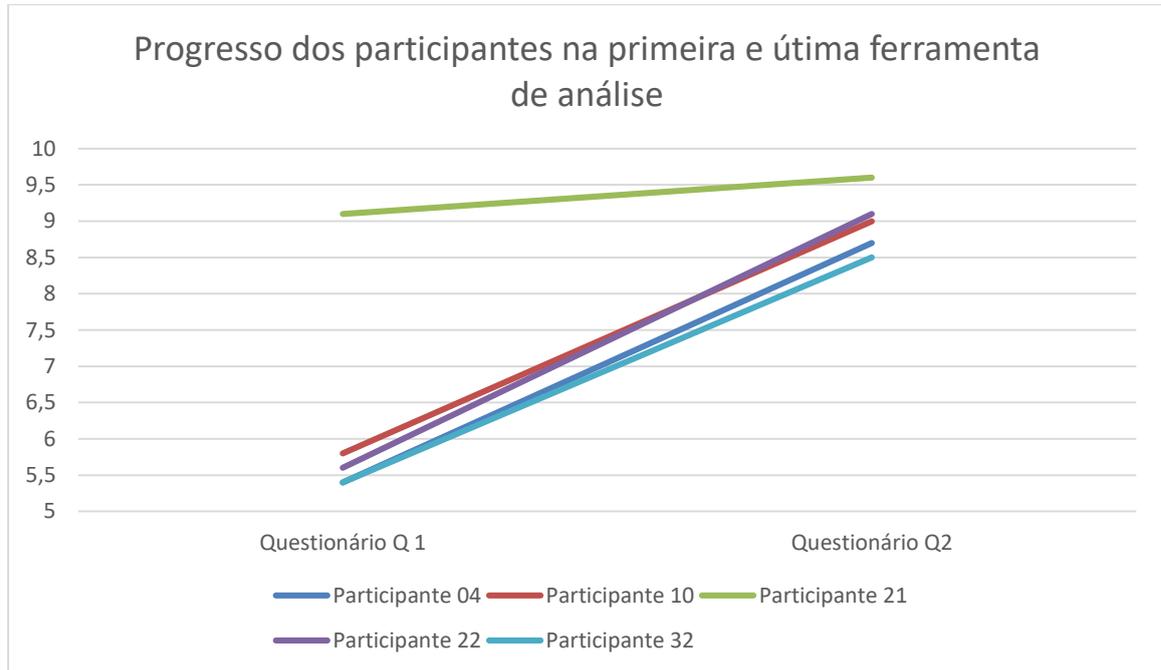
- Inicialmente, foi observado o rendimento de cada aluno no questionário Q1 e Q2 e

lançados em um gráfico, no qual foi possível obter dois pontos. Desses dois pontos foi traçado uma reta que demonstrara o avanço que o participante teve de antes de iniciar a oficina e após concluir a oficina. Todos os dados lançados nos gráficos estão presentes no decorrer dos resultados.

- Após identificar a reta, foram lançados os resultados obtidos através dos formulários F1 e F2, visto que, todas as perguntas do questionário Q1 estão distribuídas em ambos os formulários. Juntando todas as questões do formulário F1 e F2 que estavam no questionário Q1, é possível obter esse mesmo questionário com outras respostas. A ideia foi perceber se os participantes reescreveriam as mesmas respostas de antes ou dariam novas respostas a partir do que foi construído durante as sequências didáticas. Sendo assim, as perguntas dos formulários resultam em apenas um ponto lançado no gráfico (visto que foi reunida todas as questões para obter apenas um rendimento comparativo ao questionário Q1).
- Da mesma forma que os formulários, o rendimento de cada atividade foi permutado e criado apenas um novo rendimento, resultando em apenas um ponto a ser lançado ao gráfico.
- Sendo assim, o gráfico apresentará 4 pontos. O primeiro e o último referente aos questionários Q1 e Q2, respectivamente, e o segundo e terceiro ponto, destinado aos formulários e atividades, respectivamente.

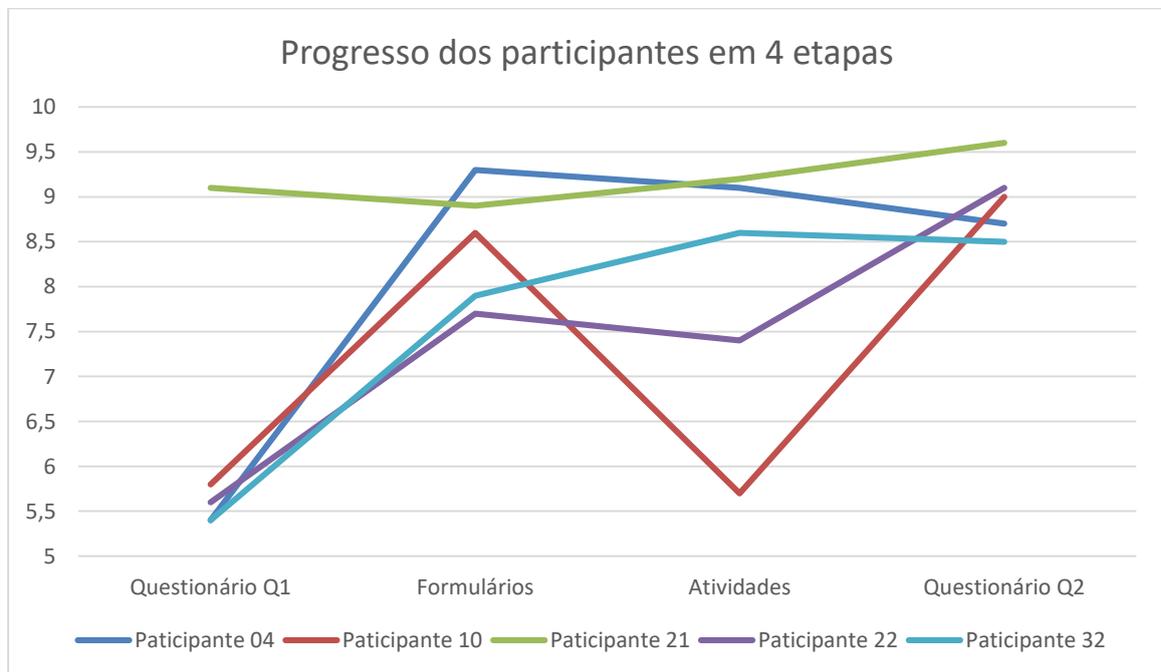
Com isso, para que a análise seja pelo instrumento de análise e não pelas questões, foi necessário obter a média das questões dos questionários, formulários e atividades, resultando no gráfico 8. No gráfico 7 é possível visualizar o avanço dos participantes apenas analisando o primeiro e último questionário, o que é uma demonstração mais qualitativa dos resultados, se comparado ao gráfico 8.

Gráfico 7 - Comparação dos resultados das análises dos questionários Q1 e Q2.



Fonte: Própria

Gráfico 8 - Comparação dos resultados das análises dos questionário, formulários e atividades.



Fonte: Própria

Ao analisar os dois gráficos, é percebido que o primeiro apresenta um crescimento considerável entre um questionário e outro, levando o pesquisador a acreditar que a cada etapa

os participantes evoluíram, até um ótimo rendimento ao fim da conduta. De fato, é perceptível o desenvolvimento dos estudantes ao longo do progresso, mas quando é analisado o segundo gráfico, no qual representa, além do ponto de partida e chegada, todo o processo, que do primeiro questionário ao primeiro formulário, os participantes tiveram uma ótima evolução, e após esse ponto, mais da metade teve uma queda no rendimento.

Existem duas explicações para essa queda, a primeira é que, se forem ignorados os dados dos formulários, percebe-se que, a relação do questionário às atividades, apresenta um crescimento do rendimento. Isso porque os formulários foram um *feedback* das questões do questionário. Então, possivelmente, os mesmos haviam discutido ou revisado os termos presentes do questionário, após a realização, e no momento de responder ao formulário, apresentavam melhores argumentações. A segunda hipótese é que alguma situação pessoal possa ter interferido no processo, visto que o único participante que apresentou um alto decaimento entre duas análises (participante 10, apresentou um decaimento de 33,7% entre a análise dos formulários às atividades) demonstrou não estar tão focado, pois o mesmo deixou em branco, na atividade 2, o tópico “Aplicação do F1” e incompleto o tópico “Aplicação do F2” (especificamente o quesito b). Além desse problema com a questão, o mesmo adicionou algumas informações interessantes de serem discutidas no formulário F2, que podem ser vistas nas figuras 21 e 22, no qual foi realizado um comparativo entre dois estudantes, em que ambos responderam corretamente, porém, em perspectivas diferentes.

Figura 21 - Resposta referente ao participante 10

Descreva a formula estrutural da molécula de O₂(g)

uma bolinha, duas ligações, outra bolinha.

Fonte: Própria.

Figura 22 - Resposta referente ao participante 22

Descreva a formula estrutural da molécula de O₂(g)

A molécula O₂(g) possui ligação de carácter covalente e uma ligação dupla, uma sendo do tipo sigma causada por sobreposição dos orbitais s de cada átomo e outra do tipo π causada pela sobreposição dos orbitais p de cada átomo.

Fonte: Própria.

É percebido que, em ambos os casos, se fossem realizadas a representação da molécula do gás oxigênio, ao invés de explicar, as respostas seriam praticamente iguais. Mas temos aí um ótimo exemplo da diferença entre aprender e decorar uma informação e esse problema precisa ser corrigido antes que sejam formados profissionais com níveis semelhantes de argumentação apresentados na figura 21.

Ainda relacionado ao participante 10, outra questão que apresentou o mesmo problema foi a que pedia para o estudante citar a teoria atual que descreve as ligações químicas, e na figura 23 pode, mais uma vez, entender o perigo de formar professores não capacitados.

Figura 23 – Fragmento do formulário F2 do participante 10

<p>Atualmente qual teoria de consenso científico para se descrever ligações químicas?</p> <p>tem a teoria quântica, que para mim ainda é uma viagem, não sei se é porque não estudei mais sobre a química quântica e acredito que a Teoria do Orbital Molecular.</p>
--

Fonte: Própria

É claramente percebido que o participante sabe qual a teoria atual que representa as ligações químicas, porém, não a entende, visto que nas disciplinas de Química Geral II e Química Inorgânica II, são apresentados aos estudantes, todo o conteúdo necessário para que entenda o que se pede no quesito, não sendo abordada essa questão apenas na disciplina de Introdução à Química Quântica.

Ao contrário do participante 10, o participante 04 apresentou um ótimo desempenho durante a intervenção. Nas figuras 24 e 25 é possível ver o avanço que o mesmo apresentou durante o *feedback* de uma das questões presentes no questionário Q1

Figura 24 – Fragmento do questionário Q1 do participante 04

<p>3. Represente a fórmula estrutural da molécula de $O_2(g)$.</p> <p style="text-align: center;"></p> <p>a. Se pudéssemos utilizar um microscópio que alcançasse o nível atômico, o que veríamos entre os átomos de oxigênio?</p> <p style="text-align: center;">Duas ligações químicas</p>
--

Fonte: Própria

Figura 25 - Fragmento do formulário F2 do participante 04.

Descreva a formula estrutural da molécula de O₂(g)

O=O

.....

Relacionando à questão anterior, o que veríamos entre os átomos de oxigênio se pudessemos utilizar um microscópio que alcançasse o nível atômico?

Veríamos uma grande nuvem de elétrons entre esses átomos.

.....

Fonte; Própria

O resultado dessa mudança só foi possível graças ao uso da ferramenta Avogadro, no qual os participantes tiveram acesso à visualização de todas as principais representações gráficas mais próxima do que de fato são os átomos ou as moléculas, tendo como base os conhecimentos científicos atuais. E mais uma vez o uso das tecnologias de informação e comunicação mostraram ter seu papel na construção do conhecimento. Romaní (2013) aponta em um dos seus trabalhos, como foi comprovado com o uso do Avogadro, “que o uso intensivo das TIC’s em geral pode resultar na aprendizagem de competências e habilidades não consideradas nos cenários educacionais tradicionais” (ROMANÍ, 2013, p. 861)

6 CONCLUSÕES

De acordo com os resultados obtidos no questionário investigativo, percebemos alguns obstáculos que ainda surgem com alunos já na graduação, problemas de aprendizagem e muitas vezes a solidez de noções claramente macroscópicas ao mundo atômico. Mesmo com um nível mais elevado de conhecimento, alguns ainda têm dificuldade de diferenciar um átomo no estado elementar de molécula, ou ainda interpretar a formação de uma ligação química através da TOM.

Os erros encontrados por Fernandes e Marcondes (2006) também foram verificados nesta pesquisa, como a dificuldade dos alunos em distinguir entre uma ligação covalente da iônica, não compreendendo qual o tipo de maior predominância em cada composto formado. Um dos participantes, por exemplo, apenas apresentou a justificativa de ligação iônica quando foi pedido para diferenciar o comportamento das moléculas HF e LiF, mostrando que, mesmo para alunos, avançados nos períodos do curso de Química, conceitos fundamentais de ligações químicas ainda são memorizados.

Um ponto curioso que foi constatado, não foi a falta de aprendizado ou que o uso da ferramenta não foi útil no processo de construção do conhecimento deste participante, mas sim o desinteresse em realizar a atividade, visto que as poucas respostas curtas, estavam corretas ou com erros relacionado à falta de interpretação dos enunciados. Mesmo na universidade, é sabido que o interesse nas novas tecnologias nem sempre acontece por parte dos alunos ou dos professores, onde inclusive, alguns alunos apontam ser a mais eficaz no processo de aprendizagem. (KRÜGER; ENSSLIN, 2012)

A análise dos dados através dos questionários Q1 e Q2 e dos formulários F1 e F2, permitiu uma visão mais completa de como foi a evolução dos participantes. Através do gráfico 7 nota-se um crescimento considerável entre um questionário e outro, levando o pesquisador a acreditar que a cada etapa os participantes evoluíram, até um ótimo rendimento ao fim da atividade, como pode ser observado nas figuras 25 e 26.

O *software* Avogadro, utilizado como ferramenta nesse trabalho, permitiu que os estudantes tivessem acesso à visualização de todas as principais representações gráficas dos modelos mais atuais para descrever os átomos ou as moléculas. Atribuímos a essa “interação” do estudante com a molécula, através da manipulação gráfica e leitura de dados energéticos, boa parte na evolução dos participantes.

Percebemos que mudanças futuras na forma de compreender Ligações Químicas tanto no Ensino Médio quanto no Ensino Superior são extremamente necessárias. Deduzimos, pelos alunos que participaram da oficina, que o ensino de Ligações não tem sido abordado com efetividade no curso de Química do CAA. Isso é extremamente preocupante, pois a má formação do licenciando culminará na perpetuação da transmissão de conceitos errados de Ligações Químicas no ensino médio e o ciclo nunca terá fim. De forma alguma sugerimos a abordagem completa da TOM no

ensino médio, apenas apontamos a necessidade de mudança curricular no curso superior com o intuito de maior abordagem do assunto.

Desta forma, após as atividades e análises discutidas no trabalho, conclui-se que utilizando práticas relativamente simples e com um roteiro experimental sugerindo passo-a-passo os procedimentos a serem realizados pelos estudantes da oficina, foi possível abordar alguns conceitos utilizados na química computacional, por exemplo em Ligações Químicas. O uso intensivo das TIC's em geral pode resultar na aprendizagem de competências e habilidades não consideradas nos cenários educacionais tradicionais” (ROMANÍ, 2013, p. 861)

Porém, desenvolver e organizar um roteiro experimental de química computacional, apesar de parecer uma tarefa simples e fácil, é árdua e trabalhosa, pois necessita de vários testes de cálculos e metodologias que inicialmente foram sugeridas para diferentes plataformas, *softwares*, métodos de cálculos e funções de base, que nem sempre são adaptáveis aos métodos desejados.

REFERÊNCIAS

- AUTSCHBACH, J. Orbitals: Some fiction and some facts. **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 8, p. 1032–1040, 2012.
- AVERY, P. et al. Extended Hückel Calculations on Solids Using the Avogadro Molecular Editor and Visualizer. **Journal of Chemical Education**, v. 95, n. 2, p. 331–337, 2018.
- CAMILETTI, G.; FERRACIOLI, L. A Utilização da Modelagem Computacional Semiquantitativa no Estudo do Sistema Mola-Massa. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 24, n. 2, p. 110–123, 2002.
- CRISTINA, F.; CATUNDA, G. Levantamento e análise das Simulações do PhET para o ensino e aprendizagem de Química Survey and analysis of the PhET simulations for teaching and learning Chemistry. p. 1–8, 2015.
- ESTEBAN LOPEZ, M.; STEPHANY PETRONILHO, H. Recursos Instrucionais Inovadores para o Ensino de Química. **Química Nova na Escola**, v. 39, p. 12–18, 2017.
- MACHADO, A. S. Uso de Softwares Educacionais, Objetos de Aprendizagem e Simulações no Ensino de Química. **Química e Sociedade**, v. 38, p. 104–111, 2016.
- MARTINIE, R. J. et al. **Bond order and chemical properties of BF, CO, and N₂**. *Journal of Chemical Education*, v. 88, n. 8, p. 1094–1097, 2011.
- MICHEL, R.; SANTOS, F. M. T. DOS; GRECA, I. M. R. **Uma Busca na Internet por Ferramentas Para a Educação Química no Ensino Médio**. *Química Nova na Escola*, v. 19, 2004.
- MORAES, R. Uma tempestade de luz: a compreensão possibilitada pela análise textual discursiva. **Ciência & Educação (Bauru)**, v. 9, p. 191–211, 2003.
- PACHECO, JOSÉ, A. D.; BARROS, J. V. O Uso de Softwares Educativos no Ensino de Matemática José. **DIÁLOGOS – Revista de Estudos Culturais e da Contemporaneidade**, v. 8, p. 5–13, 2013.
- RIBEIRO, A. A. et al. Revisão. v. 26, n. 4, p. 542–549, 2003.
- SANTOS, W. L.; MALDANER, O. A. Ensino de química em Foco. In: UNIJUÍ, E. U. (Ed.). . [s.l: s.n.]. p. 368.
- SCERRI, E. R. Have Orbitals Really Been Observed? **Journal of Chemical Education**, v. 79, n. 3, p. 310, 2002.
- SILVEIRA, D. T.; CÓRDOVA, F. P. **A pesquisa científica**. [s.l: s.n.].
- TOMA, H. E. *Ligação Química*: 1997.
- VIEIRA, S. L. Estudos em Educação e Tecnologias da Informação e da Comunicação (TICs). p. 21–23, 2004.
- Y. KYLE, S. BACON, ET AL, . Teaching chemistry effectively with engineering majors: Teaching Beyond the textbook. in **Proc. 21st ICCE on Chemical Education and Sustainability in the Global Age**, Springer, 2011.

KRÜGER, L. M; ENSSLIN, S. R. **Método Tradicional e Método Construtivista de Ensino no Processo de Aprendizagem : uma investigação com os acadêmicos da disciplina Contabilidade III do curso de Ciências Contábeis da Universidade Federal de Santa Catarina**, 2012.

ROMANÍ, C. C. **TENDÊNCIAS PARA A EDUCAÇÃO NO 21ST CENTURY EDUCATION**, 2013.

The Nobel Prize in Chemistry 2013. NobelPrize.org. Nobel Media AB 2018. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2013/summary/>> Acesso em 03 dez. 2018.

The Nobel Prize in Chemistry 1995. NobelPrize.org. Nobel Media AB 2018. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1995/summary/>> Acesso em 03 dez. 2018.

The Nobel Prize in Chemistry 1998. NobelPrize.org. Nobel Media AB 2018. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/summary/>> Acesso em 03 dez. 2018.

ZONCA, A. **Thoughts on a Career as a Computational Scientist**, 2014

ACS Department of Member Research and Technology. **ChemCensus 2010**. Disponível em: <<https://www.acs.org/content/dam/acsorg/careers/salaries/chemcensus/chemcensus2010-report.pdf>> Acesso em 03 dez. 2018

On being a computational chemist in industry. **The Curious Wavefunction**. 2011. Disponível em: <c> Acesso em 03 dez. 2018.

HANWELL, M. D.; CURTIS, D. E.; LONIE, D. C.; VANDERMEERSCH, T.; ZUREK, E.; HUTCHISON, G. R. **Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform**. J. Cheminform. 2012.

RAL, M. A.; FERNANDO, M.; CLAUDIO O. A.; SEBASTIN M. R.; PATRICIO F. A **Computationally Efficient and Reliable Bond Order Measure**. 2011

APÊNDICE A – ROTEIRO DA OFICINA

Roteiro da oficina

Tema: LIGAÇÕES QUÍMICAS: EXPLICANDO FENÔMENOS E CONCEITOS ATRAVÉS DO PROGRAMA AVOGADRO.

Obs. Como parte da intervenção será a distância, utilizaremos o método de ensino híbrido, que tem como um dos princípios a utilização de recursos tecnológicos para manter a comunicação entre os envolvidos. Para isso será criado um grupo do aplicativo WhatsApp. Além de manter a comunicação, o mesmo aplicativo será atualizado para compartilhar os arquivos pertinentes à pesquisa (com exceção do software Avogadro).

1º ENCONTRO (Laboratório GQCA)

- Aula sobre os principais conceitos relacionados às ligações químicas.
- Apresentar as principais ferramentas úteis do Avogadro para o auxílio do ensino de ligações químicas.
- Realização do formulário F1, através da plataforma do Google.

2º ENCONTRO (Laboratório Andorinha)

- Utilização do Avogadro pelos estudantes, analisando átomos, moléculas e complexos no software, no intuito de, sobre a orientação do estudante pesquisador, descrever as estruturas em termos de orbitais e ligações.
- Realização do formulário F1, através da plataforma do Google.

4º DIA (Casa; 03h/ Laboratório Andorinha do CAA; 05h)

- Utilização do Avogadro pelos estudantes, analisando átomos e moléculas, a partir de um roteiro, com o uso de um arquivo com dados de moléculas que serão abertas no programa Avogadro, a fim de serem investigadas.
- Realização de duas atividades do decorrer do processo de utilização do programa.
- Realização do questionário Q2 ao fim da oficina.