



Pró-Reitoria
de Pesquisa e Pós-Graduação



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PROGRAMA DE MESTRADO PROFISSIONAL EM QUÍMICA
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR, UMA PROPOSTA DE
APLICAÇÃO NO ENSINO MÉDIO DE QUÍMICA

MARCO AURÉLIO DE SOBRAL SILVA

RECIFE

2020

MARCO AURÉLIO DE SOBRAL SILVA

**TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR, UMA PROPOSTA DE
APLICAÇÃO NO ENSINO MÉDIO DE QUÍMICA**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação PROFQUI da Universidade Federal Rural de Pernambuco-UFRPE, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Química. Área de Quântica: Ensino de Química. Linha de Pesquisa: Teoria do orbital molecular, uma proposta de aplicação no Ensino Médio de Química.

Orientador: Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares Neto

**Recife
2020**

Primeiramente, dedico este trabalho a Deus por ter me iluminado e me dado forças para chegar até aqui. Sem o Senhor nada seria possível! Ao professor Luciano de Azevedo pela orientação, compromisso e companheirismo que levaram à concretização de mais esta etapa da minha formação. Ao meu querido pai Agostinho Batista e a minha querida mãe Janete Jordão que sempre foram os mais dedicados guerreiros que conheci, ensinando-me tudo sobre a vida com seus gestos e palavras. Obrigado por tudo! À minha esposa Rita de Cássia pelo companheirismo, incentivo e compreensão nos momentos em que precisei abrir mão de algumas coisas em prol do trabalho e dos estudos. Obrigado por estar ao meu lado. Ao meu irmão Augusto César pelos momentos de descontração e pela amizade incomparável. As minhas irmãs Débora e Mônica. Muito obrigado a minha Tia Jandira, Josélia e Jozelma a meu Tio Paulo, Luiz Carlos, amo todos vocês. Aos demais colegas da primeira turma do PROFQUI 2017 e aos professores do programa pela convivência harmoniosa e as discussões enriquecedoras. À Universidade Federal Rural de Pernambuco pela oportunidade de ter acesso a um ensino de qualidade e gratuito.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal Rural de Pernambuco
Sistema Integrado de Bibliotecas
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- 677t Aurélio, Marco Aurélio de Sobral Silva
TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR, UMA PROPOSTA DE APLICAÇÃO NO ENSINO MÉDIO DE QUÍMICA: TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR, UMA PROPOSTA DE APLICAÇÃO NO ENSINO MÉDIO DE QUÍMICA / Marco Aurélio de Sobral Silva Aurélio. - 2020.
94 f. : il.
- Orientador: Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares Neto.
Inclui referências, apêndice(s) e anexo(s).
- Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Mestrado Profissional em Química (PROFQUI), Recife, 2020.
1. APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA. 2. O PROFESSOR NA APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA. 3. TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA. 4. TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR. 5. ANÁLISE POPULACIONAL. I. Neto, Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares, orient. II. Título

O que sabemos é uma gota; o que ignoramos é um oceano.

(Isaac Newton)

RESUMO

A Teoria Quântica é reconhecida como a teoria de maior êxito em toda a ciência humana, no entanto, muitas condições, resultante de sua aplicação ainda é pouco explorada nas salas de aula de Química do Ensino Médio. É baseado nessa premissa que estabelecemos como objetivo principal desse trabalho a elaboração de ferramenta de informática para o uso pelo professor de Química do Ensino Médio na abordagem em sala de aula de uma forma extremamente básica: A Teoria do Orbital Molecular. Portanto, fundamentado na Teoria da Aprendizagem Significativa, apresentamos nesse trabalho uma ferramenta informatizada que utiliza a Teoria do Orbital molecular e algumas aplicações como suporte para o professor de Química do Ensino Médio.

Palavras-Chave: Teoria do Orbital Molecular; Aprendizagem Significativa, Ensino Médio.

ABSTRACT

The Quantum Theory is recognized as the most successful theory in all human science, however, many conditions, resulting from its application is still little explored in high school chemistry classrooms. It is based on this premise that we established as the main objective of this work the development of a computer tool for use by the High School Chemistry teacher to approach the classroom in an extremely basic way: The Theory of the Molecular Orbital. Therefore, based on the Theory of Meaningful Learning, we present in this work a computerized tool that uses the Theory of Molecular Orbital and some applications as a support for the High School Chemistry teacher.

Keywords: Molecular Orbital Theory; Meaningful Learning; High School.

SUMÁRIO

1.0 INTRODUÇÃO.....	10
2.0 OBJETIVO.....	12
2.1 OBJETIVO GERAL	12
2.2 OBJETIVO ESPECÍFICO.....	12
3.0 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	12
3.1 APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA.....	12
3.1.1 SOBRE A APRENDIZAGEM	14
3.1.2 APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA: CONDIÇÕES.....	15
3.1.3 FORMAS DE APRENDIZAGEM.....	15
a) SUBORDINAÇÃO.....	16
b) SUPERORDENADA.....	16
c) COMBINATÓRIA.....	16
3.1.4 O PROFESSOR NA APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA	16
4.0 LIGAÇÃO QUÍMICA.....	17
4.1 A INTERFERÊNCIA ELETRÔNICA E A LIGAÇÃO QUÍMICA.....	18
4.2 LIGAÇÃO QUÍMICA: UM POUCO DE HISTÓRIA.....	20
4.3 TEORIA DA LIGAÇÃO DEVALÊNCIA (VB).....	23
4.4 TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR (TOM).....	26
5.0 MÉTODO DE CÁLCULO SEMI-EMPÍRICO.....	30
5.1 ANÁLISE POPULACIONAL: AS CARGAS SOBRE OS ÁTOMOS	35
5.2 ORDEM DE LIGAÇÃO.....	37
6.0 METODOLOGIA.....	37
7.0 O SOFTWARE DESENVOLVIDO.....	40
7.1 O MODO INICIAR.....	41
7.2 PRIMEIRA ETAPA	51
7.3 SEGUNDA ETAPA.....	52
7.4 TERCEIRA ETAPA.....	52
8.0 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	52
8.1 ANÁLISE DOS ROTEIROS DE ATIVIDADES.....	53
8.2 PRIMEIRO ENCONTRO.....	53
8.3 SEGUNDO ENCONTRO	71
8.4 AVALIAÇÃO DA METODOLOGIA UTILIZADA NA APLICAÇÃO.....	72
9.0 CONCLUSÃO.....	86

REFERÊNCIAS.....	88
APÊNDICE A.....	91
APÊNDICE B	93

1.0 INTRODUÇÃO

Com as mudanças científicas e tecnológicas ocorrendo, impulsionadas pela quarta revolução industrial, mais precisamente a indústria 4.0, o conhecimento de novas metodologias pedagógicas e tecnológicas torna-se uma importante ferramenta a ser utilizada pelo professor nas suas aulas com o intuito de fomentar o desenvolvimento cognitivo do seu aprendiz no ensino de química. Atualmente, ensinar química pressupõe uma formação de cidadãos cada vez mais conscientes e críticos. Segundo Chassot (1990), a química é também uma linguagem e, portanto, o seu ensino deve ser um facilitador da leitura do mundo.

O ensino de ciências, mais precisamente em química, é considerado como uma grande ferramenta para a formação de cidadãos críticos e conscientes do seu papel transformador em sua realidade social. Os Parâmetros Curriculares Nacionais PCN+ (BRASIL, 2002) apontam que:

[...] a química pode ser um instrumento da formação humana que amplia os horizontes culturais e a autonomia no exercício da cidadania, se o conhecimento químico for promovido como um dos meios de interpretar o mundo e intervir na realidade, se for apresentado como ciência, com seus conceitos, modelos, métodos e linguagens próprias (BRASIL, 2002, p. 87).

Desta forma, repensar e trazer novas ideias à maneira que estão sendo ministradas as aulas de química no Ensino Médio ao estudante contribui para buscar novas alternativas tornando, de fato, o processo de ensino aprendizagem mais significativo. Sendo assim, é importante que possa haver uma mudança no modo com que o ensino dos conceitos químicos têm sido abordados, uma vez que apontamentos indicam que o ensino de química praticado atualmente não tem se mostrado capaz de atender aos objetivos pré-estabelecidos, como por exemplo, a formação de pessoas cientificamente instruídas e conscientes (LIMA *et al.*, 2000; MELO; LIMA NETO, 2013).

Não é difícil constatar que muitos assuntos de Química não são transmitidos de forma correta, muitos conceitos estruturantes são dissolvidos, abrindo espaço unicamente para a memorização bem como práticas descontextualizadas.

Acordante com Lopes (1997), essas afirmações apontam que o didatismo excessivo de alguns conceitos científicos, em vez de contribuir para a construção do pensamento científico, acaba fazendo o caminho oposto e aproxima os conceitos científicos do realismo empírico. Congruente com a autora, existe uma tendência didática que considera necessário chegar ao abstrato a partir do concreto a fim de se tornar um conceito assimilável, o que só reforça a continuidade com o senso comum, ou seja, a aprendizagem mecânica. Desta forma, ao invés de construirmos modelos de compreensão da racionalidade científica, adequado com Lopes (1997), tentamos aproximar os conceitos científicos da racionalidade do senso comum.

Diante de toda essa problemática, no início desse trabalho, buscamos um tema de Química do Ensino Médio que fosse básico para quem está se iniciando nessa ciência e cujo ensino ainda deixa muito a desejar. Resolvemos então partir para abordar a estrutura eletrônica das moléculas nos assuntos de orientação no anel aromático mononuclear e polinuclear condensado e a previsão de acidez nos ácidos carboxílicos, consequência do desenvolvimento da Mecânica Quântica que ainda precisa ser mais explorada na Química do Ensino Médio. A nossa ideia central foi a de preparar algum material que pudesse ser utilizado pelo docente na intenção de facilitar seu trabalho em sala de aula.

Mas, teríamos condições de abordar algum aspecto da Mecânica Quântica na Química do Ensino Médio? Encontramos a resposta para essa pergunta nos fundamentos da Aprendizagem Significativa, conforme os pressupostos descritos por (Ausubel, Novak e Hanesian, 1978).

Com os fundamentos da Aprendizagem Significativa e na intenção de auxiliar o professor de Química do Ensino Médio, preparamos um software que faz uso de parâmetros de estruturas eletrônicas obtidas através de cálculos Químico Quânticos. Baseado na Teoria do Orbital Molecular (TOM), nosso material permite ao professor trabalhar de forma mais objetiva e direta conceitos que antes só poderia ser tratado de forma teórica, sem material ilustrativo.

Nosso objetivo neste trabalho é fornecer ao docente de Química do Ensino Médio uma ferramenta de ensino diferenciada fazendo uso de temas antes abordados de forma totalmente abstrata e que pode ser abordado com outro enfoque. Entendemos que com mais essa ferramenta, o docente passará a ter mais recursos para explorar a estrutura eletrônica das moléculas e seus desdobramentos dentro da Química.

2.0 OBJETIVO

2.1 OBJETIVO GERAL

Apresentar material informatizado para o professor de Química do Ensino Médio usar nas aulas sobre a Teoria do Orbital Molecular e temas relacionados.

2.2 OBJETIVO ESPECÍFICO

- 1) Descrever os Fundamentos da Teoria do Orbital Molecular;
- 2) Identificar a pertinência da Aprendizagem Significativa como fundamentação para este trabalho;
- 3) Elaborar material informatizado sobre a Teoria do Orbital Molecular para o professor de Química do Ensino Médio usar em suas aulas;
- 4) Avaliar a aplicação do material preparado em sala de aula.

3.0 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA

Coincidente com Ausubel, a estrutura cognitiva é o conteúdo total e organizado das ideias de um dado indivíduo, ou seja, tudo que ele aprendeu, como informações conceituais, proposições. Esta organização segue uma hierarquia, muitas vezes, de conceitos mais gerais para os mais específicos. A ênfase de seus estudos se dá na aquisição, armazenamento e organização das informações no cérebro do indivíduo.

A teoria da aprendizagem significativa ausubeliana explica a construção de significados a partir da interação entre aspectos relevantes da estrutura do sujeito com a nova informação a ser aprendida. Um aspecto importante é que a aprendizagem de conceitos e proposições, resignado (Ausubel, Novak e Hanesian, 2000), a partir de exposições sucessivas a materiais potencialmente significativos, resultam na produção, diferenciação progressiva e aperfeiçoamento dos novos significados que serão base para aprendizagens posteriores.

Sendo assim, a utilização de multimodos de representação facilita o processo cognitivo, bem como das demais formas de aprendizagem significativas. Esse aspecto da teoria da aprendizagem significativa veio de acordo ao principal objetivo desse nosso trabalho.

Para Ausubel, os significados não são estáticos, mas estão em contínua transformação a partir da interação substantiva, não arbitrária e não literal com novas informações.

Dentro desta premissa, cada significado construído pode ser o ponto de partida para a construção de outros significados constituindo uma rede hierarquicamente organizada em que conceitos mais gerais ligam-se a outros mais restritos. O resultado dessa interação é a construção de significado que, conforme Ausubel é, pois, um produto “fenomenológico” do processo de aprendizagem, no qual o significado potencial, converte-se em conteúdo cognitivo diferenciado para um determinado indivíduo, podendo resultar em aprendizagem (Moreira e Masini, 2006).

Numa prática pedagógica, é necessário fomentar estratégias que modifiquem o ambiente escolar num local de descobertas, a fim de desenvolver o pensamento criativo e facilitar o entendimento dos conceitos estudados e não simplesmente um local de transmissão massiva de conteúdo a serem memorizados e reproduzidos nas avaliações o que em nada contribui para o aprendizado.

A Aprendizagem Significativa, conforme Ausubel, resulta em um complexo e organizado sistema de informações presente na mente daquele que está aprendendo, por exemplo, o aluno que começa a estudar tem a sua disposição mental os subsunçores. A definição deste conhecimento prévio como “conceito subsunçor” (Ausubel, Novak e Hanesian, 1978). Os subsunçores são estruturas de conhecimento específicos que podem ser mais ou menos abrangentes de acordo com a frequência com que ocorre aprendizagem significativa em conjunto com este.

Conforme os mesmos autores, estas informações que se dão na aquisição, armazenamento e organização das ideias no cérebro do indivíduo são organizadas e hierarquizadas. Na hierarquia, as ideias vão se encaixando de acordo com uma relação entre elas. Além disso, essas novas ideias vão nesta estrutura cognitiva se internalizando ou ancorando, desta forma, os novos conceitos ligam-se a estes pontos de ancoragem, após isso se reordenam e vão internalizando, portanto, sendo aprendidos.

Ainda de acordo com os autores, a aprendizagem consiste na ampliação da estrutura cognitiva através da incorporação de novas ideias, dependendo deste tipo de relacionamento a aprendizagem pode ser do mecânico ao significativo. A aprendizagem mecânica ou decorada é o processo onde as novas ideias não se relacionam de forma lógica e clara com nenhuma ideia existente na estrutura cognitiva do sujeito, portanto, na estrutura cognitiva não existe um conceito subsunçor onde esta nova informação possa se ancorar. Sua incorporação à estrutura cognitiva é de forma arbitrária, por conseguinte, não há flexibilidade (informação não armazenada ou internalizada) de uso ou longevidade.

A aprendizagem se comporta, de acordo com Ausubel, de forma contínua, ou seja, hora aprendemos de forma significativa, hora aprendemos de forma mecânica. É importante citar que para o psicólogo da educação, uma das possibilidades da origem dos subsunçores está diretamente ligada à aprendizagem mecânica, pois, quando uma pessoa não possui na estrutura cognitiva, um ponto de ancoragem, a informação recebida é utilizada até que elementos mais relevantes sobre o assunto passem a existir e sirvam, então, de subsunçores, favorecendo a aprendizagem significativa.

3.1.1 SOBRE A APRENDIZAGEM

Para Ausubel a aprendizagem poderia ocorrer de duas formas distintas. No primeiro caso, por recepção, nesse caso, o conhecimento é apresentado ao aprendiz em formato final, previamente preparado pelo professor; podendo ser através de um livro, uma aula, um software, um filme etc. Não se trata, desta forma, de uma aprendizagem por passividade, pois poderemos participar de uma aula ativamente como na apresentação de um seminário, em um júri simulado, operando uma simulação e fazendo uma experiência, sendo que, estes conteúdos tornam-se intensamente mobilizadores para o indivíduo, pois agrega esta nova informação e interage de forma significativa com os subsunçores. Um segundo tipo de processamento da aprendizagem é chamado por Ausubel de descoberta, ou seja, o conteúdo principal a ser aprendido deve ser descoberto pelo estudante, funcionando assim: ao invés do aprendiz receber a informação ele vai pesquisar e descobrir estas informações.

Desta forma, ele poderá ter a mesma dinâmica que a aprendizagem por recepção como, por exemplo, assistir a uma reportagem e, a partir destas informações, responder as perguntas sugeridas pelo professor.

3.1.2 APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA: CONDIÇÕES

Conforme os fundamentos da aprendizagem significativa, algumas condições devem ser observadas como o material, este precisa estar dentro do contexto e incorporado à estrutura cognitiva do aprendiz de maneira não arbitrária, além de ser preparado considerando os subsunçores adequados.

Já o condutor principal de todo o processo, o professor, deverá observar se o aprendiz tem condições para relacionar um novo material à sua estrutura cognitiva.

Desta forma, a compreensão genuína de um conceito implica em quatro características de significados que o aprendiz deve tomar posse:

- Clareza;
- Precisão;
- Diferenciação;
- Transferência.

3.1.3 FORMAS DE APRENDIZAGENS

Três formas de aprendizagem significativa descritas por Ausubel (1973). São elas: subordinação, superordenada e combinatória.

a) Subordinação

Ocorre quando uma informação nova e menos abrangente é assimilada pelo subsunçor passando a alterá-lo. A subordinação de um novo material a um conceito mais amplo presente na estrutura cognitiva. Desta forma, a nova informação terá um significado devido a sua interação com subsunçor pré-existente. O novo material interage e ancora um conceito de forma progressiva no subsunçor, o conceito inicial antes básico vai sendo detalhado e especializado.

b) Superordenada

Aprendizagem superordenada se dá quando um conceito ou proposição, mais geral ou inclusivo do que ideias ou conceitos já estabelecidos na estrutura cognitiva, é adquirido a partir destes e passa a assimilá-los. A ideia pode reorganizar-se e adquirir novos significados ao ser associada ao subsunçor numa reconciliação integrativa, ou seja, a ideia pode reorganiza-se adquirindo um novo significado;

c) Combinatória

É a aprendizagem de proposições que não guardam uma relação de subordinação ou superposição com outras proposições ou conceitos e sim com um conteúdo amplo da estrutura cognitiva. Combinações que fazem sentido com um conteúdo amplo. Congruentes com o que já se sabe. A nova informação é relacionada à estrutura cognitiva como um todo através de analogias numa reconciliação integrativas.

3.1.4 O PROFESSOR NA APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA

Consoante com Ausubel (2000), o papel do docente exige quatro práticas fundamentais:

- Identificar a estrutura conceitual e proposicional da matéria de ensino;
- Identificar os subsunçores;
- Diagnosticar aquilo que o aluno já sabe;

Se eu tivesse que reduzir toda a psicologia educacional a um único princípio, diria isto: o fator singular mais importante na aprendizagem é aquilo que o aprendiz já conhece. Descubra o que ele sabe e baseie nisso os seus ensinamentos (David P. Ausubel, 1968).

- Utilizar facilitadores na aquisição de conceito com organizadores prévios.

Então, consoante com a Teoria da Aprendizagem Significativa de Ausubel e procurando identificar subsunçores como: Números Quânticos, Processos atrativos e repulsivos nucleares, Propriedades e Características das Ligações Covalentes, Hibridização, Reações de Substituição Eletrofílica em Compostos Aromáticos e Previsão de Acidez em Ácidos Carboxílicos desenvolvemos uma sequência de tópicos visando auxiliar o docente na Competência da área 7 – Apropriar-se de conhecimento da química para, em situações problemas, interpretar, avaliar ou planejar intervenções científico-tecnológica de acordo com a H24 – Utilizar códigos e nomenclatura da química para caracterizar matérias, substâncias ou transformações químicas.

4.0 A LIGAÇÃO QUÍMICA

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) e sua formulação baseada na Mecânica Quântica é o tema central deste trabalho. A Teoria do Orbital Molecular é uma das partes fundamentais no estudo das Ligações Químicas. A nossa intenção é a de que este tema possa fazer parte do material que será disponibilizado para o docente juntamente com o software elaborado.

4.1 A INTERFERÊNCIA ELETRÔNICA E A LIGAÇÃO QUÍMICA

A nossa discussão começa com a famosa experiência da dupla-fenda realizada por Thomas Young em 1801 (Morgon e Coutinho, p. 273). O experimento concluiu que a luz era uma onda, porque os fenômenos da difração e da interferência eram características exclusivamente ondulatória como mostrada na fig 1. Esta experiência revela uma das leis mais fundamentais e intrigantes do mundo quântico, mas quase sempre esquecidas nas aulas de química. Se fótons ou elétrons atravessam a fenda 1 com a fenda 2 fechada, a distribuição de intensidade das partículas (Fótons ou elétrons) que chegam no anteparo , é representada pela curva P_1 . Analogamente , a curva P_2 representa a distribuição de intensidade quando a experiência é realizada com a fenda 2 aberta e a fenda 1 fechada. Classicamente, se a experiência fosse realizada com as duas fendas abertas, a intensidade total seria dada pela soma $P_1 + P_2$. Entretanto, experimentalmente o que se observa é a distribuição P_{12} mostrada à direita da (Fig.1). Embora ela seja drasticamente diferente daquela esperada classicamente, ela pode ser obtida e isto é o mais curioso de toda história – das mesmas amplitudes, para cada evento em separado, e depois elevar o resultado ao quadrado, para obter a distribuição observada experimentalmente.

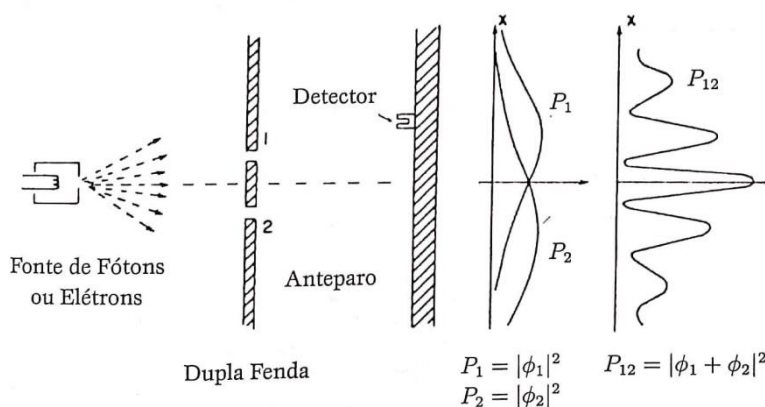


Figura1. Experiência de Young com zonas de interferência construtiva e destrutiva.

$$P_{12} = |\phi_1 + \phi_2|^2 = \underbrace{\phi_1^2 + \phi_2^2}_{\text{Clássica}} + \underbrace{2\phi_1\phi_2}_{\text{Interferência}} \quad (1)$$

Como os dois primeiros termos da expressão acima representam o resultado esperado classicamente, podemos dizer que o terceiro termo (1), chamado de Clássica Interferência representam o efeito quântico. É extremamente importante enfatizar que, quanto mais próximas forem as frequências (energia) dos fótons ou a energia dos elétrons, mais forte será o efeito da interferência.

Ressaltando que o efeito quântico da interferência pode ser associado às ligações químicas. Já que a ligação é também o resultado da interação entre elétrons, esse ponto importante é quase sempre ignorado nos livros de Química e pode ser explorado como o início da discussão do tema “ligação química”.

4.2 LIGAÇÃO QUÍMICA: UM POUCO DE HISTÓRIA

Linus Pauling dedicou grande parte de sua carreira ao estudo da natureza da ligação química, em suas palavras, “o mais valioso conceito da química” (PAULING,1992, p.34). Seu trabalho influenciou fortemente o pensamento químico e parte de suas ideias permanecem válidas, com tantos anos passados, compondo os atuais conteúdos de química dos níveis médio e superior de ensino.

Pauling tornou-se adepto da ideia de ligação química como partilha de elétrons em 1919 ao ler os artigos de Lewis e Langmuir que tratavam do assunto (PAULING,1984, p.36). Esses autores propunham um modelo atômico em que os elétrons mantinham posições definidas em torno do núcleo (LANGMUIR,1919, p.56); LEWIS,1916, p.22). Pauling, porém, viria a adotar uma visão dinâmica do átomo e da ligação química: em 1926, ele publicou um artigo no qual procurou conciliar as propostas para a ligação química de Lewis (par eletrônico compartilhado), Bohr (elétrons em movimento) e Knorr (os elétrons participantes de uma ligação orbitam em torno de dois núcleos que ligam), no que denominou teoria da ligação química como elétrons compartilhados em órbitas (PAULING,1926, p.67).

No período de abril de 1926 a setembro de 1927, Pauling viajou como bolsista para a Europa, com o projeto de estudar a estrutura eletrônica de átomos e moléculas e a natureza das ligações químicas (PAULING,1992, p. 48). Ali esteve em meio aos acontecimentos que geraram a nova mecânica quântica. Particularmente importante para suas ideias foi o conceito de ressonância quantum-mecânica, que viria a se tornar central no desenvolvimento de sua concepção acerca da ligação química:

[...] a principal contribuição da mecânica quântica para a química tem sido a sugestão de novas ideias, tais como a ressonância de moléculas entre várias estruturas eletrônicas com um associado aumento de estabilidade (PAULING,1945,p.ix).

O termo ressonância foi introduzido na mecânica quântica em 1926 por Werner Heisenberg que, para explicar os espectros de emissão dos átomos do Hélio (singlete e triplete), elaborou um tratamento matemático correspondente ao dois osciladores quânticos acoplados que trocam energia entre si, análogos à situação clássica de dois pêndulos em ressonância. Heisenberg intitulou seu trabalho de Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik¹ (MEHRA; RECHENBERG, 1982, p.8).

De acordo com a interpretação de Pauling, o fenômeno da ressonância quantum-mecânica manifesta-se através da forma da função de onda do sistema, como combinação linear das funções Ψ^I e Ψ^{II} , bem como pela expressão da energia de interação eletrônica, a integral de ressonância. Embora admita a impossibilidade de verificação experimental da ressonância, Pauling defende a importância de tal interpretação para uma “compreensão intuitiva segura e produtiva das equações da mecânica quântica e dos resultados de sua aplicação” (PAULING; WILSON JR, 1935, p. 68).

A ideia de ressonância de elétrons seguiu-se a de ressonância entre estruturas eletrônicas das moléculas. Para tanto, foi necessário um passo decisivo, postular que a toda configuração eletrônica corresponde a uma função de onda. Ocorre que, se uma estrutura é explicada como resultante de mais de uma configuração eletrônica, a autofunção correspondente a esta estrutura deverá ser uma combinação das autofunções das configurações contribuintes (PAULING, 1932, p. 15). Uma vez que, a cada configuração eletrônica corresponde uma fórmula química. Com este postulado, Pauling estabeleceu a relação entre as representações químicas e quantum-mecânica de uma molécula.

Pauling tinha clareza de que, para várias substâncias, não havia como conciliar suas propriedades com uma única fórmula química construída pelo sistema usual de ligação covalente (simples, dupla e tripla). Em lugar de condenar a representação usual das estruturas moleculares e criar outras, Pauling advogou em favor de sua manutenção como uma atitude prática introduzindo a ideia de que a estrutura correta seria híbrida das várias estruturas convencionais possíveis.

¹ Ressonância em Mecânica Quântica e o problema de Muitos Corpos.

O caso mais difundido é o benzeno, que apresenta várias possibilidades de representação.

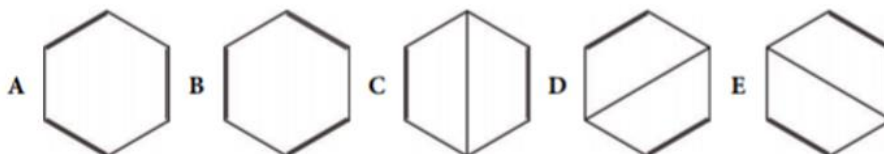


Figura 2. Estruturas ressonantes do Benzeno.

De acordo com a teoria da ressonância, a estrutura do benzeno seria híbrido de 5 (cinco) estruturas possíveis, representadas pelas 5 (cinco) fórmulas de ligação de valência da (Fig.2), acima. Em outras palavras, estas 5 (cinco) estruturas em ressonância representariam a verdadeira estrutura do benzeno.

Pauling estendeu a noção de ressonância às ligações químicas, explicando porque distâncias interatômicas medidas situavam-se entre os valores calculados para ligação simples e duplas, como nos casos da grafita, do benzeno e de outros compostos. A ideia é que as ligações “estão ressoando entre ligações simples e duplas” (PAULING,1932, p. 22). Pauling empregou a ressonância para explicar o caráter ácido e básico de compostos orgânicos de diversos tipos.

Nos trabalhos subsequentes da série **The nature of the chemical bond**, o modelo de estruturas e ligações ressonantes foi aprimorada e consolidada. Foi estabelecida uma escala de eletronegatividade associada a polaridade das ligações, resultante da ressonância entre uma estrutura iônica e outra covalente (PAULING,1932, p. 24).

Esta escala de eletronegatividade constitui-se num importante instrumento na análise da distribuição de cargas em estruturas ressonantes. Foram desenvolvidos procedimentos de cálculo de energia de ressonância, a partir de dados termoquímicos e refinada à explicação da estrutura de vários compostos como o dióxido ácidos carboxílicos, ésteres, amidas, hidrocarbonetos e aromáticos.

A conceituação básica da teoria da ressonância estava estabelecida e explicava vários fenômenos químicos com base no movimento entre estruturas eletrônicas e nos movimentos de ligações no interior dessas estruturas.

A ideia de ressonância, em sua aplicação à quântica, é a seguinte: se for possível escrever para uma molécula (ou outro sistema) duas ou mais estruturas eletrônicas correspondendo, aproximadamente, à mesma energia e satisfazendo outras condições, então, nenhuma das estruturas isoladamente pode ser considerada como representante do estado normal da molécula que, em vez disso, é representado essencialmente por uma média de todas elas; e, além disso, a molécula é mais estável (possui um menor conteúdo energético) que poderia ser se tivesse qualquer uma das estruturas isoladas. A molécula é descrita como ressoando entre as várias estruturas e a energia de estabilização da molécula é denominada energia de ressonância.

4.3 TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA

A primeira teoria baseada na mecânica quântica desenvolvida para a ligação química foi a da ligação de valência. A linguagem que ela introduz, envolvendo conceito como emparelhamento de spins, superposição de orbitais, ligação σ , ligação π e hibridização é amplamente utilizada na química, especialmente na descrição das propriedades e das reações dos compostos orgânicos.

Na teoria VB, considera-se que uma ligação é formada quando um elétron em um orbital atômico de um átomo emparelha o seu spin com o de um elétron em um orbital atômico de outro átomo. Para entender por que este emparelhamento conduz à ligação, temos que examinar a função de onda para os dois elétrons que formam a ligação. Começamos considerando a ligação mais simples, a ligação no hidrogênio molecular, H_2 .

A função de onda espacial de um elétron em cada um dos dois átomos de H bem distantes um do outro é:

$$\Psi = X_{H1sA}(r_1)X_{H1sB}(r_2) \quad (2)$$

no caso de o elétron 1 estar no átomo A e o elétron 2 no átomo B. Para simplificar, escreveremos esta função de onda como $\Psi = A(1)B(2)$. Quando os átomos estão próximos um do outro não é possível saber se o elétron 1 ou o elétron 2 que está ligado a A. Portanto, uma descrição igualmente válida seria $\Psi = A(2)B(1)$, com o elétron 2 em A e o 1 em B.

Quando duas situações são igualmente prováveis, a abordagem quântica descreve o estado do sistema como uma superposição das funções de onda de cada uma das situações. Assim uma descrição mais exata da função de onda da molécula em vez das funções de onda individuais, é a combinação linear (não normalizada).

$$\Psi = A(1)B(2) \pm A(2)B(1) \quad (3)$$

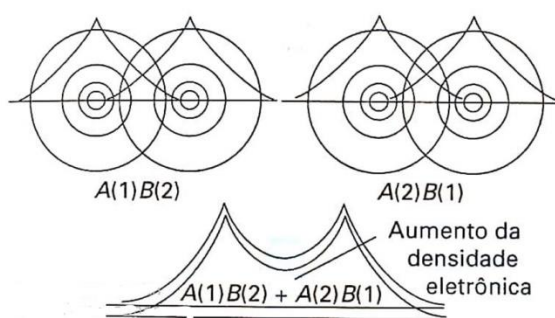


Figura 3. As duas ilustrações mostradas na parte superior da figura representam as contribuições de $A(1)B(2)$ e de $A(2)B(1)$ para a ilustração de baixo que representa a estrutura global da molécula.

A combinação com energia mais baixa é a que corresponde ao sinal +, de modo que a função de onda da ligação da valência da molécula H_2 é

$$\Psi = A(1)B(2) + A(2)B(1) \quad (4)$$

A formação da ligação na molécula de H_2 pode ser visualizada como fruto da grande probabilidade de os elétrons se encontrarem entre os dois núcleos e contribuírem, assim, para a união dos dois. Mais formalmente, a onda representada pela parcela $A(1)B(2)$ interfere construtivamente com a onda representada pela parcela $A(2)B(1)$ e há um aumento do valor da função de onda na região internuclear (Fig. 3)

A distribuição eletrônica descrita pela função de onda da (Eq. 4) é chamada de uma ligação σ . Ela tem simetria cilíndrica em torno do eixo internuclear e é denominada dessa forma porque ela se parece com um par de elétrons num orbital s (σ é a letra grega equivalente a "s"), quando ela é observada na direção deste eixo.

Uma imagem química de uma ligação covalente é aquela em que os spins dos dois elétrons se emparelham quando os orbitais se superpõem.

A origem do papel do spin é que a função de onda dada na (Eq. 4) pode ser formada somente por um par de elétrons com spins opostos. O emparelhamento dos spins não é o fim em si mesmo; ele é um meio de se obter uma função de onda (e a distribuição de probabilidade a ela associada) que corresponde a uma energia baixa.

A descrição VB do H_2 pode ser aplicada a outras moléculas diatômicas homonucleares, tais como o nitrogênio, N_2 . Para ter a descrição da ligação de valência do N_2 , imaginamos a configuração eletrônica de valência de cada átomo, que é dada por $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. É uma convenção geral tomar o eixo z como o eixo internuclear, de modo que podemos imaginar cada átomo como tendo um orbital $2p_z$ que aponta para um orbital $2p_z$ do outro átomo (Fig.4), com os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ perpendiculares ao eixo. Forma-se uma ligação σ pelo emparelhamento dos dois elétrons nos orbitais $2p_z$. A função de onda espacial é dada pela (Eq. 4), mas agora A e B representam os dois orbitais $2p_z$.

Os orbitais $2p$ restantes não se combinam para dar uma ligação σ , pois não têm simetria cilíndrica em relação ao eixo internuclear. Os elétrons nestes orbitais se combinam para formar duas ligações π . Uma ligação π se forma pelo emparelhamento de elétrons em dois orbitais p que se aproximam lateralmente um do outro (Fig 5). Existem duas ligações π no N_2 , uma formada pelo emparelhamento de spins em dois orbitais $2p_x$ vizinhos e a outra pelo emparelhamento de spins em dois orbitais $2p_y$ vizinhos. O padrão global de ligação do N_2 é uma ligação σ mais duas ligações π (Fig.6), o que é consistente com a estrutura de Lewis do nitrogênio $:N \equiv N:$.

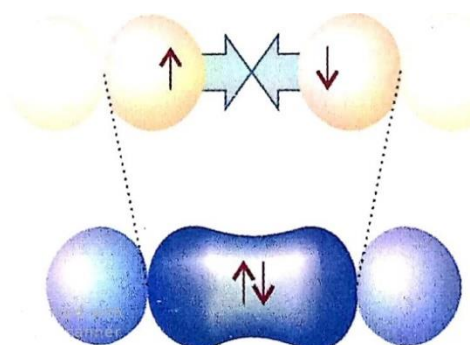


Figura 4. Superposição de orbitais e emparelhamento de spins de elétrons em dois orbitais p colineares, com a formação de uma ligação σ .

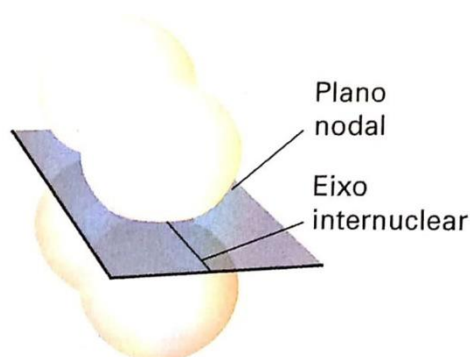


Figura 5. Forma-se uma ligação π quando há superposição de orbitais e emparelhamento de spins entre elétrons em orbitais p com seus eixos perpendiculares ao eixo internuclear. A ligação tem dois lobos de densidade eletrônica separados por um plano nodal.

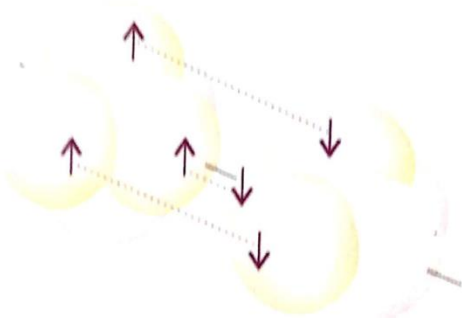


Figura 6. Estrutura das ligações na molécula de nitrogênio. Há uma ligação σ e duas ligações π . A densidade eletrônica global tem simetria cilíndrica em torno do eixo internuclear.

4.4 TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR (TOM)

Ao contrário da Teoria de Ligação de Valência, na Teoria do Orbital Molecular admite-se que os elétrons não pertencem à ligação entre 2 (dois) átomos (exceto no caso de uma molécula diatômica), os elétrons devem ser tratados como pertencentes à totalidade da molécula. O Orbital Molecular é o resultado da combinação dos orbitais atômicos de todos os átomos da molécula. Essa teoria foi mais bem desenvolvida do que a teoria VB, e proporciona os conceitos que são amplamente usados nas discussões modernas sobre as ligações químicas.

Na Teoria dos Orbitais Moleculares, os orbitais moleculares são obtidos pela resolução da Equação de Schrödinger para a molécula. A espécie mais simples descrita pela Teoria do Orbital Molecular é o íon H_2^+ (Fig.7). O operador hamiltoniano do elétron único da espécie H_2^+ é dado pela (Eq.5), nele são descritos os termos de energia cinética do elétron e os termos de energia potencial.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V \quad V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{A1}} + \frac{1}{r_{B1}} - \frac{1}{R} \right) \quad (5.6)$$

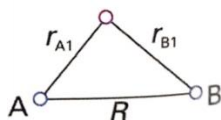


Figura 7: Representação da espécie H_2^+ .

Na expressão para V (Eq. 5), os dois primeiros termos entre parênteses representam a contribuição atrativa da interação entre o elétron e cada um dos núcleos; o termo remanescente é a interação repulsiva entre os núcleos. Na (Fig.7), r_{A1} e r_{B1} são as distâncias entre o elétron e cada um dos núcleos e R é a distância entre os dois núcleos.

As funções de onda do elétron obtidas pela resolução da equação de Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$ (7) são os orbitais moleculares (OM). Um orbital molecular Ψ dá, por intermédio de $|\Psi|^2$, a distribuição de probabilidade do elétron na molécula; é semelhante a um orbital atômico, mas se espalha por toda a molécula.

A equação de Schrödinger pode ser resolvida analiticamente para o H_2^+ (dentro da aproximação de Born-Oppenheimer), mas as funções de onda são muito complicadas. Além disso, as soluções não se generalizam para sistemas poliatômicos. Por isso, um procedimento mais simples que, embora aproximado, pode ser aplicado com facilidade a outras moléculas como veremos adiante.

Considerando a espécie H_2^+ , se um elétron puder ser encontrado num orbital atômico do átomo A e também num outro orbital atômico de um átomo B, a função de onda geral é a superposição dos dois orbitais atômicos:

$$\Psi = C_1 X_{H1sA} + C_2 X_{H1sB} \quad (8)$$

em que, no caso do H_2^+ , "A" simboliza a função X_{H1sA} , "B" simboliza a função X_{H1sB} e N é um fator de normalização. C_1 e C_2 são os coeficientes da combinação linear. Na (Eq.8) Ψ é uma combinação linear de orbitais atômicos (CLOA).

Se um orbital molecular tiver simetria cilíndrica em relação ao eixo internuclear, como o que estamos discutindo, tem-se um orbital σ , pois se parece com um orbital s quando observado ao longo do eixo; mais exatamente, porque tem momento angular nulo em relação ao eixo internuclear.

Existem algumas regras empíricas que permitem simplificar o cálculo do Ψ ; as funções atômicas que participam da formação de um determinado orbital molecular devem:

- (1) Ter a mesma simetria em relação ao eixo da molécula;
- (2) Ter energias aproximadamente iguais;
- (3) Ter um recobrimento apreciável.

A primeira destas regras não envolve nenhuma aproximação: a interação entre orbitais atômicos de diferentes simetrias é identicamente zero. As outras regras, porém, envolvem aproximações e nos cálculos mais precisos eles não são tomadas em consideração sendo necessário analisá-las qualitativamente.

De acordo com a interpretação de Born, a densidade de probabilidade que o elétron apresenta é proporcional ao quadrado do módulo da respectiva função de onda, esse é um postulado de Mecânica Quântica. A densidade de probabilidade correspondente à função de onda (real) ψ_+ da (Eq.8) é:

$$\Psi^2_+ = N^2(A^2 + B^2 + 2AB) \quad (9)$$

Uma importante característica da densidade de probabilidade fica aparente quando examinamos a região internuclear, onde os dois orbitais atômicos têm amplitudes semelhantes. De acordo com a (Eq.9), a densidade de probabilidade total é proporcional à soma de:

- A^2 , a densidade de probabilidade do elétron que está no orbital atômico A.
- B^2 , a densidade de probabilidade do elétron que está no orbital atômico B.
- $2AB$, uma contribuição extra à densidade de probabilidade.

Essa última contribuição, a densidade de superposição, é decisiva, pois representa um aumento da probabilidade de se encontrar o elétron na região internuclear. O aumento pode ser relacionado à interferência construtiva entre os dois orbitais atômicos: cada qual tem amplitude positiva na região internuclear, de modo que a amplitude total é maior do que a correspondente a um único orbital.

A explicação convencional é baseada na noção de que a acumulação da densidade eletrônica na região entre os núcleos coloca o elétron numa posição em que ele interage fortemente com ambos os núcleos. Nesse caso, a energia da molécula é menor que a dos átomos separados, onde o elétron interage fortemente somente com um dos núcleos. O orbital formado é chamado de σ e é um orbital ligante, um orbital que, quando ocupado, contribui para a ligação dos dois átomos. Nesse caso de espécies diatômicas, a descrição do orbital molecular se assemelha à descrição da Ligação de Valência (VB), (Fig.8).



Figura 8. Representação da interferência construtiva que ocorre quando dois orbitais H_{1s} se superpõem e formam um orbital σ ligante

A combinação linear Ψ_- na (Eq.10) corresponde a uma energia mais elevada do que a de Ψ_+ . Como ela também é um orbital σ , recebe a identificação σ^* . Esse orbital tem um plano nodal internuclear no ponto em que A e B se cancelam exatamente (Fig.8). A densidade de probabilidade é:

$$\Psi_-^2 = N^2(A^2 + B^2 - 2AB) \quad (10)$$

Há uma diminuição da densidade de probabilidade entre os dois núcleos em virtude da parcela $- 2AB$ (Eq.10). Fisicamente essa diminuição corresponde à interferência destrutiva dos dois orbitais atômicos que se superpõem.

O orbital σ^* é um exemplo de um orbital antiligante, ou seja, de um orbital que, quando ocupado, contribui para a redução da coesão entre os dois átomos e proporciona elevação da energia da molécula em relação à energia dos átomos separados (Fig.9).

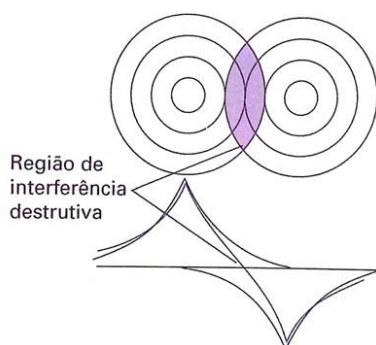


Figura 9. Representação da interferência destrutiva que ocorre quando dois orbitais H_{1s} se superpõem e formam um orbital 2σ antiligante.

5.0 OS MÉTODOS DE CÁLCULOS SEMI-EMPÍRICOS

O objetivo dos cálculos de estrutura molecular eletrônica em química computacional é a solução da equação de Schrödinger eletrônica

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ (11). Em que E é a energia eletrônica e Ψ é a função de onda polieletrônica em função das coordenadas de todos os elétrons do núcleo.

Para o átomo de hidrogênio, a Equação de Schrödinger tem solução exata devido ao sistema ter apenas um elétron. Para uma molécula, assim como para átomos polieletrônicos a solução é obtida através de métodos que aproximam sobretudo a repulsão eletrônica. O método mais utilizado nesse sentido é o de Hartree-Fock que considera a repulsão sentida por um elétron como uma média devida aos demais elétrons (Peter Atkins, 2011, p. 454).

No método Hartree-Fock para átomos poli-eletrônicos a função de onda do sistema é um determinante de Slater, forma que satisfaz ao Princípio da Exclusão de Pauli que determina que a função de onda de partículas com o spin fracionário (elétrons) deve ser anti-simétrica. No método Hartree-Fock a Equação de Schrödinger resulta nas equações mono-eletrônicas onde surgem os operadores de Fock.

A resolução da Equação de Schrödinger para uma molécula começa com a descrição do operador Hamiltoniano molecular, descrito de forma genérica a seguir:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i^{N_e} \nabla_i^2 - j_0 \sum_i^{N_e} \sum_I^{N_n} \frac{Z_I}{r_{Ii}} + \frac{1}{2} j_0 \sum_{i \neq j}^{N_e} \frac{1}{r_{ij}} \quad (12)$$

A função de onda de uma molécula polieletrônica é uma função da posição de todos os elétrons, $\Psi_{(r_1, r_2, \dots)}$. Supõe-se que cada elétron ocupa um orbital e que a função de onda total pode ser escrita como $\Psi_{(r_1)}\Psi_{(r_2)}\dots$. Observe que esta aproximação orbital é bastante grave e perde muitos detalhes da dependência da função de onda em relação às posições relativas dos elétrons. Para simplificar o aspecto das expressões, escrevemos $\Psi_{(r_1)}\Psi_{(r_2)}\dots$ como $\Psi_{(1)}\Psi_{(2)}\dots$. A seguir, considerando que o elétron 1 ocupa o orbital o orbital molecular Ψ_a com spin α , o elétron 2 ocupa o mesmo orbital com spin β , e assim por diante. Desta forma, escrevendo a função de onda polieletrônica Ψ como o produto $\Psi = \Psi_a^\alpha(1)\Psi_a^\beta(2)\dots$

A combinação de um orbital molecular e uma função de spin, como $\Psi_a^\alpha(1)$, é o spin orbital introduzido.

Uma função de onda que é o produto de funções não satisfaz ao princípio de Pauli e não troca de sinal sob permutação de qualquer par de elétrons. Para que isso aconteça, escrevemos a função de onda deve ser escrita como a soma de todas as possíveis permutações, usando sinais de mais e de menos apropriadamente:

$$\Psi = \psi_a^\alpha(1)\psi_a^\beta(2) \dots \psi_z^\beta(N_e) - \psi_a^\alpha(2)\psi_a^\beta(1) \dots \psi_z^\beta(N_e) + \dots \quad (13)$$

Existem $N_e!$ Termos nesta soma, que pode ser representada pelo determinante de Slater:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \psi_a^\alpha(1) & \psi_a^\beta(1) & \dots & \dots & \psi_z^\beta(1) \\ \psi_a^\alpha(2) & \psi_a^\beta(2) & \dots & \dots & \psi_z^\beta(2) \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \psi_a^\alpha(N_e) & \psi_a^\beta(N_e) & \dots & \dots & \psi_z^\beta(N_e) \end{vmatrix} \quad (14)$$

O fator $1/\sqrt{N_e!}$ garante a normalização da função se os orbitais moleculares componentes Ψ_m estiverem normalizados. Para evitar escrever determinantes de grandes tamanhos, a função de onda é escrita usando-se apenas a diagonal principal:

$$\Psi = (1/N_e!)^{1/2} |\psi_a^\alpha(1) \psi_a^\beta(2) \dots \psi_z^\beta(N_e)| \quad (15)$$

A solução numérica das equações de Hartree-Fock no cálculo para moléculas é uma tarefa onerosa mesmo para computadores poderosos. A abordagem que descreve os orbitais moleculares como combinação linear dos orbitais atômicos foi adotada em 1951 independentemente por Roothan e Hall (Morgon, 2007, pg.19), que obtiveram uma forma de converter as equações de Hartree-Fock para os orbitais moleculares em equações para os coeficientes que aparecem nas CLOA.

Assim escrevemos:

$$\Psi_m = \sum_{o=1}^{N_b} c_{om} \chi_o \quad (16)$$

em que os C_{om} são coeficientes desconhecidos e os X_o são os orbitais atômicos (supondo serem reais).

Os métodos de cálculos químicos quânticos baseados na aplicação de métodos de Roothan-Hartree-Fock na resolução da Equação de Schrödinger sempre trazem uso de um conjunto de orbitais atômicos chamados de “conjunto base”. O

tamanho da base não é necessariamente igual ao número de núcleos atômicos na molécula porque podemos usar diversos orbitais atômicos em cada núcleo.

Na aplicação do Método de Roothan-Hartree-Fock a partir de n_b funções no conjunto base, obtemos N_b orbitais moleculares Ψ linearmente independentes. São obtidas as equações de Roothan, na notação matricial:

$$F_c = SC\varepsilon \quad (17)$$

em que F é uma matriz $N_b \times N_b$ com elementos

$$F_{oo'} = \int \chi_o(1) f_1 \chi_{o'}(1) d\tau_1 \quad (18)$$

e S é a matriz $N_b \times N_b$ das integrais de superposição:

$$S_{oo'} = \int \chi_o(1) \chi_{o'}(1) d\tau_1 \quad (19)$$

e c é uma matriz $N_b \times N_b$ de todos os coeficientes que precisam ser obtidos:

$$c = \begin{pmatrix} c_{1a} & c_{1b} & \dots & c_{1N_b} \\ c_{2a} & c_{2b} & \dots & c_{2N_b} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{N_b a} & c_{N_b b} & \dots & c_{N_b N_b} \end{pmatrix} \quad (20)$$

A primeira coluna é o conjunto de coeficientes para Ψ_a , a segunda coluna para Ψ_b etc.

Por fim, ε é uma matriz diagonal das energias $\varepsilon_a, \varepsilon_b, \dots$:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_a & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \varepsilon_b & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \varepsilon_{N_b} \end{pmatrix} \quad (21)$$

Se escrevermos as equações de Roothaan na forma $(F - S\varepsilon)c = 0$; verificamos que elas são apenas um conjunto de N_b equações simultâneas para os coeficientes. Portanto, elas têm solução somente se

$$| F - \epsilon S | = 0 \quad (22)$$

Chegamos a um estágio em que podemos verificar que a metodologia Hartree-Fock, juntamente com a utilização de conjuntos de funções base, requer a avaliação de um grande número de integrais. Nesse ponto duas abordagens são normalmente seguidas. Nos métodos semi-empírico, as integrais encontradas ou são feitas iguais a zero ou são estimadas a partir de dados experimentais. Nos métodos ab initio, tenta-se calcular as integrais numericamente usando como entradas somente os valores das constantes fundamentais e os números atômicos dos átomos presentes na molécula.

O cálculo eficiente dessas integrais é o maior desafio em cálculos Roothan-Hartree-Fock, mas o problema pode ser suavizado por uma escolha adequada das funções base de boa parametrização. A parametrização é usada para evitar o cálculo de diversas integrais. Cada método de cálculo semi-empírico é caracterizado por uma parametrização própria. Os métodos de cálculos semi-empíricos usam o método Roothan-Hartree-Fock através de cálculo do campo auto-consistente (SCF-RHF).

Nos métodos semi-empíricos, muitas das integrais que ocorrem nos cálculos são estimadas mediante dados da espectroscopia ou de propriedades físicas, como as energias de ionização, ou adotando-se uma série de regras que permitem anular certas integrais. Estes métodos são rotineiramente aplicados a moléculas que contêm um grande número de átomos devido à sua velocidade computacional, mas há frequentemente uma perda de precisão nos resultados.

Os métodos semi-empíricos mais recentes fazem simplificações menos rigorosas sobre o abandono de integrais, mas são todos descendentes da técnica primitiva do CNDO (Negligência Completa do Overlap Diferencial). Enquanto o CNDO considera as integrais (AB/AB), ou seja, orbitais X_A e X_B diferentes em um mesmo átomo superpostos, iguais à zero, o método do abandono intermediário das superposições diferenciais não abandona as integrais (AB/AB) para as quais diferentes funções de base X_A e X_B estão centradas no mesmo átomo.

Como essas integrais são importantes para explicar as diferenças de energia entre átomos correspondentes à mesma configuração, o INDO é muito mais preferível que o CNDO para investigações espectroscópicas. Uma aproximação menos drástica é o abandono das superposições diferenciais diatômicas, NDDO, no

qual (AB/CD) é abandonada somente quando X_A e X_B ou X_C e X_D são centrados em átomos diferentes núcleos.

Há outros métodos semi-empíricos, com nomes como abandono intermediário modificado das superposições diferenciais, MINDO), abandono modificado das superposições diferenciais, MNDO, modelo Austin 1 (AM1), PM3 e gaussiana dirigidas para a distância interpar, PDDG. Em cada caso, os valores das integrais são nulos ou iguais a parâmetros cujos valores foram determinados na tentativa de se otimizar a concordância com dados experimentais, como as entalpias de formação, momentos de dipolo e energias de ionização. AM1, PM3 e PDDG são versões aprimoradas de MNDO.

Deste modo, o método semi-empírico foi melhorando por derivar de uma melhora dos métodos anteriores. Em 2006 Alfredo Simas cria o RM1 (Recife Model 1), e na mesma universidade (UFPE) desenvolve-se o método Sparkle que é calibrado para complexo de lantanídeos trabalhando associado inicialmente com o AM1 e atualmente com o PM7.

5.1 ANÁLISE POPULACIONAL: AS CARGAS SOBRE OS ÁTOMOS

A função de onda obtida através dos métodos de cálculo resultantes da Equação de Schrödinger não pode ser interpretada fisicamente mas algumas propriedades dos sistemas moleculares que podem ser calculadas a partir da função de onda podem ter interpretações físicas. É o caso por exemplo da distribuição de cargas e ordem de ligação. A parte analítica das equações matemáticas nos cálculos quânticos é bastante extensa mas usaremos apenas algumas expressões fundamentais para a nossa exposição.

O cálculo de propriedades eletrônicas das moléculas considerando a ocupação dos orbitais moleculares é feito através de técnicas conhecidas como Análise Populacional.

Existem várias técnicas de análises populacional, a mais popularizada entre os químicos é a Análise Populacional de Mulliken (Guadagnini e outros, 1996, p. 8), face à facilidade dos cálculos envolvidos (Sant'Anna, Carlos. M.R, 2009, p 15).

A Análise populacional de Mulliken faz uso da descrição do orbital molecular como combinação linear dos orbitais atômicos. Desta forma nos cálculos semi-empíricos, os coeficientes das combinações lineares que descrevem os orbitais

moleculares são calculados. Pela análise populacional de Mulliken, a probabilidade de um elétron ocupar Ψ_1 é dada por uma soma de contribuições de cada orbital atômico Φ_μ . O termo $(c_\mu^i)^2$ (23) pode ser interpretado como a carga eletrônica parcial $q_\mu^{(i)}$ (24) sobre o orbital atômico Φ_μ devido à presença de um elétron no orbital molecular Ψ_1 (para sermos rigorosos, $q_\mu^{(i)}$ (25) deveria ser $(c_\mu^{(i)})^2$ (26) vezes a carga eletrônica). A carga eletrônica total sobre o orbital atômico Φ_μ é:

$$q_\mu = \sum_i n_i q_\mu^{(i)} \quad (27)$$

ou

$$q_\mu = \sum_i n_i (c_\mu^{(i)})^2 \quad (28)$$

cuja soma é sobre todos os orbitais moleculares ocupados, e n_i indica o número de ocupação do orbital molecular Ψ . A carga “q” sobre o átomo devido à contribuição de todos os orbitais atômicos e em todos os orbitais moleculares é calculada pelo somatório dos q_μ para todos os orbitais atômicos centrados nos átomos em questão.

Finalmente, a carga residual sobre o átomo A, também chamada de “carga líquida” (q_A) é calculada como sendo:

$$q_A = Z_A - q \quad (29)$$

5.2 ORDEM DE LIGAÇÃO

Uma forma de avaliar as ligações químicas existentes entre os átomos de uma molécula é através da análise das Ordens de Ligação que também podem ser calculadas a partir das funções e onda já obtidas. Considerando dois átomos A e B, a ordem de ligação (OL) entre eles é dada pelo somatório sobre todos os orbitais

moleculares ocupados do produto do número de elétrons que ocupam o orbital “i” e os coeficientes da combinação linear de cada orbital atômico centrados em cada átomo A e B.

$$O_{LAB} = \sum_i^{OC} n_i c_{\mu} c_{\nu i} \quad (30)$$

A ordem de ligação é um parâmetro importante no estudo da estrutura eletrônica das moléculas. Sua análise é importante para identificar o número de ligações existentes entre dois átomos e também a ocorrência de ressonância.

6.0 METODOLOGIA

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) precisa ser bastante explorada quando se fala em práticas de ensino. O aprendizado deste conteúdo por parte do professor é importante porque está relacionado com diversos outros conteúdos básicos de química como reatividade, polaridade e previsão de acidez que são muitas vezes trabalhados sem o entendimento de sua origem teórica. É evidente que ao abordar qualquer assunto ligado à Teoria Quântica no ensino médio não é uma tarefa trivial por conta de diversos aspectos implicados como, por exemplo, os pré-requisitos de matemática, tanto do aluno como do professor, bons livros didáticos que abordem corretamente o assunto, etc. Neste trabalho, procuramos apresentar uma proposta baseada na Teoria do Orbital Molecular com o uso de uma ferramenta de informática como peça auxiliar que julgamos importante na nossa proposta visando melhorar o processo de ensino-aprendizagem nesse tema em turmas de química do Ensino Médio.

O produto didático está fundamentado segundo a teoria da Aprendizagem Significativa do americano David Ausubel. O produto foi aplicado em cinco (5) grupos, sendo assim distribuídos: quatro (4) grupos com dois (2) alunos e um grupo com cinco (5) alunos, neste grupo cinco (5) os alunos resolveram agrupar-se assim, identificados por **A, B, C, D e E**, sendo a intervenção didática realizada em 2 (dois) encontros de 50 minutos, cada um devidamente registrado em vídeos. Para execução da intervenção usamos um roteiro em que os alunos deveriam responder

antes um questionário com cinco questões objetivas sobre orientação no anel aromático e Efeito Indutivo Estático negativo em Ácidos Carboxílico (Efeito -Is), após a demonstração de cada simulação um novo questionário com seis questões subjetivas sobre o referido assunto.

Objetivamos, nesta pesquisa, desenvolver potencialmente uma aprendizagem significativa em aulas de química no ensino médio utilizando como recurso um software que desenvolvemos e tem como prioridade fornecer aos professores um pequeno banco de dados com algumas moléculas e alguns parâmetros de sua estrutura eletrônica (carga líquida sobre os átomos). Os parâmetros apresentados como já dissemos, serão calculados com o uso do HyperChem versão 7.0, através do método químico-quântico semi-empírico AM1, licenciado para UFRPE sob o 12-710-1502700154.

Os parâmetros da estrutura eletrônica servirão para orientar a discussão em um software que produziremos para o professor a fim de discutir principalmente alguns pontos importantes como:

- a reatividade, relacionando inclusive com a orientação orto, meta e para nos compostos com anel aromático;
- polaridade das ligações e a acidez.

A análise desses dados é fundamental para que o professor possa mostrar a relação dos mesmos com algumas propriedades químicas dos compostos, verificando daí a importância da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Esperamos que este material multiplique as ideias para se trabalhar com conceitos teóricos que são assimilados pelos alunos de uma maneira substancialmente.

Nessas premissas, fomentamos a importância de utilizar simuladores em sala de aula que estão relacionados ao aperfeiçoamento e entendimento dos conceitos, permitindo que os estudantes colem um grande número de informações, estimulando até o desenvolvimento de pesquisas científicas.

Por outro lado, a utilização de simuladores em sala de aula inspira cuidados como a complexidade de um sistema real. Deve-se ter o cuidado com a sua utilização, pois podem conter erros grosseiros com o planejamento do professor na escolha do simulador que será trabalhado na complementação de suas aulas e o momento de apresentação desta modelagem é de suma importância para potencializar o processo de aprendizagem.

Caso não ocorra este planejamento, o aprendiz pode desenvolver uma visão distorcida a respeito do assunto, não podendo seu conhecimento ser aplicado à vida real. Vale salientar que as animações utilizadas na sala não devem possuir apenas caráter de motivação e alegoria, mas sim incorporar às atividades do professor como elementos didáticos. O docente deve criar atividades didáticas de forma a estimular o discente a interagir com a simulação aproveitando, assim, potencialmente sua utilização, animação e interação.

Ainda neste contexto, é importante frisar que o discente pode interagir e controlar de forma solitária, fazendo, inclusive, ele mesmo perguntas e procurando as respostas destas investigações, ou seja, adiantando ou voltando a ação até que ocorra a construção do conhecimento significativo.

O objetivo deste processo é contribuir com aspectos motivacionais, ferramentas de simulações para que o docente, ao utilizar este software nas redes de computadores, fiquem estimulados em complementar nossa pesquisa com novas ideias, desenvolvendo novos produtos pedagógicos que poderão contribuir com o desenvolvimento intelectual dos nossos discente, deixando as aulas com material/abordagem mais dinâmicas e inovadoras. Além disso, promover a descoberta de alterações para estimular e desenvolver novas formas de ensino-aprendizagem que permitam vivenciar experiências bem próximas à realidade que é apresentada.

7.0 O SOFTWARE DESENVOLVIDO

O software foi desenvolvido na plataforma Made with unity “Feito com unidade” tradução nossa, que oferece suporte ao desenvolvimento para todas as principais plataformas como: dispositivos móveis, PC, console e Web. A plataforma Unity “Unidade” tradução nossa é usada para criar jogos, histórias, anúncios, artes

interativas, filmes e visualizações. Essa ferramenta facilita a criação, movimentação das moléculas e o armazenamento dos dados de carga líquida colhidos no HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1. Foi, também, adicionada uma música instrumental que acompanha o usuário na sua navegação estimulando-o a prosseguir.



(31)

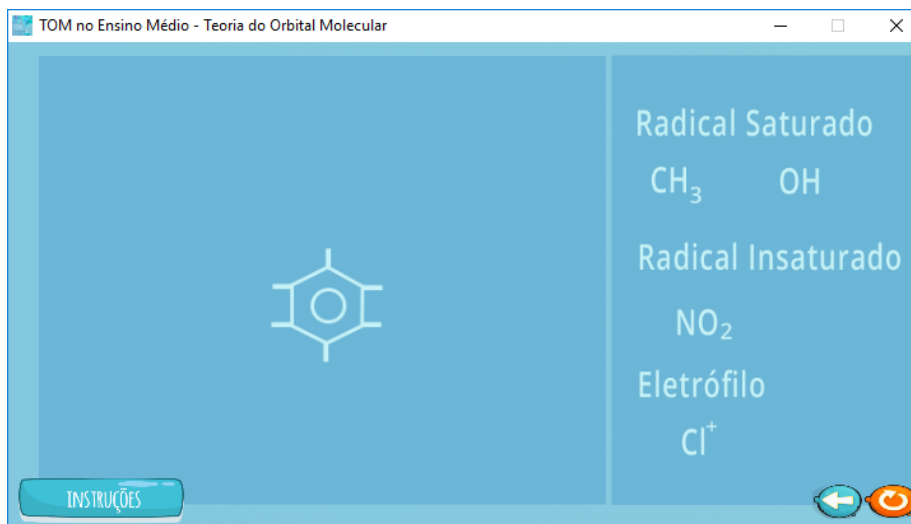
Na página inicial do software, encontram-se duas partes: INICIAR e CARGA LÍQUIDA:



(32)

7.1 O MODO INICIAR

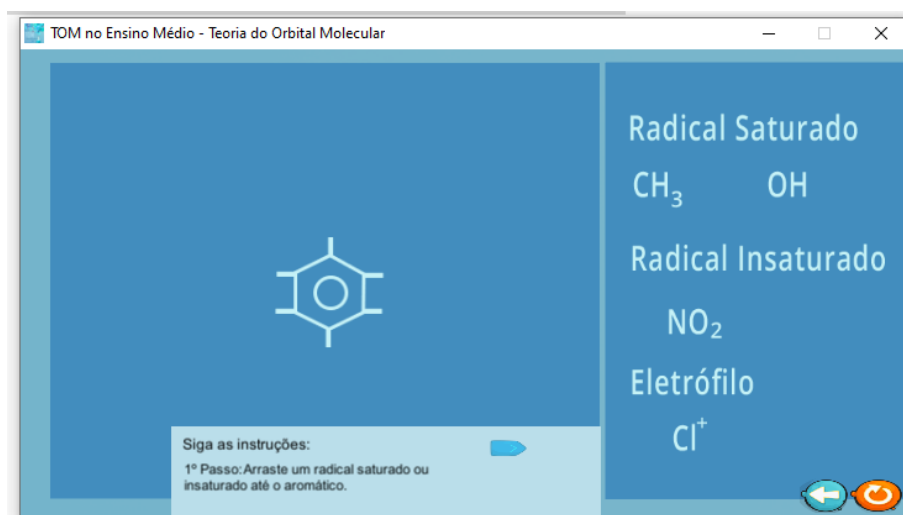
O aluno encontra no centro da tela o anel aromático:



(33)

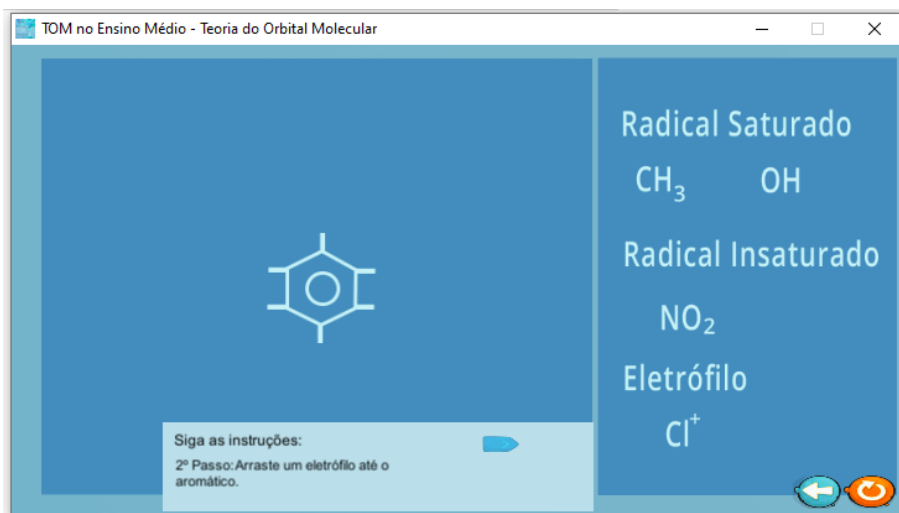
Em seguida, seguindo instruções em dois (2) passos:

1° Passo: Arraste um radical saturado ou insaturado até o aromático;



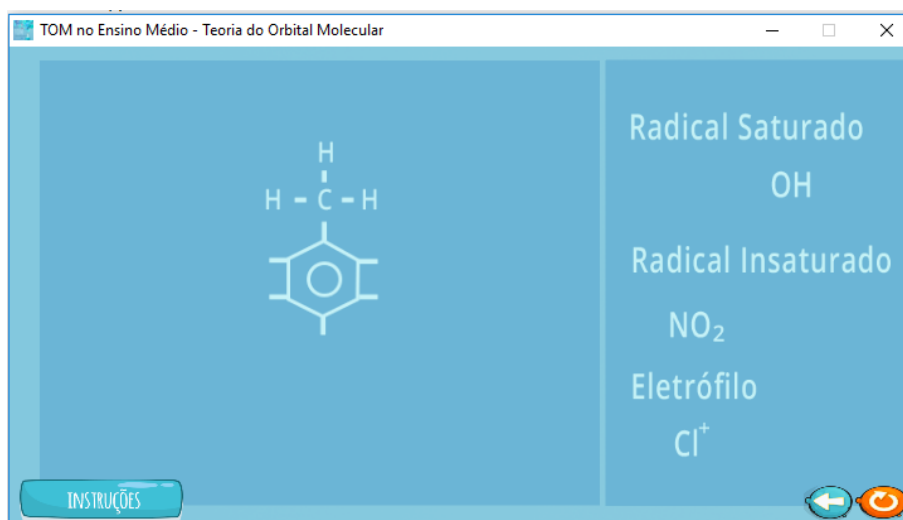
(34)

2° Passo: Arraste um eletrófilo até o aromático;

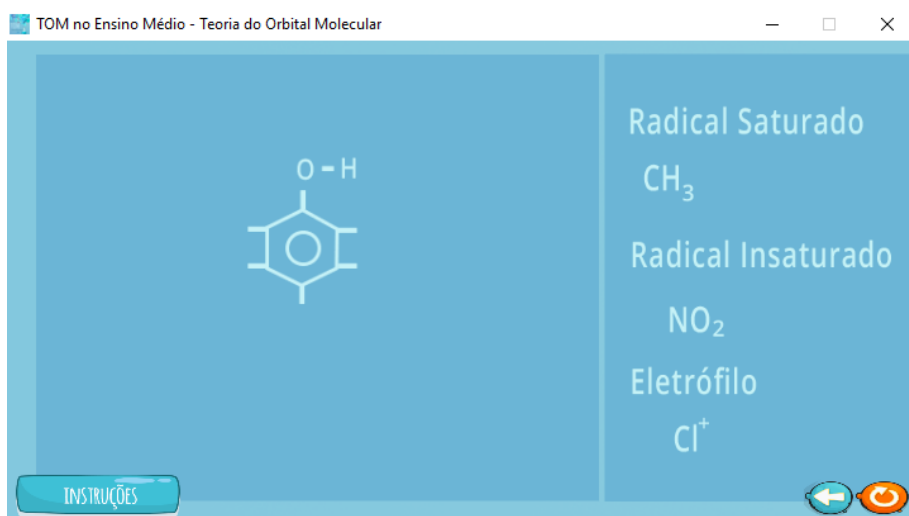


(35)

O aluno escolhe um radical saturado, podendo ser o grupamento metil ou hidroxil:

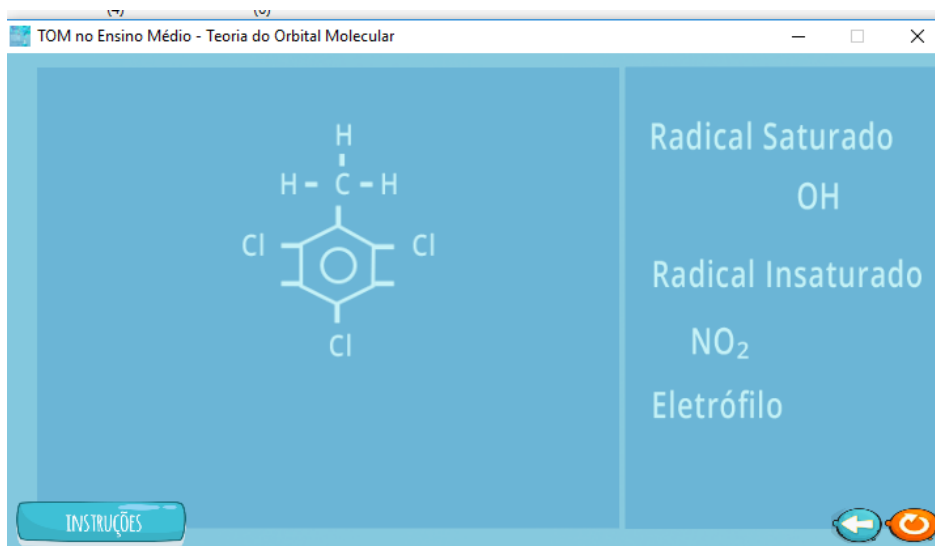


(36)

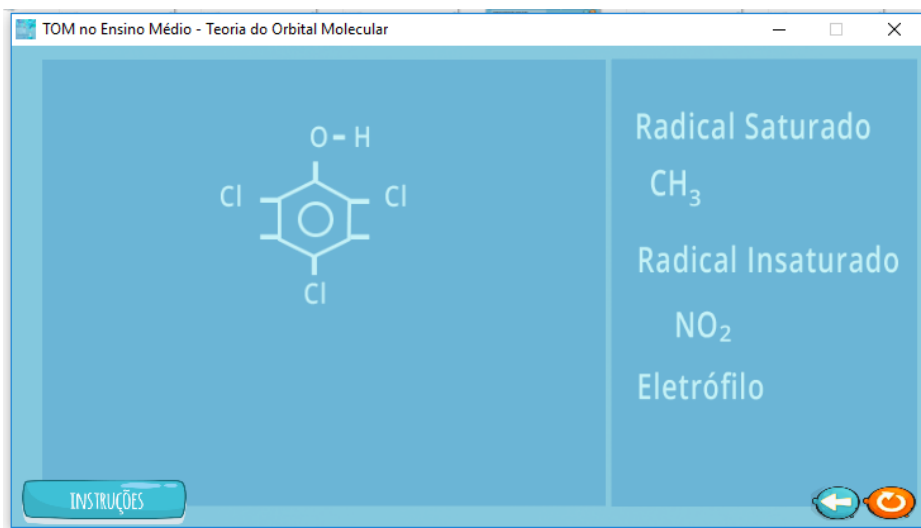


(37)

Os radicais saturados, ao se encaixar ao anel aromático, propiciarão a substituição eletrofílica nas posições orto-para (2,4 e 6) ativante de 1ª Classe:

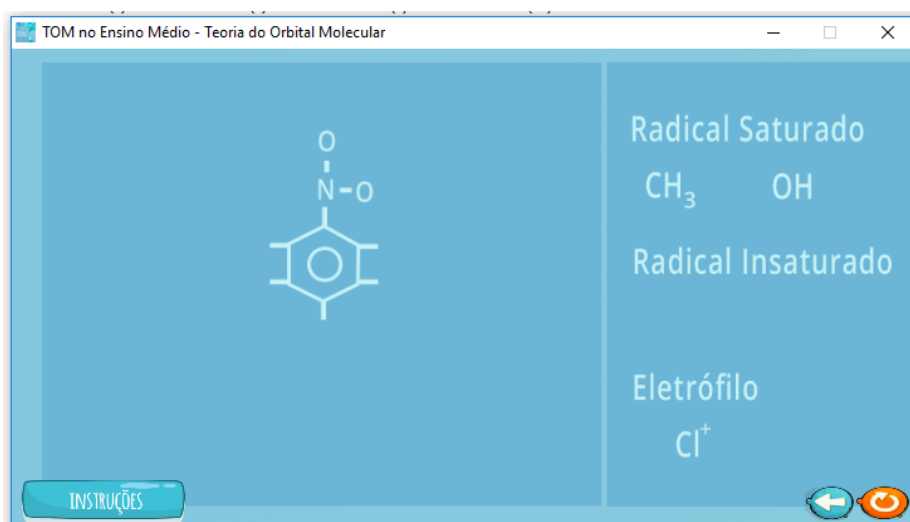


(38)



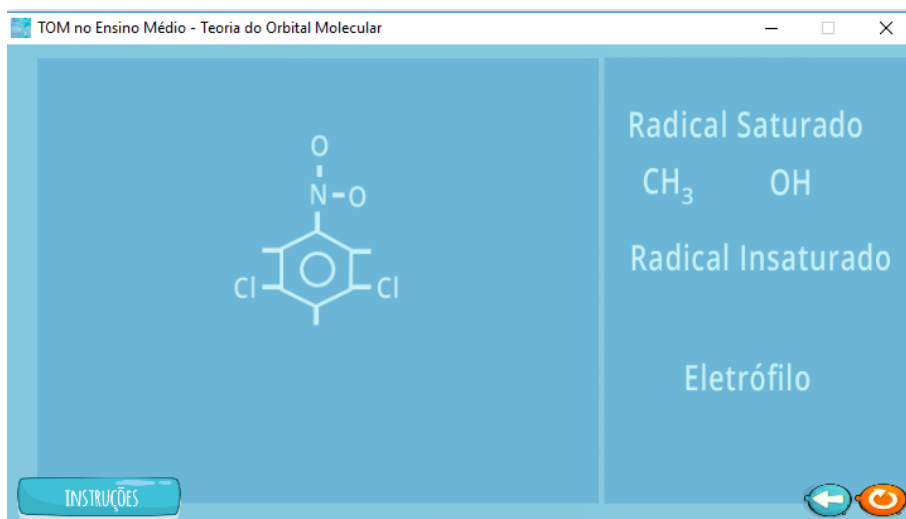
(39)

O aluno tem, também, a possibilidade de escolher para encaixar no anel benzênico o radical nitró:



(40)

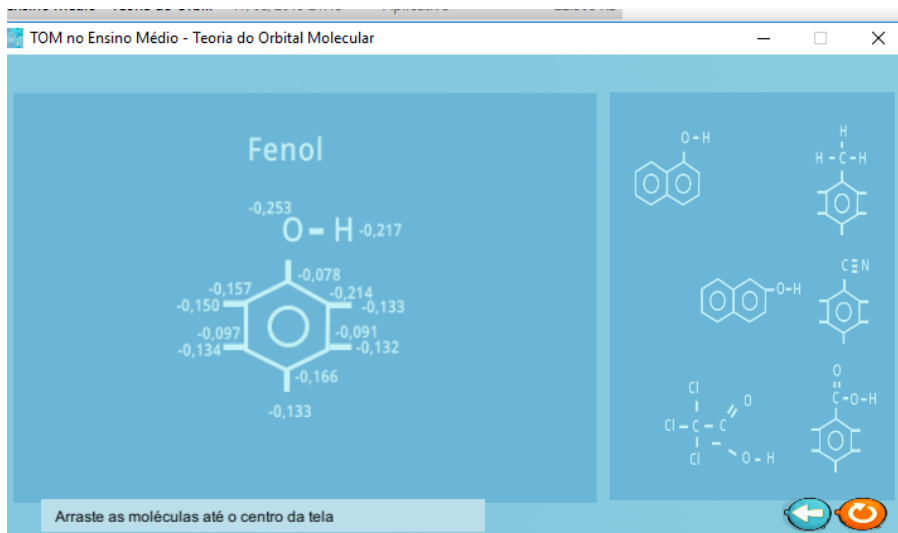
O radical insaturado, ao se encaixar ao anel aromático, propiciará a substituição eletrofílica nas posições meta (3,5), desativante de 2ª Classe:



(41)

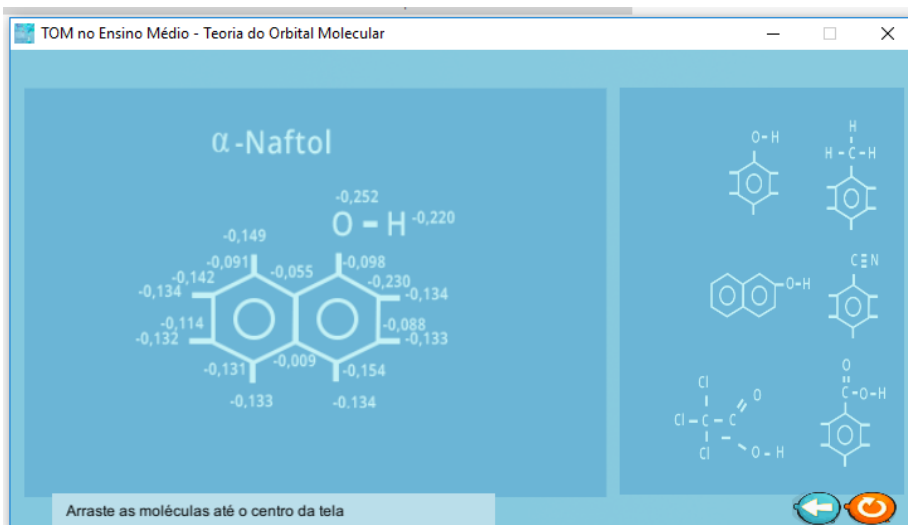
A CARGA LÍQUIDA, ao ser clicada na primeira página, tem a finalidade de estimular o aluno a prosseguir para a segunda página onde ele encontrará 9 (nove) moléculas orgânicas com relevante participação em provas de química dos principais vestibulares e ENEM; o arraste de cada molécula para o centro da tela mostrará suas cargas líquidas favorecendo o local onde os orbitais atômicos são mais concentrados estando relacionado à reatividade da molécula no tocante à Substituição Eletrofílica e ao Efeito Indutivo estático negativo em Ácidos Carboxílico (Efeito -I).

A primeira molécula que poderá ser arrastada para o centro da tela para ser verificada suas cargas líquidas é o fenol. O radical hidroxí favorece a substituição eletrofílica nas posições orto/para (2 (-0,214), 4(-0,166), 6 (-0,157)), ativante de 1ª Classe, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.



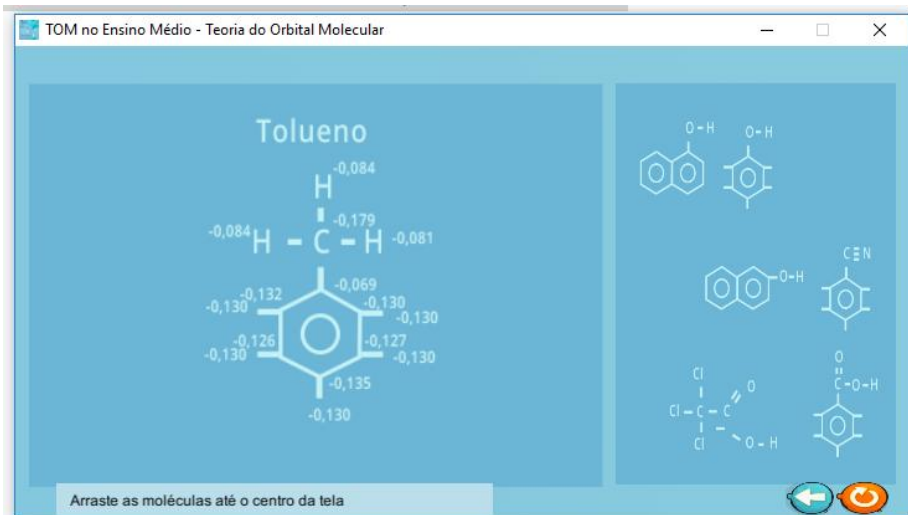
(42)

A segunda molécula que poderá ser arrastada para ser verificada suas cargas líquidas é o α -naftol. O radical hidroxí favorece a substituição eletrofílica nas posições orto/para do anel substituído (2 (-0,230),4 (-0,154)), ativante e 1^oClasse, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.



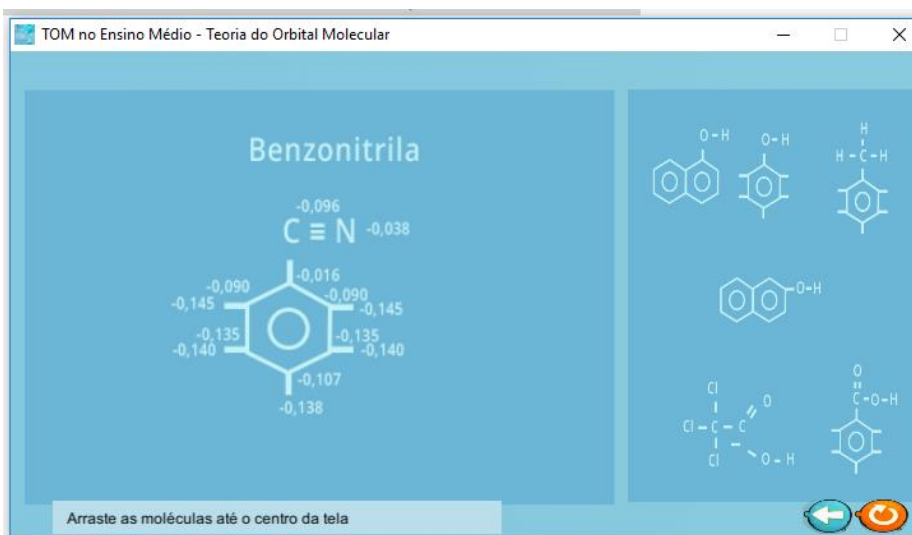
(43)

A terceira molécula que poderá ser arrastada para ser verificada suas cargas líquidas é o tolueno. O radical metil favorece a substituição eletrofílica nas posições orto/para (2(-0,130),4(-0,135),6(-0,132)), ativante de 1^o Classe, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.



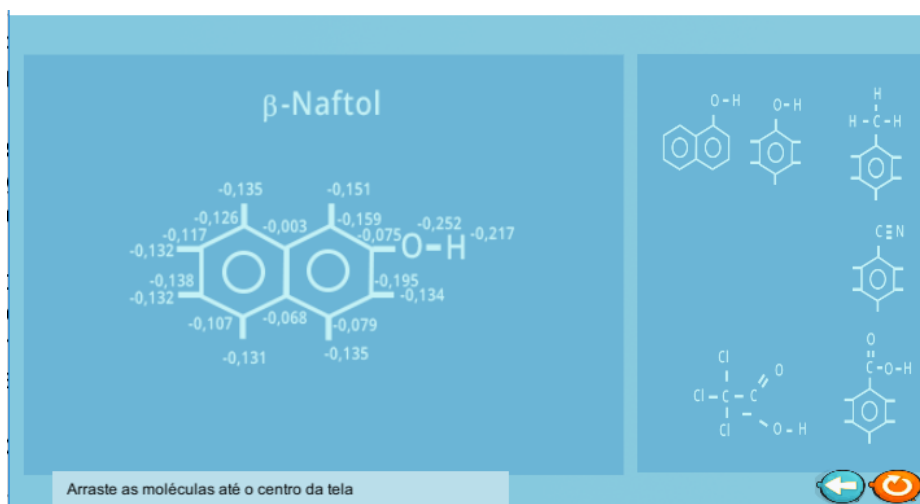
(44)

A quarta molécula que poderá ser arrastada para ser verificada suas cargas líquidas é a Benzonitrila. O radical carbilamina favorece a substituição eletrofílica nas posições meta (3(-0,135),5(-0,135)), desativante ou de 2^o Classe, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.



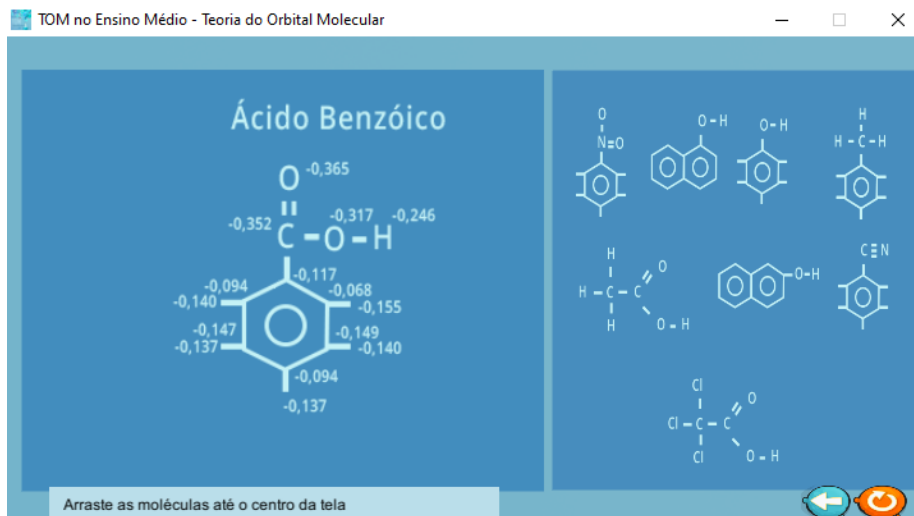
(45)

A quinta molécula que poderá ser arrastada para ser verificada suas cargas líquidas é o β -naftol. O radical hidroxil favorece a substituição eletrofílica nas posições (1(-0,159) e 3(-0,195)) do anel substituído, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.

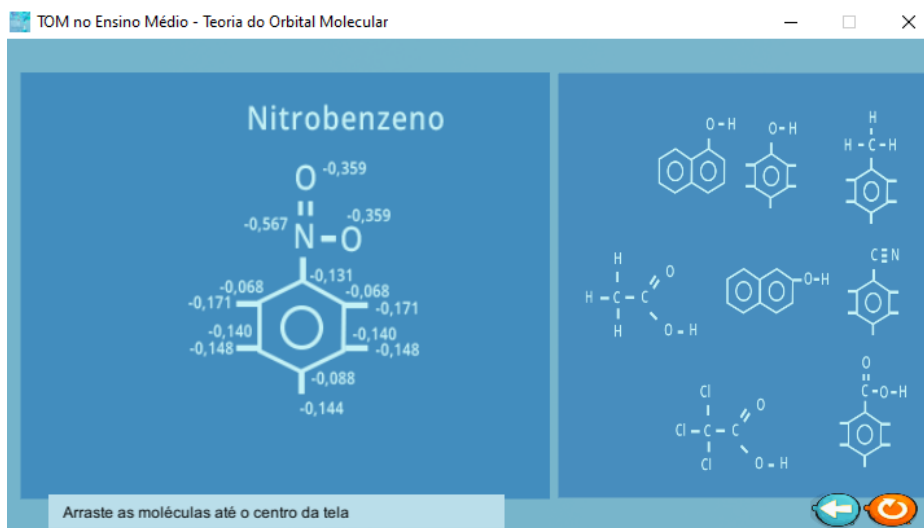


(46)

A sexta molécula que poderá ser arrastada para ser verificada suas cargas líquidas é o Ácido Benzoico. O radical carboxi favorece a substituição eletrofílica nas posições meta (3(-0,149),5(-0,147)), desativante de 2ª Classe, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.

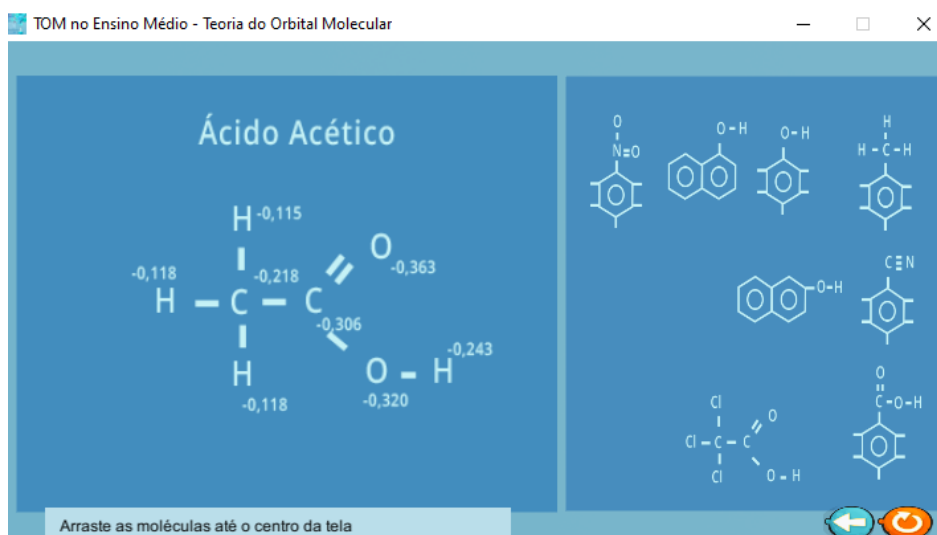


A sétima molécula que poderá ser arrastada para ser verificada suas cargas líquidas é o Nitrobenzeno. O radical nitro favorece a substituição eletrofílica nas posições meta (3 (-0,140),5 (-0,140)), desativante ou de 2ª Classe, calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.

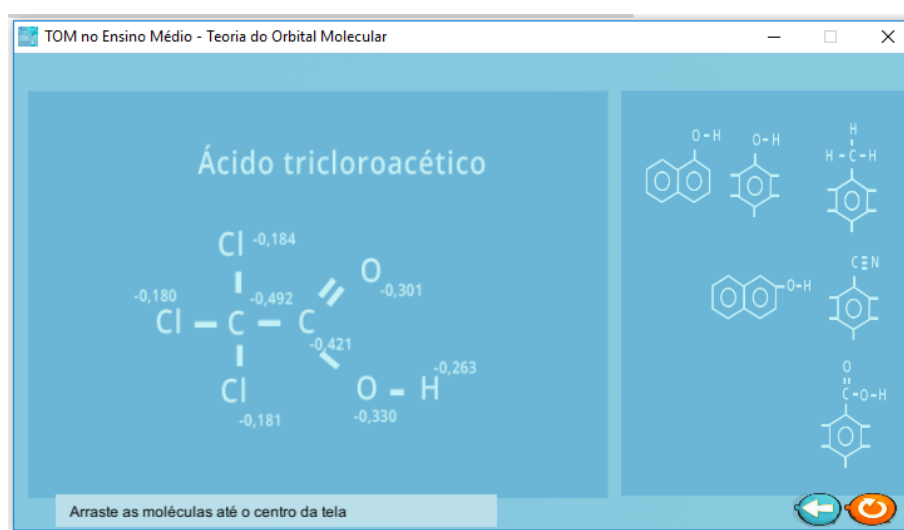


A previsão de acidez pode ser verificada arrastando para o centro da tela o Ácido Acético e o Ácido Tricloroacético. A comparação dos seus hidrogênios ácidos demonstra a aplicabilidade da Teoria do Orbital Molecular (TOM) na previsão de seus respectivos graus de ionização.

A oitava molécula que poderá ser arrastada para o centro da tela é o Ácido Acético sendo observado seu hidrogênio ácido (-0,243), calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.



A nona molécula que poderá ser arrastada para o centro da tela é o Ácido Tricloroacético, sendo observado que os três cloros aumentam o seu grau de ionização quando comparado com o ácido acético devido ao efeito Indutivo estático negativo (Efeito -Is), sendo observado seu hidrogênio ácido (-0,263), calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1.



7.2 PRIMEIRA ETAPA

A aplicação do produto foi planejada para ocorrer durante as aulas regulares do sétimo (7º) período de 2019 do Curso de Licenciatura em Química da UFRPE, visando aprimorar o software para a posteriori apresentarmos ao Ensino Médio da rede Oficial do Estado de Pernambuco, através da projeção da simulação por um Datashow EPSON em um quadro branco com pilotos azul e vermelho e um apagador. A UFRPE dispõe de uma sala de química, que é muito frequentada pelos alunos; possui 40 carteiras, um projetor multimídia, um quadro branco e um ar condicionado onde fizemos nossa intervenção para que o professor expusesse o seu trabalho mediando a interação dos alunos com o produto.

O tempo planejado para aplicação foram dois (2) encontros utilizando os tempos de aula normal, ou seja, 50 minutos, dando um total de 100 minutos devidamente registrados e filmados. As atividades foram planejadas para serem realizadas em cinco (5) grupos, sendo assim distribuídos: quatro (4) grupos com dois (2) alunos e um grupo com cinco (5) alunos, neste grupo cinco (5) os alunos resolveram agrupar-se assim, sendo então, identificados por **A, B, C, D e E**. É imprescindível, contudo, que cada grupo tenha seu roteiro e responda as atividades. Somente assim eles irão participar mais ativamente.

O grupo, ao responder o próprio questionário com cinco questões objetivas de vestibulares tradicionais, conforme Apêndice A, busca organizar suas ideias sobre o conceito, além de buscarmos os seus conhecimentos prévios de acordo com a aprendizagem significativa de Ausubel.

7.3 SEGUNDA ETAPA

Após a realização do questionário objetivo proposto na primeira etapa, a segunda etapa consistiu na apresentação do software na qual os alunos interagiram com o programa analisando sua aplicabilidade nas aulas de química. O professor aproveitou o íterim para explicar em conjunto com as informações do software o mecanismo de orientação nos aromáticos mononuclear, polinuclear com núcleos condensados nas substituições eletrofílicas e o Efeito Indutivo estático negativo em Ácidos Carboxílico (Efeito-Is) na previsão de sua acidez.

Utilizando uma didática moderna e atrativa, o assunto foi abordado atrelando os conceitos teóricos aos dados calculados com o uso do HyperChem versão 7.0 através do método químico-quântico semi-empírico AM1, outrora uma ferramenta especializada para os físicos e, atualmente, uma técnica de grande utilidade para os

químicos devido a trabalhar apenas com os elétrons da camada de valência de uma molécula, obtendo dados com grande velocidade em pouco tempo, além da não utilização de reagentes muitas vezes tóxicos.

7.4 TERCEIRA ETAPA

Consistiu na apresentação de um questionário subjetivo com seis perguntas referentes ao assunto apresentado no software, conforme Apêndice B.

8.0 RESULTADOS E DISCURSÕES

Após a aplicação do produto, sua avaliação foi realizada através de uma pesquisa qualitativa participativa. Utilizamos a análise de conteúdos que prevê três (3) fases importantes. A pré-análise, no qual iremos explorar o material e tratar os resultados, organiza as ideias iniciais criando indicadores para interpretação das informações disponíveis.

Logo em seguida, buscamos explorar todo o material onde juntamos e organizamos as informações, separamos os resultados, inferência e interpretação nos pontos coletados.

Neste capítulo, vamos apresentar os resultados da aplicação do software educacional desenvolvido nesta pesquisa.

Apresentaremos um breve relato dos encontros e passaremos a análise dos roteiros de atividades. Também apresentamos os resultados das respostas dos alunos ao questionário de sondagem. Nosso produto é composto por um roteiro que aborda os ambientes da simulação, um questionário que avalia a metodologia utilizada, que foram respondidas pelos alunos. Salientamos que a importância de se trabalhar com futuros licenciados é uma forma de validar a ferramenta pedagógica e justificar a metodologia, além de aprimorar o software antes de ser aplicado aos alunos do Ensino Médio do Terceiro (3) Ano da Rede Oficial do Estado de Pernambuco.

8.1 ANÁLISES DOS ROTEIROS DE ATIVIDADES

Nesta seção, analisaremos as respostas dadas pelos alunos ao roteiro de atividades. Para cada atividade, fizemos a análise do conteúdo conforme discutido no Capítulo 1. Nossa análise aborda os dois momentos da aplicação do produto: atividades pré-simulação, que visa fazer o aluno pensar a respeito da questão com o seu conhecimento prévio, auxiliando na organização dos subsunçores; e atividades pós-simulação, realizadas após a simulação onde se espera observar a sistematização do conteúdo trabalhado com o produto educacional através da aprendizagem subordinada ocasionando uma derivação progressiva nos subsunçores. Para cada atividade classificamos o momento em que ela se enquadra, apresentamos a análise de conteúdo e discutimos sobre o resultado. Os alunos não tiveram nenhuma informação sobre o conteúdo abordado no produto, ou seja, o conteúdo sobre carga líquida e Efeito Indutivo estático negativo em Ácidos Carboxílico (Efeito -Is) introduzido no momento da aplicação da simulação.

8.2 PRIMEIRO ENCONTRO

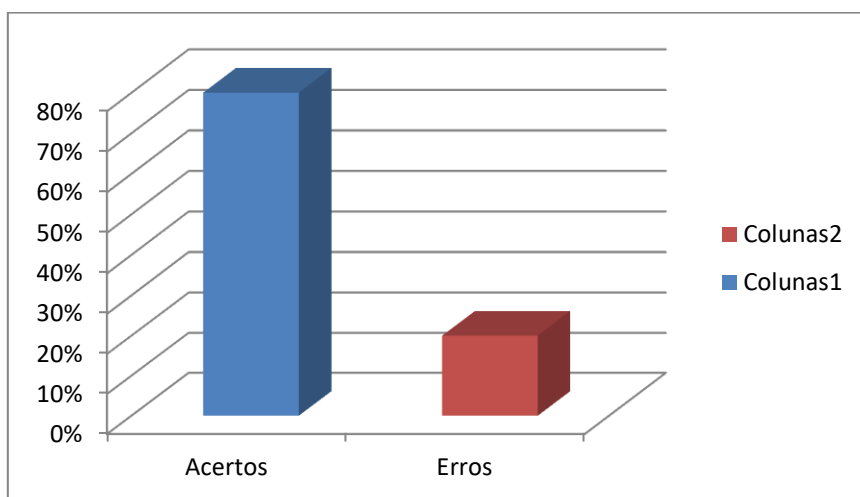
Este primeiro encontro foi realizado numa aula de licenciatura em química do 7º período 2019 noturno na UFRPE cedida gentilmente pelo Professor. Doutor Luciano Azevedo. No encontro, utilizamos cinco (5) grupos, sendo que, quatro (4) grupos com dois (2) alunos e um grupo com cinco (5), neste grupo cinco (5) os alunos resolveram agrupar-se assim, sendo então, identificados como A, B, C, D e E.

Na sala, os grupos foram orientados a sentarem espalhados, sendo avisados que só responderiam o questionário, conforme o Apêndice A, após a solicitação do professor; os grupos tinham um tempo de 20 minutos para resolver o questionário objetivo com cinco questões. Os alunos estavam eufóricos e muito falantes, querendo saber sobre o que apresentaríamos de tão diferente e qual conteúdo seria abordado.

O grupo A entregou o questionário em 11 minutos; na correção este grupo acertou as questões 1,2,3 e 4, errando a questão 5. O grupo B entregou o questionário em 12 minutos; na correção este grupo acertou as questões 1,3 e 4, errando as questões 2 e 5. O grupo C entregou o questionário em 8 minutos; na correção este grupo acertou as questões 1 e 4, errando a questão 2,3 e 5.

O grupo D entregou o questionário em 11 minutos; na correção este grupo acertou as questões 2,3,4 e 5, errando a questão 1. O grupo E entregou em 15 minutos; na correção este grupo acertou as questões 1 e 2, errando as questões 3,4 e 5. Após todos os grupos entregarem os questionários, o segundo encontro iniciou-se.

Questão 1:



(51)

O grupo A marcou a letra b (correta);

O grupo B marcou a letra b;

O grupo C marcou a letra b;

O grupo D marcou a letra d;

O grupo E marcou a letra b.

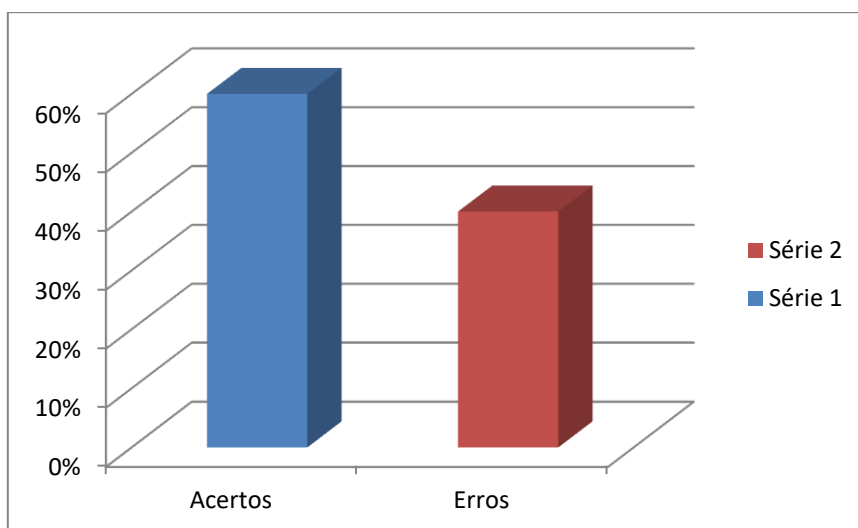
QUESTÃO 01

O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a solução utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoina, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- 2,3-dimetilnaftol
- 2,4-dimetilnaftol
- 2,5-dimetilnaftol
- 2,6-dimetilnaftol
- 2,7-dimetilnaftol

Questão 2:

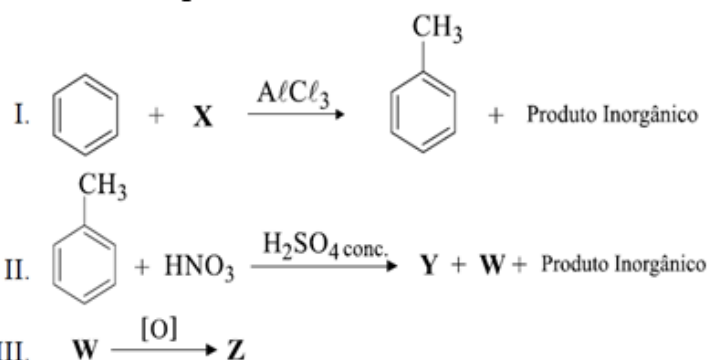


(52)

- O grupo A marcou a letra e (correta);
- O grupo B marcou a letra a;
- O grupo C marcou a letra a;
- O grupo D marcou a letra e;
- O grupo E marcou a letra e.

 QUESTÃO 02

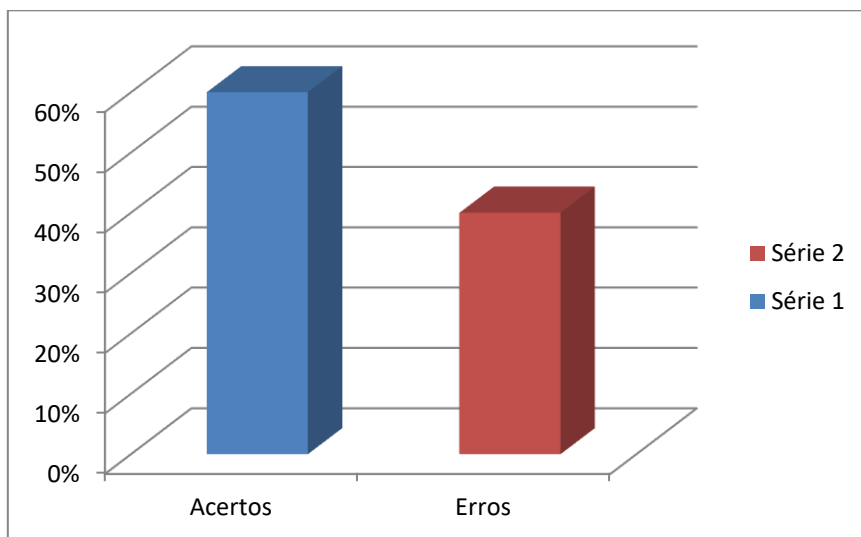
Durante a síntese química do composto orgânico **Z**, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que **X**, **Y**, **W** e **Z** são, respectivamente,

- cloreto de metanoíla, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.
- cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeído.
- cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico.
- cloreto de metanoíla, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeído.
- cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.

Questão 3:



(53)

O grupo A marcou a letra a (correta);

O grupo B marcou a letra a;

O grupo C marcou a letra c;

O grupo D marcou a letra a;

O grupo E marcou a letra b.

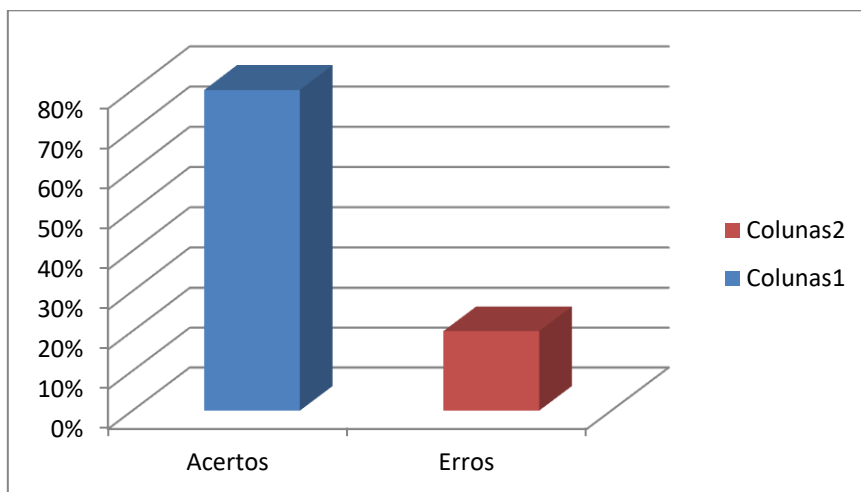
 QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzóico com etanonitrila?

- Ácido m-ciano-benzóico.
- Ácido o-ciano-benzeno.
- Ácido p-ciano-benzóico.
- Ácido p-ciano-benzeno.
- Ácido m-carbilamina-benzóico.

Questão 4:



(54)

O grupo A marcou a letra c (correta);

O grupo B marcou a letra c;

O grupo C marcou a letra c;

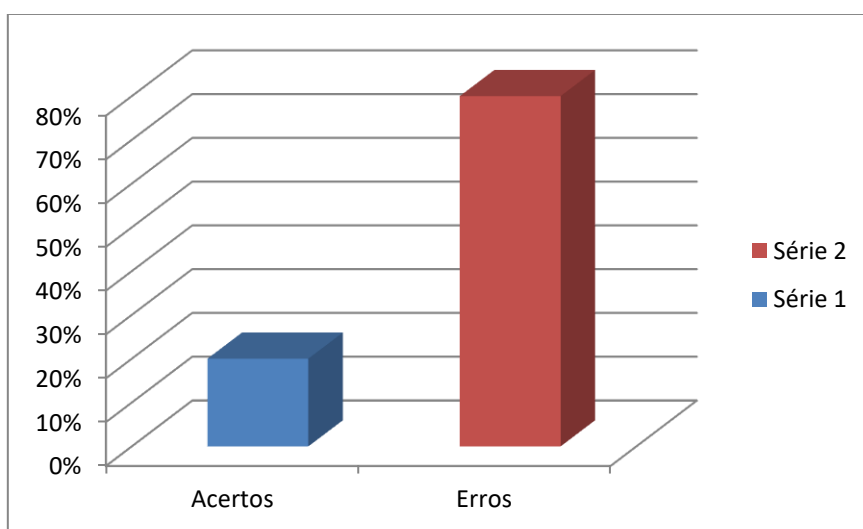
O grupo D marcou a letra c;

O grupo E marcou a letra a;

QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) $X = H$
- b) $X = Fe$
- c) $X = Cl$
- d) $X = Br$
- e) $X = I$



(55)

Questão 5:

- O grupo A marcou a letra a;
- O grupo B marcou a letra a;
- O grupo C marcou a letra d;
- O grupo D marcou a letra b (correta);
- O grupo E marcou a letra a.

QUESTÃO 05

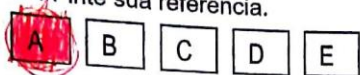
Considere os seguintes ácidos:

- I. CH_3COOH
- II. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$
- III. $\text{CH}_2\text{ClCH}_2\text{COOH}$
- IV. $\text{CHCl}_2\text{CH}_2\text{COOH}$
- V. $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{COOH}$

Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) $\text{I} < \text{II} < \text{III} < \text{IV} < \text{V}$
- b) $\text{II} < \text{I} < \text{III} < \text{IV} < \text{V}$
- c) $\text{II} < \text{I} < \text{V} < \text{IV} < \text{III}$
- d) $\text{III} < \text{IV} < \text{V} < \text{II} < \text{I}$
- e) $\text{V} < \text{IV} < \text{III} < \text{II} < \text{I}$

GRUPO : Pinte sua referência.

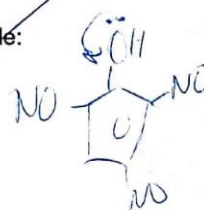
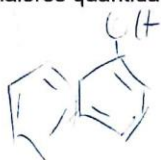


QUESTÃO 01

O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a substância utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoína, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

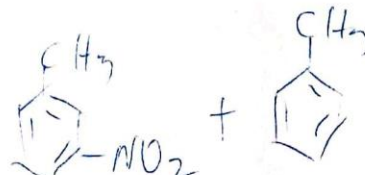
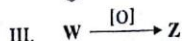
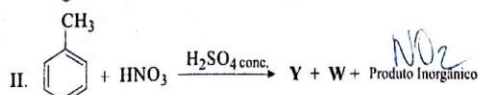
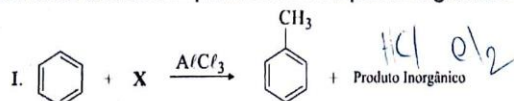
A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- a) 2,3-dimetilnaftol
~~b) 2,4-dimetilnaftol~~
 c) 2,5-dimetilnaftol
 d) 2,6-dimetilnaftol
 e) 2,7-dimetilnaftol



QUESTÃO 02

Durante a síntese química do composto orgânico Z, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que X, Y, W e Z são, respectivamente,

- a) cloreto de metanoila, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.
 b) cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeído.
 c) cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico.
 d) cloreto de metanoila, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeído.
~~e) cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.~~

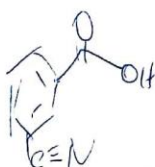
QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzoico com etanonitrila?



- a) Ácido m-ciano-benzóico.
 b) Ácido o-ciano-benzeno.
 c) Ácido p-ciano-benzóico.
 d) Ácido p-ciano-benzeno.
 e) Ácido m-carbilamina-benzóico.



C

QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) X = H
 b) X = Fe
 c) X = Cl
 d) X = Br
 e) X = I

C

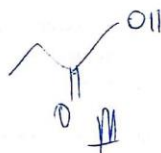
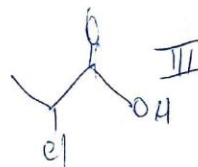
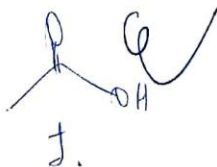
QUESTÃO 05

Considere os seguintes ácidos:

- I. CH_3COOH
 II. CH_3CH_2COOH
 III. CH_2ClCH_2COOH
 IV. $CHCl_2CH_2COOH$
 V. CCl_3CH_2COOH

Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) I < II < III < IV < V
 b) II < I < III < IV < V
 c) II < I < V < IV < III
 d) III < IV < V < II < I
 e) V < IV < III < II < I



GRUPO : Pinte sua referência.

A B C D E

QUESTÃO 01

O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a solução utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoína, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

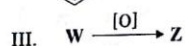
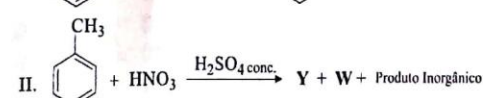
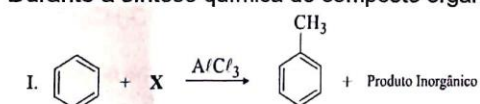
A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- a) 2,3-dimetilnaftol
 b) 2,4-dimetilnaftol
 c) 2,5-dimetilnaftol
 d) 2,6-dimetilnaftol
 e) 2,7-dimetilnaftol



QUESTÃO 02

Durante a síntese química do composto orgânico Z, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que X, Y, W e Z são, respectivamente,

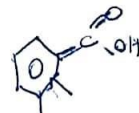
- a) cloreto de metanoíla, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico. \uparrow
 b) cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeído. \downarrow
 c) cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico. \uparrow
 d) cloreto de metanoíla, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeído.
 e) cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico. \uparrow

QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzóico com etanonitrila?

- a) Ácido m-ciano-benzóico.
 b) Ácido o-ciano-benzeno.
 c) Ácido p-ciano-benzóico.
 d) Ácido p-ciano-benzeno.
 e) Ácido m-carbilamina-benzóico.



QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) $X = H$
 b) $X = Fe$
 c) $X = Cl$
 d) $X = Br$
 e) $X = I$



QUESTÃO 05

Considere os seguintes ácidos:

- I. CH_3COOH
 II. CH_3CH_2COOH
 III. CH_2ClCH_2COOH
 IV. $CHCl_2CH_2COOH$
 V. CCl_3CH_2COOH



Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) $I < II < III < IV < V$
 b) $II < I < III < IV < V$
 c) $II < I < V < IV < III$
 d) $III < IV < V < II < I$
 e) $V < IV < III < II < I$



GRUPO : Pinte sua referência.

A
 B
 C
 D
 E

QUESTÃO 01

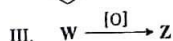
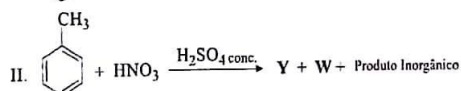
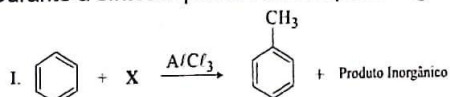
O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a solução utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoina, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- a) 2,3-dimetilnaftol
 b) 2,4-dimetilnaftol
 c) 2,5-dimetilnaftol
 d) 2,6-dimetilnaftol
 e) 2,7-dimetilnaftol

QUESTÃO 02

Durante a síntese química do composto orgânico Z, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que X, Y, W e Z são, respectivamente,

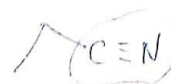
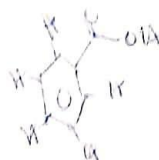
- a) cloreto de metanoíla, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.
 b) cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeído.
 c) cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico.
 d) cloreto de metanoíla, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeído.
 e) cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.

QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzóico com etanonitrila?

- a) Ácido m-clano-benzóico.
 b) Ácido o-clano-benzeno.
 c) Ácido p-clano-benzóico.
 d) Ácido p-clano-benzeno.
 e) Ácido m-carbílamina-benzóico.



QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) $X = H$
 b) $X = Fe$
 c) $X = Cl$
 d) $X = Br$
 e) $X = I$



QUESTÃO 05

Considere os seguintes ácidos:

- I. CH_3COOH
 II. CH_3CH_2COOH
 III. CH_2ClCH_2COOH
 IV. $CHCl_2CH_2COOH$
 V. CCl_3CH_2COOH

Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) $I < II < III < IV < V$
 b) $II < I < III < IV < V$
 c) $II < I < V < IV < III$
 d) $III < IV < V < II < I$
 e) $V < IV < III < II < I$



GRUPO : Pinte sua referência.

A B C D E

QUESTÃO 01

O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a solução utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoina, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

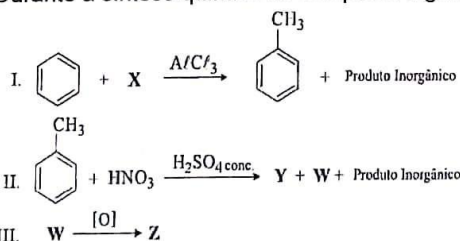
A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- a) 2,3-dimetilnaftol
 b) 2,4-dimetilnaftol
 c) 2,5-dimetilnaftol
 d) 2,6-dimetilnaftol
 e) 2,7-dimetilnaftol

E

QUESTÃO 02

Durante a síntese química do composto orgânico Z, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que X, Y, W e Z são, respectivamente,

- a) cloreto de metanoíla, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.
 b) cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeído.
 c) cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico.
 d) cloreto de metanoíla, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeído.
 e) cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.

QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzoico com etanonitrila?

- a) Ácido m-ciano-benzóico.
b) Ácido o-ciano-benzeno.
c) Ácido p-ciano-benzóico.
d) Ácido p-ciano-benzeno.
e) Ácido m-carbilamina-benzóico.

QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) $X = H$
b) $X = Fe$
 c) $X = Cl$
d) $X = Br$
e) $X = I$

QUESTÃO 05

Considere os seguintes ácidos:

- I. CH_3COOH
II. CH_3CH_2COOH
III. CH_2ClCH_2COOH
IV. $CHCl_2CH_2COOH$
V. CCl_3CH_2COOH

Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) $I < II < III < IV < V$
 b) $II < I < III < IV < V$
c) $II < I < V < IV < III$
d) $III < IV < V < II < I$
e) $V < IV < III < II < I$

GRUPO : Pinte sua referência.

A B C D

QUESTÃO 01

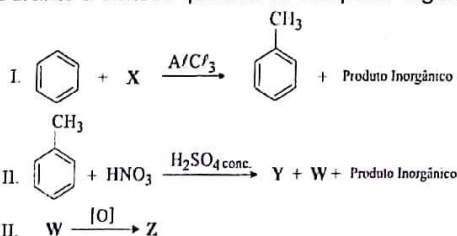
O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a solução utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoina, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- a) 2,3-dimetilnaftol
 b) 2,4-dimetilnaftol
 c) 2,5-dimetilnaftol
 d) 2,6-dimetilnaftol
 e) 2,7-dimetilnaftol

QUESTÃO 02

Durante a síntese química do composto orgânico Z, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que X, Y, W e Z são, respectivamente,

- a) cloreto de metanoila, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.
 b) cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeído.
 c) cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico.
 d) cloreto de metanoila, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeído.
 e) cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.

QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzoico com etanonitrila?

- a) Ácido m-ciano-benzóico.
b) Ácido o-ciano-benzeno.
c) Ácido p-ciano-benzóico.
d) Ácido p-ciano-benzeno.
e) Ácido m-carbilamina-benzóico.

E

QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) X = H
b) X = Fe
c) X = Cl
d) X = Br
e) X = I

E

QUESTÃO 05

Considere os seguintes ácidos:

- I. CH_3COOH
II. CH_3CH_2COOH
III. CH_2ClCH_2COOH
IV. $CHCl_2CH_2COOH$
V. CCl_3CH_2COOH

Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) I < II < III < IV < V
b) II < I < III < IV < V
c) II < I < V < IV < III
d) III < IV < V < II < I
e) V < IV < III < II < I

E

8.3 SEGUNDO ENCONTRO

Foi realizado na mesma sala de química do primeiro encontro. Participaram cinco (5) grupos sendo que dois (2) alunos formaram quatro (4) grupos e um (1) grupo formado por (5) pessoas, neste grupo cinco (5) os alunos resolveram agrupar-se assim. Novamente foi usado o projetor de multimídia. O tempo utilizado foi de 20 minutos. Os alunos conheceram e interagiram com a primeira página do simulador.



(56)

Após a interação com a primeira página do software, o professor, através de uma dinâmica moderna, procurou identificar o que os discentes sabiam sobre orientação no anel benzênico mononuclear e polinuclear com núcleos condensado e Efeito Indutivo estático negativo em Ácidos Carboxílico (Efeito -Is), complementando na lousa os seus conhecimentos atrelando a sua explicação aos dados fornecidos no software. Em um primeiro momento, os alunos e o mediador discutiram sobre os diferentes tipos de cisão: a Cisão Homolítica gerando radicais livres e a Cisão Heterolítica gerando eletrófilo e nucleófilo. Em seguida, a discussão envolveu a reação de substituição eletrofílica no benzeno. Uma vez que o benzeno estava substituído, foi introduzido o conceito de orientação no anel benzênico orto-para e meta. Aproveitou-se, também, em um segundo momento, para debater sobre a substituição eletrofílica nos anéis aromáticos com núcleos condensados com situações que orientam o eletrófilo no anel substituído e também situações que orienta o eletrófilo no anel não substituído.

Em um terceiro momento, os alunos tiveram com o mediador um debate sobre mecanismo de ionização nos Ácidos Carboxílicos e os fatores que aumentam a acidez, ou seja, a Indução Estática negativa e os fatores que aumentam e diminuem sua acidez.

8.4 AVALIAÇÃO DA METODOLOGIA UTILIZADA NA APLICAÇÃO

Para a avaliação da metodologia utilizada na aplicação do uso de simulação, fizemos um (1) questionário composto por seis (6) questões subjetivas, conforme Apêndice B, que foram respondidas individualmente pelos cinco (5) grupos presentes na última apresentação num tempo de 20 minutos. Lembrando que a simulação foi apresentada aos alunos do 7º período de Licenciatura em química da UFRPE 2019, com o conteúdo baseado na grade do curso. A grande maioria dos 5 grupos sendo que quatro (4) grupos com dois (2) alunos e um grupo com cinco (5), neste grupo cinco (5) os alunos resolveram agrupar-se assim, sendo então, identificados como A, B, C, D e E. Os alunos responderam positivamente quanto ao uso do recurso didático e da metodologia empregada, mostrando que o uso de simulação é um excelente instrumento na complementação do ensino/aprendizagem.

Questão 1) O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

Resposta do grupo A: Sim, pois mostrou uma nova forma de aprender o conteúdo.

Resposta do grupo B: Sim, através de maneira didática o software ajudou a compreender de fato o porquê acontecem as orientações (orto, meta e para)nas moléculas, através do conhecimento da carga líquida.

Resposta do grupo C: Sim, porque foi possível visualizar e também é bastante atrativo e convidativo.

Resposta do grupo D: Sim.

Resposta do grupo E: Sim, ele complementa muito bem o assunto.

Podemos observar que 100% de nossos alunos aprovaram a intervenção didática, o que nos anima quanto ao uso de simulação no conteúdo de previsão de acidez, orientação no anel aromático, consolidando nossa proposta. O grupo D

faltou complementar a pergunta com uma justificativa para melhor avaliarmos esses alunos, fazendo com que eles falem mais sobre o uso da abordagem e como eles entenderam a aplicação da simulação.

Questão 2) A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

Resposta do grupo A: Sim, pois no simulador não há instruções.

Resposta do grupo B: Sim, ele procurou caminhos que chegassem à compreensão do conteúdo sem que houvesse uma bagagem de conhecimento por parte dos alunos.

Resposta do grupo C: Sim, mostrou ter experiência e ficou a vontade com a turma. Mostrou também dominação do conhecimento ao especificar.

Resposta do grupo D: Sim.

Resposta do grupo E: Sim, pois através da mistura entre a aula no quadro e do software, foi possível compreender melhor a Teoria do Orbital Molecular.

Podemos ver que 100% dos cinco (5) grupos responderam que nossa abordagem foi feita de uma maneira que melhorou o conhecimento sobre a carga líquida. O grupo D faltou complementar a pergunta com uma justificativa para melhor avaliarmos esses alunos, fazendo com que eles falem mais sobre o mediador.

Questão 3) O que você acha que poderia ser melhorado no software?

Resposta do grupo A: Acrescentar mais moléculas e mais radicais. E ter instrução no programa.

Resposta do grupo B: Acrescentar mais moléculas e possibilidades de se inserir reações inorgânicas ou incluir mecanismos de reações orgânicas.

Resposta do grupo C: Colocar mais moléculas.

Resposta do grupo D: Mais moléculas.

Resposta do grupo E: Apenas a quantidades de moléculas e os grupos saturados e insaturados.

Os cinco (5) grupos foram unânimes em propor um aumento no número de moléculas, radicais saturados e insaturados no software. Isto prova, mais uma vez, a qualidade e utilidade do nosso trabalho na fomenta da aprendizagem significativas.

Questão 4) Os simuladores melhoram a interação dos alunos com as aulas?

Resposta do grupo A: Sim, pois é diferente das aulas tradicionais.

Resposta do grupo B: Com certeza muda o tradicional, qualquer aluno é despertado por curiosidade e questionamento sobre como acontecem as reações.

Resposta do grupo C: Com certeza, o uso dessa tecnologia é algo que atrai os jovens.

Resposta do grupo D: Sim.

Resposta do grupo E: Além de motivá-los, o software aproxima ainda mais o conteúdo aplicado em salas de aula.

Notamos que 100% dos alunos responderam que, com a simulação, houve uma maior interação da turma com eles mesmos, o que nos dá a certeza que alcançamos nosso objetivo que é estimular o interesse de nossos alunos. O grupo D faltou complementar a pergunta com uma justificativa para melhor avaliarmos esses alunos, fazendo com que eles falem mais sobre a interação dos alunos com as aulas.

Questão 5) Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

Resposta do grupo A: Sim, para sair das aulas tradicionais normalmente dadas.

Resposta do grupo B: Sim, como forma de auxiliar minha aplicação.

Resposta do grupo C: Não, nunca utilizei.

Resposta do grupo D: Não, normalmente.

Resposta do grupo E: Sim.

A pergunta nos mostra que 60% dos cinco (5) dos grupos aprovam o uso da simulação computacional como ferramenta no ensino do conteúdo de previsão de acidez e carga líquida e sua principal aplicação, que é a transposição deste assunto

para o ensino médio. Por outro lado, 40% dos cinco (5) dos grupos responderam que não, normalmente e não, nunca tinha utilizado.

Questão 6) Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?

Esta pergunta visava positivar a Teoria de Ausubel, uma vez que, para ocorrer a aprendizagem significativa, o discente deve explicar com suas palavras a reação cobrada na questão. As respostas dadas pelos aprendizes estão registradas nos questionários abaixo. Vale salientar que os alunos do grupo B não responderam esta pergunta.

Início: 19:49

Término: 20:22

Aluno: Pinte sua referência.

A	B	C	D	E	F	G	H	J
---	---	---	---	---	---	---	---	---

QUESTÃO 01

O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

Sim. Pois mostrou uma nova forma de aprender o conteúdo.

QUESTÃO 02

A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

Sim. Pois no simulador não há instruções.

QUESTÃO 03

O que você acha que poderia ser melhorado no software?

Adicionar mais moléculas e mais radicais. E ter instruções no programa.

QUESTÃO 04

Os simuladores melhoram a interação dos alunos com a aula?

Sim. Pois, é diferente das aulas tradicionais.



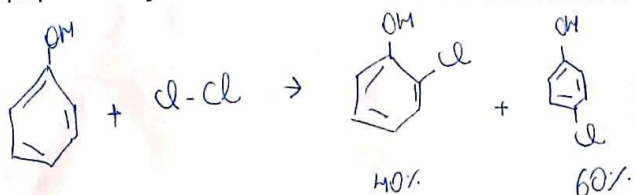
QUESTÃO 05

Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

Sim. Para fazer as aulas tradicionais normalmente dadas.

QUESTÃO 06

Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?



O software mostra as cargas líquidas de todos os carbonos de anel aromático, sendo as maiores cargas nas posições orto-para.

Início:

Término:

Aluno: Pinte sua referência.

A	B	C	D	E	F	G	H	<input checked="" type="checkbox"/>
---	--------------	---	---	---	---	---	---	-------------------------------------

QUESTÃO 01

O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

Sim através da maneira didática o software ajudou a compreender de fato o que acontece com as orientações (ento, mata e para) nas moléculas, através do conhecimento de cargas líquidas.

QUESTÃO 02

A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

Sim, ele procurou caminhos que chegassem à compreensão do conteúdo sem que houvesse uma abordagem de conhecimento por parte dos alunos.

QUESTÃO 03

O que você acha que poderia ser melhorado no software?

Aumentar mais moléculas e possibilidade de se inserir reações inorgânicas ou incluir mecanismo de reações orgânicas.

QUESTÃO 04

Os simuladores melhoram a interação dos alunos com a aula?

Com certeza, mudou o tradicional, qualquer aluno é despertado por curiosidade e questionamentos sobre como acontecem as reações.

QUESTÃO 05

Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

Sim, como forma de auxiliar minha aplicação.

QUESTÃO 06

Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?



Início:

Término:

Aluno: Pinte sua referência.

A B C D E F G H J

QUESTÃO 01

O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

Sim, porque foi possível visualizar e também é bastante atrativo e simples de usar.

QUESTÃO 02

A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

Sim, porque há diversidade e muita variedade com as aulas. Há, inclusive, também, técnicas de ensino ao explicar.

QUESTÃO 03

O que você acha que poderia ser melhorado no software?

Colocar mais módulos.

QUESTÃO 04

Os simuladores melhoram a interação dos alunos com a aula?

Concretiza o uso da tecnologia e algo que atrai os alunos.



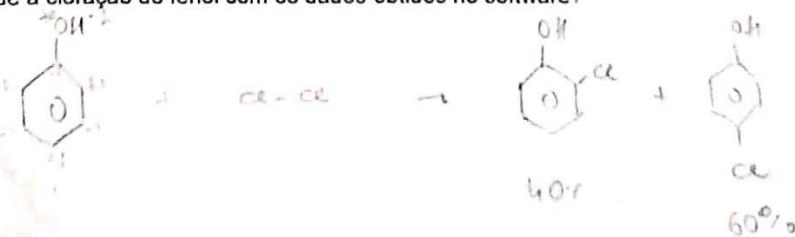
QUESTÃO 05

Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

Não, nunca utilizei.

QUESTÃO 06

Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?



Início:

Término:

Aluno: Pinte sua referência.

A B C D E F G H J

QUESTÃO 01

O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

Sim.

QUESTÃO 02

A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

Sim

QUESTÃO 03

O que você acha que poderia ser melhorado no software?

Mais moléculas

QUESTÃO 04

Os simuladores melhoram a interação dos alunos com a aula?

Sim

QUESTÃO 05

Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

Não normalmente.

QUESTÃO 06

Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?

A elaboração leva em conta valores de carga líquida, orientando automaticamente onde ocorre a substituição em relação aos diferentes substituintes presente na molécula.

Início:

Término:

Aluno: Pinte sua referência.

A B C D E F G H J

QUESTÃO 01

O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

Sim. Ele complementa muito bem o assunto.

QUESTÃO 02

A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

Sim, pois através da mistura entre a aula no quadro e do software, foi possível compreender melhor a Teoria do Orbital Molecular.

QUESTÃO 03

O que você acha que poderia ser melhorado no software?

Apenas a quantidade de moléculas e os grupos saturados e insaturados.

QUESTÃO 04

Os simuladores melhoram a interação dos alunos com a aula?

Além de motivá-los, o software aproxima ainda mais o conteúdo aplicado em sala de aula.



QUESTÃO 05

Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

Sim.

QUESTÃO 06

Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?

Pelos cálculos obtidos através do HyperChem, foi possível observar que a cloração do fenol irá acontecer majoritariamente nas posições orto e para.

9.0 CONCLUSÃO

A experiência que tivemos com a aplicação do produto educacional apresentado nesta dissertação nos mostrou que o uso de simulações em sala de aula nos dias atuais se tornou muito importante, pois elas auxiliam o professor a apresentar os conceitos por conseguir mostrar uma imagem dinâmica em uma linguagem computacional prontamente absorvida pela geração digital. As respostas dadas pelos alunos nos questionários que eles responderam mostraram que o uso do software exerceu grande influência, que podemos observar nas respostas dadas nos questionários.

Como produto educacional, buscaremos elaborar também um manual para o professor de ensino médio com o conteúdo explicativo sobre a Teoria do Orbital Molecular para que o professor melhore seus conhecimentos sobre o assunto e com orientação sobre a dinâmica a ser seguida em sala de aula. Dessa forma o professor de Química do Ensino Médio disporá de mais um material didático que explora a Teoria Quântica e sua aplicação.

Propomos uma maneira diferente e motivadora na abordagem de parâmetros importante no estudo da estrutura eletrônica de moléculas como a carga líquida sobre átomos e sua relação com a reatividade das moléculas. Percebemos que o uso da simulação engajou mais o aluno durante a aula. Considerando, ainda, a análise das atividades realizadas pelos alunos, observamos que seu conhecimento prévio sobre o tema, ou seja, números quânticos, ligações químicas, substituição eletrofílica e orientação no anel aromático, era evocado antes de cada simulação, levando-o a organizar a ideia sobre o assunto em questão antes de ter a oportunidade de observar a simulação. Acreditamos que o material é potencialmente significativo levando o aprendiz a uma aprendizagem significativa com derivação progressiva.

Nossas escolas, sobretudo as do ensino médio, estão, em sua maioria, desprovidas de bons recursos tecnológicos tais como, laboratórios de informática equipados, meios interativos entre outros. Contudo, grande parte das escolas possuem projetores e computadores que podem ser utilizados na sala de aula e o software é totalmente gratuito para download e encontra-se na página do mestrado profissional em química.

Queremos alertar que as simulações não substituem as experiências em um laboratório convencional de química, sendo seu uso uma ferramenta complementar para o entendimento de conceito e fenômenos, conforme a metodologia utilizada por cada professor. Como perspectivas, escreveremos um artigo relacionado com o Tema proposto da dissertação além de apresentar o software aos alunos do Terceiro (3) Ano do Ensino Médio de Escolas Oficiais do Estado de Pernambuco.

REFERÊNCIAS

ARAGÃO, R.M.R. **A teoria da Aprendizagem Significativa de David P. Ausubel.** Tese de Doutorado- UNICAMP, 1976.

ATKINS.;JONES,L. **Princípios da Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente.**3.ed.Porto Alegre:Bookman,2016.Trad Ricardo Bicca de Alenestro.

ATKINS.;JONES,L. **Quanta Matéria e Mudança.** LTC:Bookman,2011.Trad Ricardo Bicca de Alenestro.

AUSUBEL, D.P., NOVK, J.D e HANESIAN, H. **Psicologia educacional.** Rio de Janeiro, Interamericana, 1980.

BARDIN, Laurence. **Análise de conteúdo.** 4. ed. Lisboa: Edições70, 2010. BEDANI, Marcelo. **Valores, práticas e criatividade organizacional: estudo do perfil cultural de uma instituição bancária.** 2008. 318 f. Tese (Doutorado) – Universidade Nacional de Brasília, Instituto de Psicologia, Brasília, 2008. Disponível em: . Acesso em: 01 fev. 2019.

BARBETA, Vagner Bernal; BECHARA, José Maria. **Uso de simulações em computador em aulas de laboratório de física.** In: CONGRESSO BRASILEIRO DE EDUCAÇÃO EM ENGENHARIA (COBENGE), 24, 1996, Manaus, AM. Anais... Passo Fundo: Universidade de Passo Fundo, 1996. Disponível em: <<http://br.geocities.com/vbarbeta/artigos.htm>>. Acesso em 22 abr. 2019.

BRAATHEN, P. C. **Aprendizagem mecânica e aprendizagem significativa no processo de ensino-aprendizagem de Química.** Revista Eixo. N° 1, vol. 1, Jan-jun, 2012. Disponível em: <<http://revistaeixo.ifb.edu.br/index.php/RevistaEixo/article/view/53/29>>. Acessado em: 15 julho 2019.

BRASIL. Parâmetros Curriculares Nacionais: Ensino Fundamental. Brasília: Ministério da Educação. Secretaria de Educação Fundamental. 1999.

BUNGE, A. v., ; Introdução a Química Quântica 1ª Edição, São Paulo, EDITORA Edgard Blucher, 1977.

CHASSOT, A. **A Alfabetização Científica: Uma possibilidade para a inclusão social**. Revista Brasileira de Educação, n.10,p11-13,Nov 1999.

CHASSOT, A. **Sobre prováveis modelos de ligações**, Química Nova na Escola, n, p. 1, 1996.

FARIA, W. de. **Aprendizagem e planejamento de ensino**. São Paulo, Ática, 1989.

MEDEIROS, Alexandre; MEDEIROS, Cleide Farias de. **Possibilidades e limitações das simulações computacionais no ensino da física**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 24, n. 2, (p.77-86). São Paulo: 2002.

MILAN,TRSIC,MELISSA. **Química Quântica; Fundamentos e aplicação**. 1ª Edição , São Paulo, EDITORA ç, 1990.

MOREIRA, M. A. e MASSINI, E. F. S. **Aprendizagem Significativa, a teoria de Ausubel**. São Paulo. Centauro. 2001.

MOREIRA. M A. **Teoria de Aprendizagem**. São Paulo. EPU, 1999.

MOREIRA. M. A. **A teoria da aprendizagem significativa e sua implementação em sala de aula**. Brasília, UNB. 2006.

MORGON, Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular-Livraria da Física- São Paulo 2007.

OLIVAL, **Teoria Quântica – Estudos históricos e implicações culturais**- Livraria da física 2011.

PAULING,L. The nature of chemical bond-1990, Journal of the Chemical Education, v. 67, n4, p.281-280,1990.

PELIZZARI, A. et al. **Teoria da aprendizagem Significativa segundo Ausubel.** Rev. PEC, Curitiba, v. 2, n.1, p.37-42, jul.2001-jul.2002.

VALENTE, José Armando. **Diferentes usos do computador na educação.** Campinas: Unicamp: 1995a. Disponível em: <<http://www.nied.unicamp.br/publicacoes/separatas/Sep1.pdf>>. Acesso em 12 jan. 2019.

VALENTE, José Armando. **Por quê o computador na educação.** Campinas: Unicamp: 1995b. Disponível em: <<http://www.nied.unicamp.br/publicações/separatas/Sep2.pdf>>. Acesso em 12 jan. 2019.

VALENTE, José Armando. **O uso inteligente do computador na educação.** Campinas: Unicamp: 1995c. Disponível em: <<http://www.proinfo.mec.gov.br/upload/biblioteca/215.pdf>>. Acesso em 14 jan. 2019.

APÊNDICE A - Roteiro de atividades do aluno “Prova objetiva”.

QUESTÃO 01

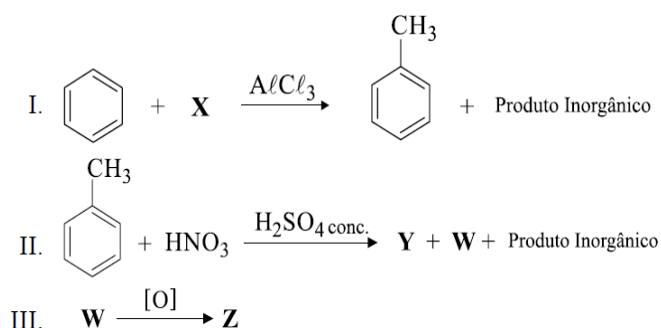
O Alfa-Naftol ($C_{10}H_8O$) é a solução utilizada para a realização do Teste de Voges-Proskauer (VP), um procedimento em bacteriologia que consiste na fermentação de bactérias pela via butilenoglicólica. O Alfa-Naftol tem a finalidade de fermentar glicose para que ocorra a produção de acetoína, um líquido incolor com cheiro amanteigado. Durante a realização do teste, a adição do Alfa-Naftol provoca a catálise indicando um anel na cor vermelho, enquanto que a cor amarelo indica o resultado negativo.

A alquilação do α -naftol produz em maiores quantidades uma mistura de:

- a) 2,3-dimetilnaftol
- b) 2,4-dimetilnaftol
- c) 2,5-dimetilnaftol
- d) 2,6-dimetilnaftol
- e) 2,7-dimetilnaftol

QUESTÃO 02

Durante a síntese química do composto orgânico Z, adotou-se a seguinte rota sintética:



Após a realização da síntese, pode-se afirmar que X, Y, W e Z são, respectivamente,

- a) cloreto de metanoíla, p-nitrotolueno, o-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.
- b) cloreto de metila, o-aminotolueno, m-aminotolueno e m-aminobenzaldeido.
- c) cloreto de metila, o-aminotolueno, p-aminotolueno e ácido p-aminobenzoico.
- d) cloreto de metanoíla, o-nitrotolueno, m-nitrotolueno e m-nitrobenzaldeido.
- e) cloreto de metila, o-nitrotolueno, p-nitrotolueno e ácido p-nitrobenzoico.

QUESTÃO 03

O ácido benzoico, C_6H_5COOH , é um composto aromático classificado como ácido carboxílico (ou especificamente, ácido monocarboxílico). Este ácido fraco e seus sais são usados como conservante de alimentos e ocorre naturalmente em certas plantas.

Qual o produto majoritário de uma reação do ácido benzóico com etanonitrila?

- a) Ácido m-ciano-benzóico.
- b) Ácido o-ciano-benzeno.
- c) Ácido p-ciano-benzóico.
- d) Ácido p-ciano-benzeno.
- e) Ácido m-carbilamina-benzóico.

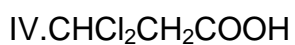
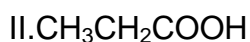
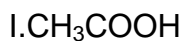
QUESTÃO 04

Seja um ácido orgânico de fórmula geral XCH_2COOH , onde X poderá ser substituído por H, Fe, Cl, Br ou I. Pergunta-se: em qual dos casos o ácido será mais fortemente dissociado em solução aquosa?

- a) $X = H$
- b) $X = Fe$
- c) $X = Cl$
- d) $X = Br$
- e) $X = I$

QUESTÃO 05

Considere os seguintes ácidos:



Identifique a opção que contém a sequência correta para a ordem crescente de caráter ácido:

- a) $\text{I} < \text{II} < \text{III} < \text{IV} < \text{V}$
- b) $\text{II} < \text{I} < \text{III} < \text{IV} < \text{V}$
- c) $\text{II} < \text{I} < \text{V} < \text{IV} < \text{III}$
- d) $\text{III} < \text{IV} < \text{V} < \text{II} < \text{I}$
- e) $\text{V} < \text{IV} < \text{III} < \text{II} < \text{I}$

APÊNDICE B - Roteiro subjetivo de atividades do aluno

QUESTÃO 01

O software ajudou você a melhorar sua compreensão sobre o conteúdo?

QUESTÃO 02

A abordagem do mediador favoreceu o entendimento sobre o assunto?

QUESTÃO 03

O que você acha que poderia ser melhorado no software?

QUESTÃO 04

Os simuladores melhoram a interação dos alunos com a aula?

QUESTÃO 05

Você utilizaria normalmente a simulação computacional nas suas atividades pedagógicas?

QUESTÃO 06

Explique a cloração do fenol com os dados obtidos no software?