

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
CENTRO MULTIDISCIPLINAR UFRJ-MACAÉ
INSTITUTO MULTIDISCIPLINAR DE QUÍMICA
NÚCLEO DE QUÍMICA TEÓRICA E COMPUTACIONAL DE MACAÉ

JÚLIO DE PAULA CAMPBELL OLIVEIRA

PRÁTICAS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA GERAL EM
CURSOS DE GRADUAÇÃO

MACAÉ

2023

JÚLIO DE PAULA CAMPBELL OLIVEIRA

PRÁTICAS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA GERAL EM
CURSOS DE GRADUAÇÃO

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao curso de Licenciatura em Química do Instituto Multidisciplinar de Química do Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciado em Química.

Orientador: Prof. Dr. Diego Fernando da Silva Paschoal

MACAÉ – RJ
2023

CIP - Catalogação na Publicação

O48

Oliveira, Júlio de Paula Campbell

Práticas de química computacional no ensino de Química Geral em cursos de graduação / Júlio de Paula Campbell Oliveira - Macaé, 2023.

75 f.

Orientador(a): Diego Fernando da Silva Paschoal

Trabalho de conclusão de curso (graduação) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto Multidisciplinar de Química, Licenciado em Química, 2023.

1. Química computacional. 2. Ensino de Química. 3. Tecnologias digitais.
4. Programa de computador. I. Paschoal, Diego fernando da Silva, orient. II. Título.

CDD 540.7

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca com os dados
fornecidos pelo(a) autor(a)

Biblioteca Central do Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé

Bibliotecário: Anderson dos Santos Guarino CRB7 – 5280

Júlio de Paula Campbell Oliveira

Práticas de Química Computacional no ensino de Química Geral em cursos de graduação

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao curso de Licenciatura em Química do Instituto Multidisciplinar de Química do Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciado em Química.

Macaé, 13 de janeiro de 2023.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Diego Fernando da Silva Paschoal (Presidente da Banca)
Instituto Multidisciplinar de Química, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, UFRJ
<http://lattes.cnpq.br/2814348897103695>

Prof. Dr. Tiago Lima da Silva
Instituto Multidisciplinar de Química, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, UFRJ
<http://lattes.cnpq.br/3937046669738188>

Prof. Dr. Willian Tássio Gomes Novato
Instituto Multidisciplinar de Química, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, UFRJ
<http://lattes.cnpq.br/7402297829650438>

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus. Agradeço, também aos meus familiares que estiveram comigo durante essa caminhada, de forma especial meus pais Paulo César e Elenicy, meus tios Adalberto e Elizabete, e meu irmão Breno. Agradeço aos meus amigos que sempre me auxiliaram, de forma especial ao Maurício e Wagner, João Pedro e Patrick. Agradeço aos meus companheiros e amigos do nosso grupo de pesquisa (NQTCM), especialmente a Catherine e Letícia que – também – me auxiliaram na aplicação das atividades desse trabalho. Agradeço aos professores que puderam contribuir de alguma forma durante esse período de forma especial Ana Lúcia e Robson e Diego, orientador e amigo.

“Nenhuma grande descoberta foi feita jamais sem um palpite ousado.”

Isaac Newton

“Se a meta de um capitão fosse preservar seu barco, ele o conservaria no porto para sempre.”

Santo Tomás de Aquino

RESUMO

A Química Computacional usa de métodos matemáticos para calcular propriedades moleculares, realizar simulações moleculares, dentre outros. As ferramentas computacionais usadas nessa área podem contribuir para o processo de ensino-aprendizagem dos alunos, auxiliando-os na visualização espacial e desenvolvimento do pensamento abstrato, entre outros aspectos. A partir disso, o presente trabalho desenvolveu e aplicou um conjunto de atividades didáticas, com o programa Avogadro, abordando os conteúdos de estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação), geometria molecular, estequiometria, momento de dipolo, polaridade e teoria do orbital molecular, além de avaliar a efetividade do uso dessa ferramenta durante as atividades. Foram realizadas duas aulas no Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé para os alunos dos cursos de Licenciatura e Bacharelado em Química da unidade, onde foram aplicadas as seis atividades desenvolvidas. Somado a isso, foram construídos dois formulários para serem aplicados antes das aulas e dois formulários para aplicação após as aulas visando avaliar a efetividade do uso do programa Avogadro durante as atividades realizadas. As atividades construídas abordaram diversos conteúdos que foram discutidos nos tópicos trabalhados. Os alunos participantes da pesquisa, após a realização das atividades, relataram que gostariam de usar ferramentas computacionais nas atividades de ensino. O uso do programa Avogadro possibilitou que muitos alunos superassem suas dificuldades nos tópicos abordados. O principal elemento do programa que mostrou efetividade para auxiliar os alunos durante o processo de ensino-aprendizagem foi a visualização espacial. Assim, pode-se concluir que o atual trabalho apresentou o desenvolvimento de seis atividades para o uso no ensino de turmas de graduação em Química, auxiliadas pelo uso do programa Avogadro, além de demonstrar a efetividade do uso do programa durante o processo de ensino-aprendizagem.

Palavras-chave: Química Computacional; Ensino de Química; Avogadro; Tecnologias Digitais.

ABSTRACT

Computational chemistry uses mathematical methods to calculate molecular properties, perform molecular simulations, among others. The computational tools used in this area can contribute to the students during the teaching-learning process, helping them with spatial visualization and the development of abstract thinking, among other aspects. From this, the present work developed and applied a set of didactic activities with the Avogadro program, addressing the contents of molecular structure (bond length and angle), molecular geometry, stoichiometry, dipole moment, polarity and molecular orbital theory, in addition to evaluating the effectiveness of using this tool during activities. Two classes were held at the Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé for students of the undergraduate courses in chemistry at the unit, where six activities were developed. In addition, two forms were constructed to be applied before classes and two forms to be applied after classes in order to evaluate the effectiveness of using the Avogadro program during the activities carried out. The constructed activities address various contents that are discussed in the topics worked on. Students participating in the research after carrying out the activities reported that they would like to use computational tools in teaching activities. The use of the Avogadro program enabled many students to overcome their difficulties in the topics covered. The main element of the program that showed effectiveness in helping students during the teaching-learning process was spatial visualization. Thus, it can be concluded that the current work presented the development of the six activities for use in teaching of undergraduate classes in Chemistry, aided by the use of the Avogadro program, in addition to demonstrating the effectiveness of using the program during the teaching-learning process.

Keywords: Computational Chemistry; Chemistry teaching; Avogadro; Digital Technologies.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES E GRÁFICOS

Figura 1: Classificação dos principais métodos de química computacional.....	14
Figura 2: Níveis de representação do conhecimento químico – triângulo de Johnstone.	16
Figura 3: Etapa inicial do processo da aprendizagem significativa segundo Ausubel.....	17
Figura 4: Etapa final do processo da aprendizagem significativa segundo Ausubel.	18
Figura 5: Moléculas construídas usando o programa Avogadro. (a) água, (b) íon hexaminoníquel(II), (c) nanotubo de carbono, (d) fragmento do ácido desoxirribonucleico (DNA).....	20
Figura 6: Representação do comprimento de ligação de uma molécula AB.	22
Figura 7: Direção da deslocalização de carga devido a diferença de eletronegatividade.	25
Figura 8: Superfície de potencial eletrostático e vetor momento de dipolo para as moléculas de (a) HF e (b) H ₂ O.	26
Figura 9: Desenhando moléculas no Avogadro. (a) Seleção da ferramenta de desenho, (b) configurações de desenhos, (c) interface de desenho e visualização.	31
Figura 10: Otimização de geometria no Avogadro. (a) Seleção da ferramenta de otimização, (b) configurações de otimização.....	31
Figura 11: Ferramenta de medição do programa Avogadro.	32
Figura 12: Comprimento de ligação e ângulo medidos no Avogadro para as moléculas de (a) H ₂ , (b) N ₂ , (c) O ₂ e (d) H ₂ O.....	32
Figura 13: Adição de fragmentos de moléculas no Avogadro. (a) Inserção de fragmentos, (b) seleção do fragmento.	33
Figura 14: Desenhos das moléculas usadas para balancear a reação de combustão do octano.	33
Figura 15: Estruturas otimizadas para as moléculas (a) NH ₃ , (b) SF ₄ , (c) SF ₂ e (d) BF ₃	34
Figura 16: Adição de nanotubos de carbono no programa Avogadro.	35
Figura 17: Alótropos de carbono construídos no programa Avogadro. (a) Nanotubo de carbono, (b) fulereno C ₂₄₀	36
Figura 18: Adição do vetor de momento de dipolo no programa Avogadro.	37
Figura 19: Adição de superfícies de potencial eletrostático no programa Avogadro.	37
Figura 20: Vetor momento de dipolo e superfícies de potencial eletrostático para as moléculas de (a) C ₂ H ₄ O, (b) CH ₃ Cl, (c) BF ₃ , (d) NH ₃ e (e) BCl ₃	38
Figura 21: Parâmetros para criação de superfícies para visualização de orbitais moleculares.	39

Figura 22: Diagrama de energia para o gás oxigênio.....	40
Figura 23: Quantidade de alunos que possuem conhecimento prévio sobre química computacional.....	41
Figura 24: Dificuldades apresentadas e superadas pelos alunos no processo de aprendizagem dos conteúdos de química.....	43
Figura 25: Número de alunos que gostariam de usar programas de química computacional nas atividades de ensino.....	44
Figura 26: Número de alunos que indicaram quais as características estruturais necessárias para a identificação de compostos.....	47
Figura 27: Definição de geometria molecular segundo os alunos participantes das atividades.	48
Figura 28: Alunos que apresentam dificuldades com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.	51
Figura 29: Número de alunos que apresentam dificuldades sobre os conceitos abordados na Teoria do Orbital Molecular (a), (b) tópicos que os alunos possuem dificuldades.	54

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Geometria molecular dos compostos.	22
Tabela 2: Descrição da química computacional na visão dos alunos participantes da atividade.	42
Tabela 3: Vantagens necessárias para o uso dos programas de química computacional no processo de aprendizagem segundo os discentes.	45
Tabela 4: Vantagens observadas pelos alunos após o uso dos programas de química computacional no processo de aprendizagem em química.	45
Tabela 5: Número de alunos que descreveram o conceito de comprimento de ligação de acordo com os tópicos agrupados.	46
Tabela 6: Números de alunos que assinalaram correlação dos tópicos apresentados com os conteúdos abordados em estequiometria e tópicos elencados pelos alunos.	47
Tabela 7: Classificação das moléculas NH_3 , SF_4 e SF_2 quanto sua geometria molecular pelos alunos.	49
Tabela 8: Número de alunos que assinalaram os conteúdos relacionados com os conceitos de alotropia.	50
Tabela 9: Número de alunos que assinaladas dificuldade envolvendo os conteúdos abordados sobre momento de dipolo e polaridade.	51
Tabela 10: Número de alunos que marcaram a opção relacionando os conceitos abordados com o conteúdo de momento de dipolo e polaridade.	52
Tabela 11: Classificação das moléculas quanto a polaridade.	53
Tabela 12: Número de alunos que assinalaram a relação dos conceitos abordados com o conteúdo da Teoria do Orbital Molecular.	55
Tabela 13: Avaliação de parâmetros para a construção do diagrama de orbitais moleculares.	56

LISTA DE QUADROS

Quadro 1: Sequência didática para as aulas realizadas.	29
Quadro 2: Atividade elaborada abordando o tópico estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação).....	30
Quadro 3: Atividade elaborada abordando o tópico estequiometria.....	32
Quadro 4: Atividade elaborada abordando o tópico geometria molecular.	34
Quadro 5: Atividade elaborada abordando o tópico alotropia.	35
Quadro 6: Atividade elaborada abordando o tópico polaridade.	36
Quadro 7: Atividade elaborada abordando o tópico teoria do orbital molecular.....	39

LISTA DE ABREVIATURA E SIGLAS

3D	Três Dimensões
DFT	Teoria do Funcional de Densidade – do inglês “ <i>Density Functional Theory</i> ”
DNA	Ácido Desoxirribonucleico – do inglês “ <i>Deoxyribonucleic acid</i> ”
HOMO	Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia – do inglês “ <i>Highest Occupied Molecular Orbital</i> ”
IUPAC	União Internacional de Química Pura e Aplicada – do inglês “ <i>International Union of Pure and Applied Chemistry</i> ”
LUMO	Orbital Molecular Desocupado de Menor Energia – do inglês “ <i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i> ”
TOM	Teoria do Orbital Molecular
VSEPR	Repulsão de Par de Elétrons de Camada de Valência – do inglês “ <i>Valence-Shell Electron-Pair Repulsion</i> ”
e	Carga do Elétron
δ	Carga Elétrica Parcial
Z_{eff}	Carga Nuclear Efetiva
χ	Eletronegatividade
μ	Momento de Dipolo Elétrico

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	14
1.1 QUÍMICA COMPUTACIONAL	14
1.2 QUÍMICA COMPUTACIONAL E EDUCAÇÃO	15
1.3 PROCESSO DE APRENDIZAGEM	17
1.4 SEQUÊNCIA DIDÁTICA	18
1.5 PROGRAMA AVOGADRO.....	19
1.6 PROPRIEDADES QUÍMICAS.....	21
2 OBJETIVOS	27
3 METODOLOGIA.....	28
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	30
4.1 ATIVIDADES ELABORADAS	30
4.1.1 Tópico de Estrutura Molecular	30
4.1.2 Tópico de Estequiometria	32
4.1.3 Tópico de Geometria Molecular.....	34
4.1.4 Tópico de Alotropia.....	35
4.1.5 Tópico de Momento de Dipolo e Polaridade	36
4.1.6 Tópico de Teoria do Orbital Molecular.....	38
4.2 APLICAÇÃO DAS ATIVIDADES ELABORADAS	41
4.2.1 Respostas dos Questionários.....	41
4.3 AVALIAÇÃO DO USO DO PROGRAMA AVOGADRO NAS ATIVIDADES DE ENSINO PROPOSTAS	57
5 CONCLUSÃO.....	62
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63
APÊNDICE A – Formulário aplicado pré-aula no primeiro dia.	68
APÊNDICE B – Formulário aplicado pós-aula no primeiro dia.	70
APÊNDICE C – Formulário aplicado pré-aula no segundo dia.	72

APÊNDICE D – <i>Formulário aplicado pós-aula no segundo dia.</i>	74
---	-----------

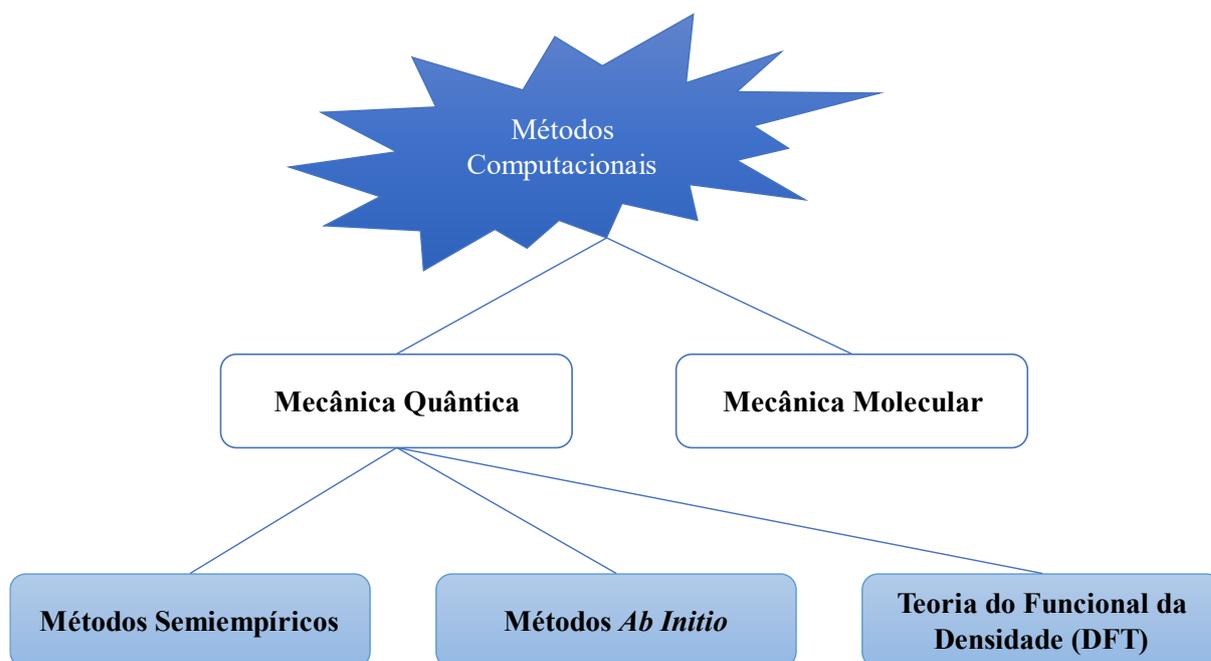
1 INTRODUÇÃO

1.1 QUÍMICA COMPUTACIONAL

A química computacional é definida como “[...] uma disciplina que utiliza métodos matemáticos para o cálculo de propriedades moleculares ou para simulação do comportamento molecular. Também inclui, por exemplo, planejamento de síntese, pesquisa de bancos de dados, manipulação de biblioteca combinatória” (LOK, 2019; VAN DE WATERBEEMD *et al.*, 1997), segundo a União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC).

Os principais métodos de química computacional podem ser divididos em métodos de mecânica molecular e métodos baseados na mecânica quântica (Figura 1).

Figura 1: Classificação dos principais métodos de química computacional.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

O uso de dados experimentais e cálculos realizados usando as teorias da mecânica clássica são as principais características dos métodos de mecânica molecular. Nesses métodos efeitos eletrônicos são trazidos de forma indireta na obtenção das estruturas moleculares e das propriedades químicas (LEAL *et al.*, 2010).

Os métodos de mecânica quântica são baseados na resolução da equação de Schrödinger, equação 1 (SCHRÖDINGER, 1926). Todavia, o desenvolvimento da capacidade

de processamento de dados tornou viável o uso de metodologias baseadas na resolução da equação de Dirac, equação 2 (DIRAC, 1928), facilitando a inclusão dos efeitos relativísticos na descrição quântica de um sistema.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}^2} + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad \text{eq. (1)}$$

$$\begin{pmatrix} V(r) & c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & V(r) - 2c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L(r) \\ \psi_S(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_L(r) \\ \psi_S(r) \end{pmatrix} \quad \text{eq. (2)}$$

Os métodos baseados na resolução das equações da mecânica quântica podem ser subdivididos em três subcategorias: métodos *ab initio*, métodos semiempíricos e métodos baseados na teoria do funcional de densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*) (ALMEIDA; SANTOS, 2001). Os métodos *ab initio* consideram apenas as constantes fundamentais da natureza, enquanto os métodos semiempíricos usam aproximações contendo dados obtidos de forma experimental para resolução das equações mecânico quânticas (ALMEIDA; SANTOS, 2001; DUARTE, 2001; LEAL *et al.*, 2010). A teoria do funcional de densidade (DFT) foi desenvolvida a partir dos teoremas de Hohenberg e Kohn (HOHENBERG; KOHN, 1964), sendo baseada na resolução das equações de Kohn e Sham (KOHN; SHAM, 1965), considerando o sistema eletrônico em termos de um funcional onde a densidade eletrônica é usada para a resolução do problema quântico abordado (DUARTE; ROCHA, 2007).

Nesse contexto, o desenvolvimento dessas teorias tornaram possível a adesão de metodologias de química computacional para a investigação dos fenômenos químicos (ARROIO *et al.*, 2005; LEAL *et al.*, 2010). Associado a isso, o desenvolvimento das capacidades de processamento e a redução do custo de computadores tornou possível a popularização do uso de recursos computacionais (ARROIO *et al.*, 2005; MORGON, 2001).

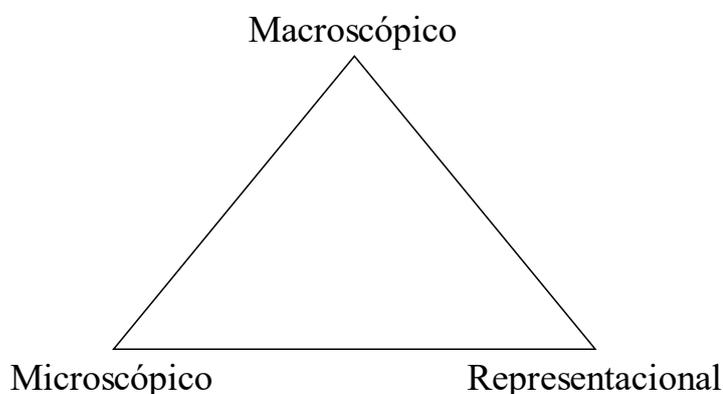
1.2 QUÍMICA COMPUTACIONAL E EDUCAÇÃO

As ferramentas de Química Computacional englobam programas de mecânica molecular e mecânica quântica, e de edição e visualização molecular. Essas ferramentas podem ser empregadas para inúmeras finalidades de acordo com suas funções, de tal forma a contribuir como objeto de aprendizagem no ensino, proporcionando maior desempenho dos alunos nas

capacidades de percepção, atenção, dentre outras (MACHADO, 2016). Ferramentas de edição e visualização molecular podem auxiliar os estudantes na compreensão de conceitos, tendo em vista que a química é uma ciência abstrata, o que aumenta a dificuldade dos estudantes no processo de aprendizagem advinda, principalmente, da dificuldade de compreensão dos fenômenos abordados sem o auxílio de ferramentas de visualização (GILBERT, 2005; JONES; JORDAN; STILLINGS, 2005).

A compreensão dos fenômenos químicos está relacionada com a combinação de diferentes formas de representação do conhecimento químico, figura 2 (JOHNSTONE, 1993). Tudo aquilo que é visível, que se pode tocar e que permite ser editável faz parte do conhecimento no nível macroscópico, enquanto aquilo que não pode ser visualizado (química atomística e molecular, dentre outros) faz parte do conhecimento químico microscópico. Além disso, o conhecimento químico associado a descrição por meio de representações usando símbolos e equações representa o conhecimento no nível representacional (GILBERT, 2005; JOHNSTONE, 1993). Segundo Russell e colaboradores (1997), essa tríade do conhecimento químico está contida no uso de diferentes ferramentas computacionais.

Figura 2: Níveis de representação do conhecimento químico – triângulo de Johnstone.



Fonte: Adaptado de Johnstone (1993).

O uso dos programas de química computacional permite relacionar todos os níveis do conhecimento químico, com ênfase para a visualização dos sistemas estudados, onde tem se mostrado efetiva na melhoria do desempenho dos estudantes, como consequência de uma melhor compreensão dos conceitos químicos abordados (BURKE; GREENBOWE; WINDSCHITL, 1998; EALY, 2004). Além disso, têm despertado um aumento do interesse dos alunos durante o processo de aprendizagem (EALY, 2004), possibilitando maior engajamento

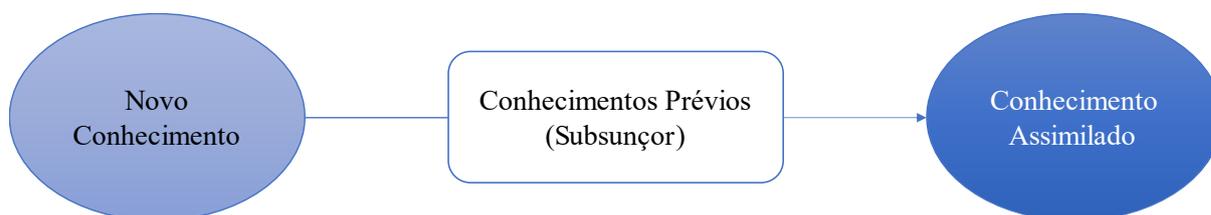
dos estudantes para as atividades realizadas em sala de aula, principalmente, baseando-se na resolução de problemas (FELLER; DALLINGER; MCKINNEY, 2004).

1.3 PROCESSO DE APRENDIZAGEM

A obtenção do conhecimento químico, por vezes, pode se tornar desestimulante e sem sentido, nesse contexto estão vinculadas metodologias de ensino que utilizam o processo de aprendizagem por meio do desenvolvimento da memorização pelos alunos (MORTIMER; MOL; DUARTE, 1994). Novas metodologias de ensino são alternativas para auxiliar professores no processo de ensino-aprendizagem, assim, o uso de ferramentas que apresentam visualização em três dimensões (3D) tem se mostrado como uma boa alternativa (TRINDADE; HARTWIG, 2012). Nesse contexto, ferramentas tecnológicas usadas adequadamente no processo de ensino-aprendizagem auxiliam na aprendizagem significativa dos conteúdos abordados em sala de aula (MACHADO, 2016).

A aquisição do conhecimento por longos períodos, relacionados em uma rede de conhecimentos extensa e ordenada de ideias presentes na estrutura cognitiva do estudante, caracteriza para Ausubel, Novak e Hanesian (1980) a aprendizagem significativa. Esse processo de aprendizagem ocorre inicialmente com um novo conhecimento, a partir dele o discente avalia conhecimentos prévios presentes na estrutura cognitiva (subsunçor), facilitando a assimilação do conhecimento (figura 3) (AUSUBEL; NOVAK; HANESIAN, 1980).

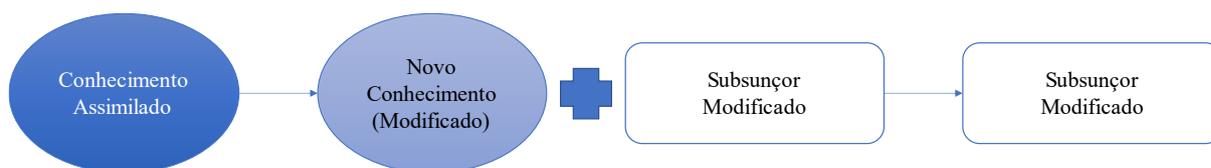
Figura 3: Etapa inicial do processo da aprendizagem significativa segundo Ausubel.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Após a assimilação do novo conhecimento, esse fica retido pelo estudante, sendo descrito como um novo conhecimento modificado por meio do subsunçor e, é gerado um novo subsunçor (subsunçor modificado), que permanece na estrutura cognitiva do estudante após o processo de esquecimento (figura 4). A partir disso, o subsunçor modificado passa a ser um novo facilitador para assimilação do novo conhecimento (AUSUBEL; NOVAK; HANESIAN, 1980).

Figura 4: Etapa final do processo da aprendizagem significativa segundo Ausubel.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Além disso, deve ser considerado que o conhecimento a ser adquirido seja potencialmente significativo e interessante para o discente (AUSUBEL; NOVAK; HANESIAN, 1980). Segundo Bacich e colaboradores e Coll e colaboradores (*apud* PASCHOAL; PASCHOAL; ABREU, 2021), novos métodos e propostas de ensino são desenvolvidos e implementados buscando motivar o aluno a trazer inovações, adotando tecnologias digitais e metodologias ativas de ensino.

A inserção das tecnologias digitais nos processos de ensino auxiliam no desenvolvimento do processo de aprendizagem, ensino e na produção do conhecimento, trabalhando com diversidade e rapidez na obtenção das informações (BERNARDI, 2010). Em adição, métodos baseados na resolução de problemas realizam o processo de aprendizagem ativa, esse método explora a elaboração e explicação dos alunos para a resolução dos problemas usando conhecimentos prévios (BERBEL, 1998). Dessa forma, contribui para o processo de aprendizagem sendo capaz de estimular o desenvolvimento de estratégias para a resolução dos problemas ou novas situações problemáticas (POZO, 1998).

Nesse contexto, programas computacionais podem ser usados como ferramentas capazes de auxiliar os alunos no processo de resolução de problemas, sendo uma ferramenta educacional capaz de corroborar com a aprendizagem significativa dos discentes.

Considerando os processos cognitivos que ocorrem durante a aprendizagem em química, os programas que permitem a visualização do sistema também auxiliam no desenvolvimento da capacidade de imaginação do aluno, na ampliação da visão espacial (JONES; JORDAN; STILLINGS, 2005; WEINTROP *et al.*, 2016), além de desenvolver o pensamento abstrato (WEINTROP *et al.*, 2016).

1.4 SEQUÊNCIA DIDÁTICA

O processo de aprendizagem significativa pode ocorrer de forma gradual, os subsunçores dos alunos interagem com recursos usados nas atividades de ensino e internalizam

na estrutura cognitiva do discente (BEKMAN; LIMA; ALMEIDA, 2021). Deve-se considerar que o processo de ensino-aprendizagem adotado em sala de aula permita o desenvolvimento das capacidades de avaliação e resolução de problemas, nesse contexto, Zabala (1998) avalia que sequências didáticas são instrumentos capazes de potencializar competências e habilidades durante o processo de aprendizagem.

A sequência didática é a estruturação das atividades buscando um objetivo educacional (ZABALA, 1998). Nesse contexto a sequência didática elaborada de forma coerente é capaz de auxiliar o professor na organização das atividades de ensino, e contribuir no desenvolvimento do conhecimento dos alunos (BEDIN; DEL PINO, 2019). A partir disso, Yoneda e Huguenin (2018) apontam que o uso das sequências didáticas construídas com tecnologias digitais podem ser associadas ao processo de aprendizagem.

Yoneda e Huguenin (2018) descrevem que uma sequência didática usando tecnologias digitais devem ser construídas a partir de aspectos fundamentais: a interdisciplinaridade, promovendo a interação com conhecimentos distintos dos alunos, além da relação com outras disciplinas e conteúdos; aulas dialogadas, por meio desse formato de aula é possível abordar problemas que façam os alunos usarem conhecimentos e tecnologias digitais durante a aplicação das aulas; aula dialogada e sistematização do conteúdo abordado.

Nesse contexto, uma das etapas fundamentais no planejamento da sequência didática é a definição do conteúdo abordado, os tópicos e a ordem trabalhada, os problemas a serem discutidos e a ferramenta computacional a ser usada (YONEDA; HUGUENIN, 2018).

1.5 PROGRAMA AVOGADRO

Existem diversos programas de uso livre e comerciais disponíveis para edição e visualização molecular, com destaque para o programa Avogadro. O programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012) é usado em química computacional para a visualização de átomos e moléculas em três dimensões (3D), disponível de forma gratuita, com suporte para as plataformas Windows, Linux e macOS, é um programa de código aberto com interface gráfica, sendo utilizado nas áreas de bioinformática, modelagem molecular, ciência dos materiais, química computacional, dentre outras (HANWELL *et al.*, 2012).

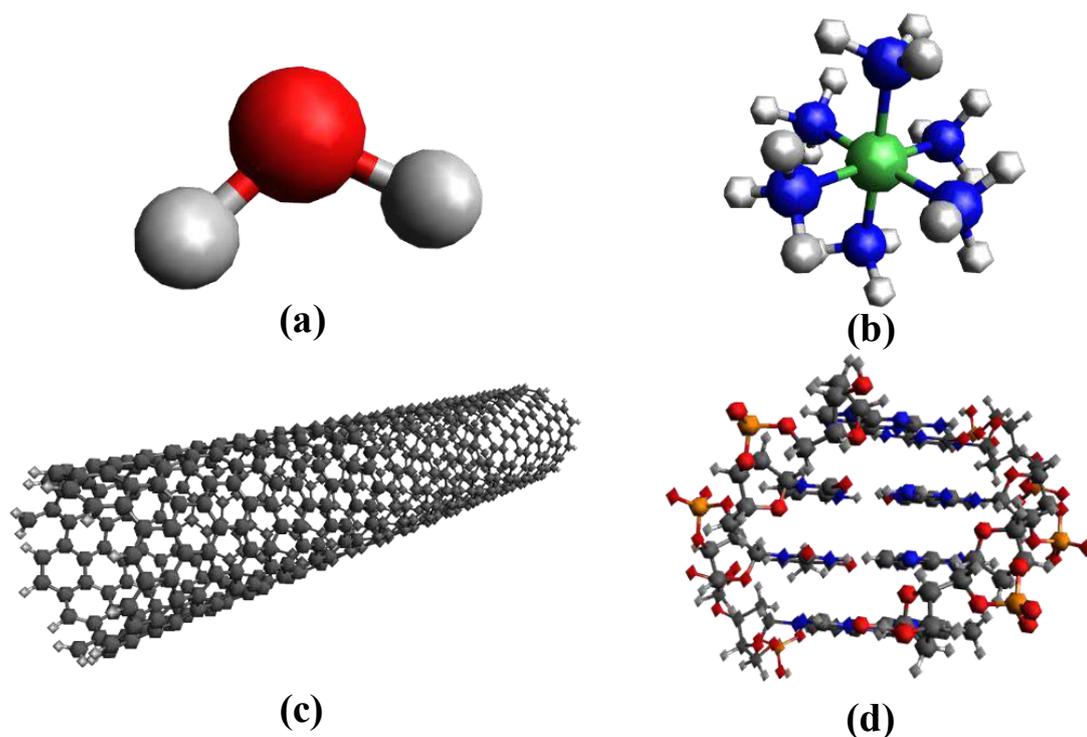
Dentre as principais características do Avogadro estão suas ferramentas. O programa possui diferentes opções para visualização de átomos e moléculas incluindo ferramentas para a visualização de orbitais atômicos e moleculares, superfícies de potencial eletrostático e espectros de infravermelho dos compostos. Possui um número grande de ferramentas para

auxiliar e facilitar a construção de moléculas. Sistemas complexos podem ser construídos com o auxílio da inserção de fragmentos de moléculas e proteínas, o programa disponibiliza ferramentas específicas para a construção de nanotubos de carbono e células unitárias (HANWELL *et al.*, 2012). A Figura 5 apresenta diversas moléculas construídas usando o programa.

O Avogadro realiza cálculos de otimização de geometria e de energia usando métodos de mecânica molecular com a opção de diferentes campos de força. Além disso, disponibiliza ferramentas para auxiliar a construção de arquivos para cálculos de mecânica quântica em outros programas, possibilitando a escolha de diferentes níveis de teoria, funções de base, dentre outros parâmetros, possuindo compatibilidade com diferentes extensões de arquivos de entrada e saída de cálculos (HANWELL *et al.*, 2012).

Outras funções importantes disponíveis no Avogadro são os recursos de criação de imagens para diferentes extensões (gráficas e de vetores gráficos), possibilitando a renderização usando os métodos GLSL e *Ray Tracing*. O programa disponibiliza a opção de instalação de novos plugins usando as linguagens de programação Python e C++ (HANWELL *et al.*, 2012).

Figura 5: Moléculas construídas usando o programa Avogadro. (a) água, (b) íon hexaminoníquel(II), (c) nanotubo de carbono, (d) fragmento do ácido desoxirribonucleico (DNA).



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Na literatura, o uso do programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012) é relatado no ensino de disciplinas de todas áreas da química: físico-química (MELIA; BARRIONUEVO; IBAÑEZ, 2022; SIMPSON *et al.*, 2013; SIMPSON; AUTSCHBACH; ZUREK, 2013; SNYDER; KUCUKKAL, 2021), química analítica (FIRMINO *et al.*, 2020), química geral e inorgânica (DE ALMEIDA; DA BORGES; RAUL DE SÁ, 2021; LISTYARINI, 2021; PHANKINGTHONGKUM; LIMPANUPARB, 2021; SNYDER; KUCUKKAL, 2021) e química orgânica (LEAL *et al.*, 2010; TORRES QUEZADA *et al.*, 2017). Conceitos como forças intermoleculares (LISTYARINI, 2021), polaridade (FIRMINO *et al.*, 2020; PHANKINGTHONGKUM; LIMPANUPARB, 2021), isomeria (SIMPSON; AUTSCHBACH; ZUREK, 2013; TORRES QUEZADA *et al.*, 2017), geometria molecular e hibridização (DE ALMEIDA; DA BORGES; RAUL DE SÁ, 2021; LEAL *et al.*, 2010; LISTYARINI, 2021; SIMPSON *et al.*, 2013; SNYDER; KUCUKKAL, 2021) e orbitais moleculares (LEAL *et al.*, 2010; MELIA; BARRIONUEVO; IBAÑEZ, 2022; PHANKINGTHONGKUM; LIMPANUPARB, 2021), além de conceitos no campo da ótica (SIMPSON; AUTSCHBACH; ZUREK, 2013), foram abordados.

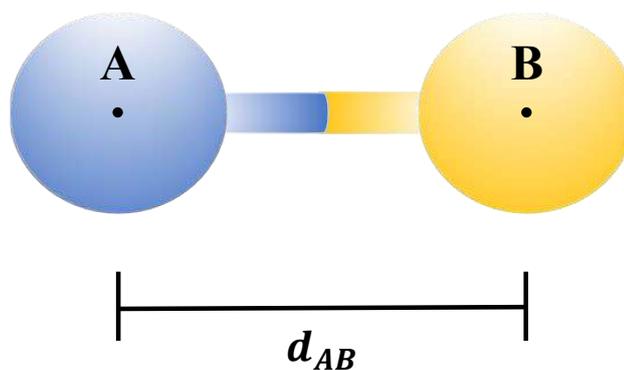
O uso do Avogadro como ferramenta para auxiliar o ensino de química foi recebido positivamente pelos alunos que participaram das atividades propostas (DE ALMEIDA; DA BORGES; RAUL DE SÁ, 2021; FIRMINO *et al.*, 2020; LISTYARINI, 2021; SIMPSON *et al.*, 2013; SNYDER; KUCUKKAL, 2021; TORRES QUEZADA *et al.*, 2017), e sua aplicação para o ensino de química mostrou-se eficiente, sendo possível atrair a atenção dos estudantes para os tópicos abordados (TORRES QUEZADA *et al.*, 2017), e oferecendo uma alternativa para métodos tradicionais de ensino (PHANKINGTHONGKUM; LIMPANUPARB, 2021), potencializando a capacidade de entendimento dos tópicos abordados por meio da visualização espacial dos sistemas abordados (DE ALMEIDA; DA BORGES; RAUL DE SÁ, 2021; LISTYARINI, 2021; SNYDER; KUCUKKAL, 2021; TORRES QUEZADA *et al.*, 2017).

1.6 PROPRIEDADES QUÍMICAS

Existem diversas propriedades químicas que podem ser exploradas com o programa Avogadro para o ensino de Química, tais como geometria molecular, ligação química, polaridade, estequiometria, termoquímica etc.

a) comprimento de ligação: é uma das características das moléculas usadas para auxiliar na identificação dos compostos, sendo definido como a “distância entre os centros atômicos envolvidos em uma ligação” – figura 6 (LOK, 2019; MINKIN, 1999).

Figura 6: Representação do comprimento de ligação de uma molécula AB.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

b) geometria molecular: as moléculas podem ser classificadas de acordo com sua posição no espaço, ou seja, a sua geometria molecular (Tabela 1).

Tabela 1: Geometria molecular dos compostos.

Geometria Molecular					
Linear		Angular		Trigonal Plana	
Geometria em T		Piramidal		Tetraédrica	
Gangorra		Quadrado Planar		Bipirâmide Trigonal	
Pirâmide de Base Quadrada		Pentagonal Plana		Octaédrica	

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

As geometrias moleculares são grupos determinados a partir do modelo de Repulsão de Pares de Elétrons de Camada de Valência (VSEPR), usados para categorizar e prever a forma que compostos apresentam no espaço (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016; HOUSECROFT; SHARPE, 2012). Uma molécula apresentará sua geometria no espaço, de acordo com o modelo VSEPR, de forma a minimizar as repulsões entre os domínios eletrônicos – de átomos ou de pares de elétrons livres (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016). De forma geral, ocorre a diminuição das repulsões quando se minimiza o número de pares de elétrons livres, assim, interações entre pares de elétrons ocasionam maior repulsão quando comparado a interações entre pares de elétrons com ligações e entre pares de ligações. Além disso, a diminuição da ordem de ligação está diretamente relacionada com a minimização das repulsões, ordens de ligação mais elevadas apresentam maiores densidades eletrônicas entre os núcleos, da mesma forma átomos que apresentam menor eletronegatividade possuem comprimentos de ligação maiores, ocasionando a diminuição da densidade eletrônica entre os átomos (HOUSECROFT; SHARPE, 2012).

A influência dos pares de elétrons livres na geometria molecular pode ser visualizada na forma que apresentam (tabela 1). As geometrias moleculares angular, piramidal e gangorra apresentaram pares de elétrons livres no átomo central que causam a distorção da geometria para a diminuição do efeito das repulsões nos compostos (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016; HOUSECROFT; SHARPE, 2012).

c) estequiometria: avalia quantitativamente processos químicos relacionados a reações químicas. Os cálculos estequiométricos são baseados nas leis ponderais (“Lei de conservação das massas” e “Lei das proporções constantes”), onde por meio de uma reação química balanceada é possível obter massa, quantidade de matéria (número de mols), volume, dentre outros parâmetros iniciais ou finais em uma reação química (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016).

d) alotropia: Alótropos são definidos pela IUPAC como “as diferentes modificações estruturais de um elemento” (HARTSHORN *et al.*, 2015; LOK, 2019). As modificações estruturais ocasionadas nos elementos alteram suas propriedades físico-químicas. Os elementos mais comuns que possuem formas alotrópicas são o carbono (grafite, diamante, nanotubos, fulerenos, dentre outras), oxigênio (gás oxigênio, O₂; e ozônio, O₃), fósforo (branco e vermelho) e o enxofre (monoclínico e rômico) (FELTRE, 2004).

e) momento de dipolo e polaridade:

Moléculas diatômicas homonucleares têm sua distribuição de densidade eletrônica localizada de forma simétrica, entretanto moléculas heteronucleares possuem sua distribuição de densidade eletrônica ocorrendo assimetricamente devido a diferença da carga nuclear efetiva (Z_{eff}) dos átomos (HOUSECROFT; SHARPE, 2012). A descrição desse comportamento foi introduzida por Linnus Pauling e foi denominado eletronegatividade (χ) (HOUSECROFT; SHARPE, 2012; LOK, 2019; MILLS *et al.*, 1993; MULLER, 1994).

A eletronegatividade de Pauling é descrita como o “poder de um átomo de atrair elétrons para si”, esse conceito é baseado na energia de ligação de dissociação e descrita pela equação 3 (LOK, 2019; MILLS *et al.*, 1993; MULLER, 1994).

$$\Delta\chi = \chi(A) - \chi(B) = \sqrt{E(AB) - \frac{1}{2}[E(AA) + E(BB)]} \quad \text{eq. (3)}$$

Onde $E(AB)$ é a energia de dissociação de ligação para a molécula e $E(AA)$ e $E(BB)$ são as energias experimentais para os átomos envolvidos.

Mulliken propôs o conceito de eletronegatividade (χ) considerando a capacidade de um átomo ganhar ou perder elétrons por meio das energias envolvidas nesses processos, energia de afinidade eletrônica (EA) e energia de ionização (EI), respectivamente, sendo expressa através da relação apresentada na equação 4 (HOUSECROFT; SHARPE, 2012).

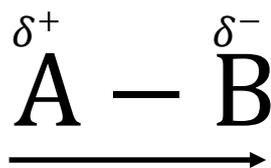
$$\chi = \frac{EA + EI}{2} \quad \text{eq. (4)}$$

A eletronegatividade também foi descrita pelo método proposto na equação 5, definida por Alfred e Rochow, que está relacionada com a interação eletrostática entre o núcleo dos átomos por meio da Z_{eff} (carga nuclear efetiva), e considera o elétron de valência mais externo estando à distância do núcleo equivalente ao raio covalente (r_{cov}) do átomo (HOUSECROFT; SHARPE, 2012).

$$\chi = \left(3590 \frac{Z_{\text{eff}}}{r_{\text{cov}}^2} \right) + 0,774 \quad \text{eq. (5)}$$

A deslocalização da densidade eletrônica para moléculas heteronucleares na região menos eletronegativa é descrita por meio da geração de uma carga parcial positiva (δ^+), enquanto a região mais eletronegativa é representada pela carga parcial negativa (δ^-) (BROWN *et al.*, 2016; HOUSECROFT; SHARPE, 2012), com a direção de deslocamento de carga a partir do átomo menos eletronegativo para o mais eletronegativo – figura 7 (BROWN *et al.*, 2016).

Figura 7: Direção da deslocalização de carga devido a diferença de eletronegatividade.



Fonte: Adaptado de Brown, *et al.* (2016).

Considerando os átomos de uma molécula com densidade eletrônica distribuída assimetricamente a uma distância (d), as cargas elétricas parciais – de mesma magnitude – geram dipolos elétricos que são mensurados pelo momento de dipolo elétrico (μ) descrito na equação 6, onde e é a carga do elétron (BROWN *et al.*, 2016; HOUSECROFT; SHARPE, 2012).

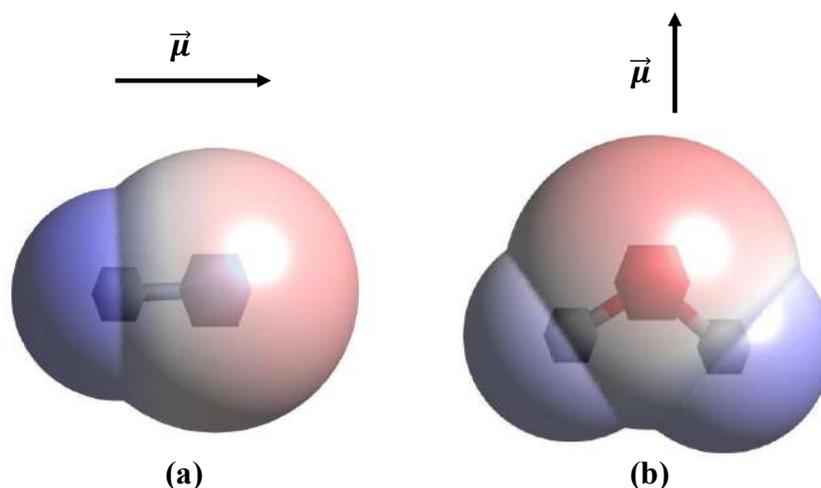
$$\mu = \delta ed \quad \text{eq. (6)}$$

O momento de dipolo é uma propriedade vetorial, com a sua direção sendo dada considerando as cargas parciais da molécula – figura 4 (BROWN *et al.*, 2016). Em moléculas poliatômicas, sua magnitude é descrita pela soma dos vetores gerados devido a diferença de eletronegatividade (HOUSECROFT; SHARPE, 2012). A figura 8 apresenta o vetor do momento de dipolo e a superfície de potencial eletrostático para o fluoreto de hidrogênio (a) e para água (b), onde a região de menor densidade eletrônica é descrita na coloração azul e a região de maior densidade na coloração vermelha.

Ligações covalentes que apresentam o deslocamento de cargas gerando dipolos parciais nos átomos presentes na ligação são caracterizadas como ligações covalentes polares, e a não existência desse caráter polar caracteriza uma ligação covalente apolar (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016; HOUSECROFT; SHARPE, 2012). Nesse contexto, moléculas diatômicas podem ser classificadas de acordo com o caráter polar de sua ligação (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016), enquanto moléculas poliatômicas são classificadas em

polares quando possuem momento de dipolo elétrico diferente de zero e são apolares quando o momento de dipolo elétrico é zero (ATKINS; JONES, 2012).

Figura 8: Superfície de potencial eletrostático e vetor momento de dipolo para as moléculas de (a) HF e (b) H₂O.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

f) ligação química: A teoria do orbital molecular (TOM) descreve as ligações químicas como combinações lineares de funções de onda atômicas. Em sua descrição, os orbitais moleculares são formados a partir da combinação linear de orbitais atômicos, assim, o número de orbitais moleculares formados é igual ao número de orbitais atômicos provenientes dos átomos que compõem a molécula. Os orbitais moleculares formados podem ser classificados em ligantes e antiligantes, além disso esses orbitais não são degenerados entre si e/ou possuem diferentes simetrias. Esses dados são expressos através de diagramas de energia. Dentre os conceitos apresentados no estudo dessa teoria são apresentados o orbital molecular ocupado de maior energia (HOMO) e desocupado de menor energia (LUMO), também chamados de orbitais de fronteira, esses orbitais são importantes por serem os orbitais moleculares envolvidos nas reações químicas. Outros conceitos amplamente abordados na teoria é o conceito de paramagnetismo e diamagnetismo, onde um composto é paramagnético quando possui elétrons desemparelhados e diamagnético quando não possui elétrons desemparelhados.

2 OBJETIVOS

O presente trabalho visa a elaboração e aplicação de práticas de Química Computacional para auxiliar no processo de ensino-aprendizagem de alunos na disciplina de Química Geral em cursos de Licenciatura e Bacharelado em Química. Como objetivos específicos tem-se:

- uso do programa de Química Computacional Avogadro durante o processo de aprendizagem;

- elaboração de práticas que abordem os conteúdos de estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação), geometria molecular, estequiometria, alotropia, momento de dipolo, polaridade e teoria do orbital molecular;

- avaliação da efetividade do uso do programa Avogadro nas atividades de ensino por meio da avaliação da aprendizagem dos alunos.

3 METODOLOGIA

Inicialmente, foram preparadas seis atividades, abordando tópicos da disciplina Química Geral I dos cursos de Licenciatura e Bacharelado em Química do Centro Multidisciplinar (CM) UFRJ-Macaé da Universidade Federal do Rio de Janeiro. Além disso, foram selecionados tópicos constantes comumente nas disciplinas de Química Geral de outras instituições, de forma que as atividades possam ser aplicadas ou adaptadas por docentes de outras Instituições.

Assim, os seguintes tópicos foram contemplados na elaboração das atividades: estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular, alotropia, momento de dipolo, polaridade e teoria do orbital molecular.

Todas as atividades foram elaboradas para serem aplicadas com o programa Avogadro como uma ferramenta no processo de ensino-aprendizagem dos conteúdos abordados. É importante ressaltar que o programa foi escolhido por ser de uso livre e disponível para as plataformas Windows, Linux e macOS.

As atividades elaboradas foram divididas para serem aplicadas em duas aulas com três horas de duração cada. A primeira aula foi preparada abordando os tópicos de estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular e alotropia. Enquanto a segunda aula foi elaborada abordando os temas de momento de dipolo, polaridade e teoria do orbital molecular. O Quadro 1 apresenta a sequência didática das aulas elaboradas, que contém uma breve apresentação do programa Avogadro, apresentação das ferramentas e realização, por parte dos alunos, das atividades propostas.

Além disso, foram aplicados formulários antes e após as aulas buscando analisar a efetividade do uso do programa Avogadro como ferramenta no processo de ensino-aprendizagem dos conteúdos de química abordados. Na primeira aula os questionários pré-aula e pós-aula (apêndices A e B, respectivamente) abordaram conhecimentos gerais sobre química computacional, as dificuldades no processo de aprendizagem em química e conceitos específicos dos tópicos abordados. Os questionários pré-aula e pós-aula (apêndices C e D, respectivamente) aplicados no segundo dia de aula abordavam as dificuldades apresentadas pelos alunos nos tópicos discutidos no dia, conceitos e conhecimentos específicos dos conteúdos.

Quadro 1: Sequência didática para as aulas realizadas.***Sequência Didática – Primeiro Dia***

- Apresentação e organização da turma.
- Aplicação do formulário pré-aula (apêndice A).
- Apresentação geral do programa Avogadro.
- Realização prática da instalação do programa Avogadro.
- Apresentação da interface e opções de mudança de cor do plano de fundo e adição de nova aba.
- Apresentação das ferramentas de desenho e manipulação, otimização de geometria, medição de ângulo e comprimento de ligação e tabela de dados estruturais.
(Realizar junto com os alunos).
 - Desenho e manipulação molecular usando as moléculas de CN, amônia e benzeno.
 - Otimização de geometria usando a molécula de amônia.
 - Medição de ângulo e comprimento de ligação usando a molécula de amônia.
 - Tabela de dados estruturais usando a molécula de amônia.
- Aplicação da atividade 1.
- Apresentação da ferramenta de inserção de fragmento de moléculas usando os compostos benzeno, cafeína e cisteína.
- Aplicação da atividade 2.
- Intervalo/dúvidas (15 minutos).
- Aplicação da atividade 3.
- Apresentação da ferramenta de inserção de nanotubos de carbono.
- Aplicação da atividade 4.
- Aplicação do formulário pós-aula (apêndice B).

Sequência Didática – Segundo Dia

- Organização da turma.
- Aplicação do formulário pré-aula (apêndice C).
- Apresentação das ferramentas de desenho e otimização.
- Apresentação da ferramenta de inserção de mapa de potencial eletrostático e da adição do vetor de momento de dipolo usando a molécula de água.
- Realização da atividade 5.
- Realização da atividade 6 junto com os alunos.
 - Construção do diagrama de energia para o gás oxigênio.
 - Apresentação da ferramenta de visualização de orbitais moleculares e apresentação dos orbitais moleculares para o gás oxigênio.
- Apresentação das ferramentas de salvar arquivos nos formatos .xyz e como arquivos de imagem.
- Aplicação do formulário pós-aula (apêndice D).

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 ATIVIDADES ELABORADAS

Um total de seis atividades foram elaboradas e aplicadas nas duas aulas ministradas. Individualmente, cada exercício abordava um tópico único, sendo eles: estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular, alotropia, polaridade e teoria do orbital molecular.

4.1.1 Tópico de Estrutura Molecular

O conteúdo de estrutura molecular foi trabalhado usando os gases hidrogênio, nitrogênio e oxigênio e a molécula de água como modelos. Os alunos desenharam os compostos, realizaram uma otimização de geometria e mediram o comprimento e o ângulo de ligação. Posteriormente, compararam os dados obtidos no Avogadro com os dados experimentais das moléculas (quadro 2).

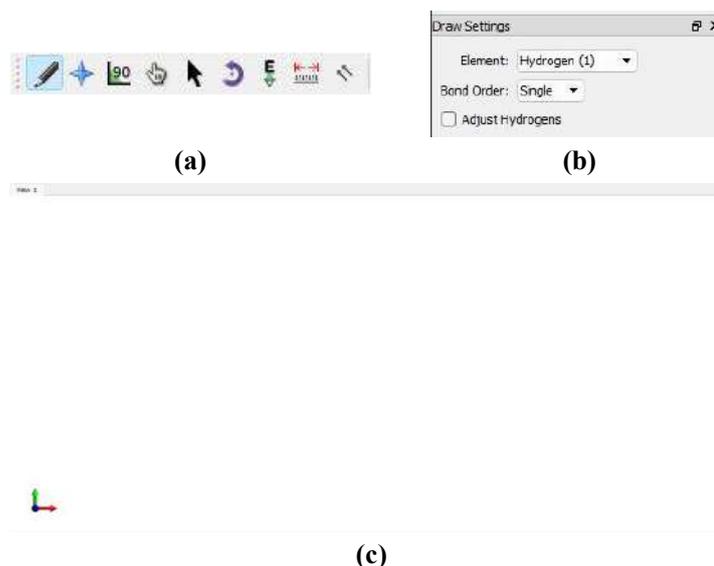
Quadro 2: Atividade elaborada abordando o tópico estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação).

<i>Atividade 1</i>					
a)	Desenhe as moléculas de H_2 , N_2 , O_2 e H_2O .				
b)	Realize a otimização de geometria de cada molécula usando o campo de força UFF.				
c)	Realize a medição do comprimento e ângulo de ligação dos átomos para cada molécula.				
d)	Compare com os dados experimentais todos os dados obtidos.				
Dados Experimentais ^a					
	Moléculas	H_2	N_2	O_2	H_2O
	Comprimento de Ligação (Å)	0,74	1,45	1,48	0,96
	Ângulo de Ligação (°)	180,0	180,0	180,0	104,5

Fonte: Elaborado pelo próprio autor. (a) Dados experimentais obtidos de Haynes, et. al. (2014).

No exercício os alunos ativaram a ferramenta de desenho (figura 9a), selecionaram os átomos e o tipo de ligação (figura 9b), adicionaram um átomo clicando na interface de desenho e visualização (figura 9c), clicando e arrastando o cursor adicionaram as ligações.

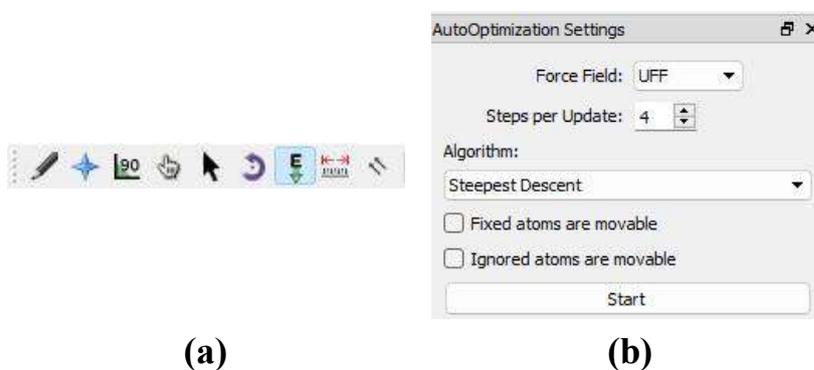
Figura 9: Desenhando moléculas no Avogadro. (a) Seleção da ferramenta de desenho, (b) configurações de desenhos, (c) interface de desenho e visualização.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

As moléculas tiveram suas estruturas otimizadas usando a ferramenta de otimização de geometria (figura 10a) configurada com o campo de força UFF (figura 10b).

Figura 10: Otimização de geometria no Avogadro. (a) Seleção da ferramenta de otimização, (b) configurações de otimização.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

Utilizaram a ferramenta de medição (figura 11) clicando sobre os átomos para realizar sua seleção.

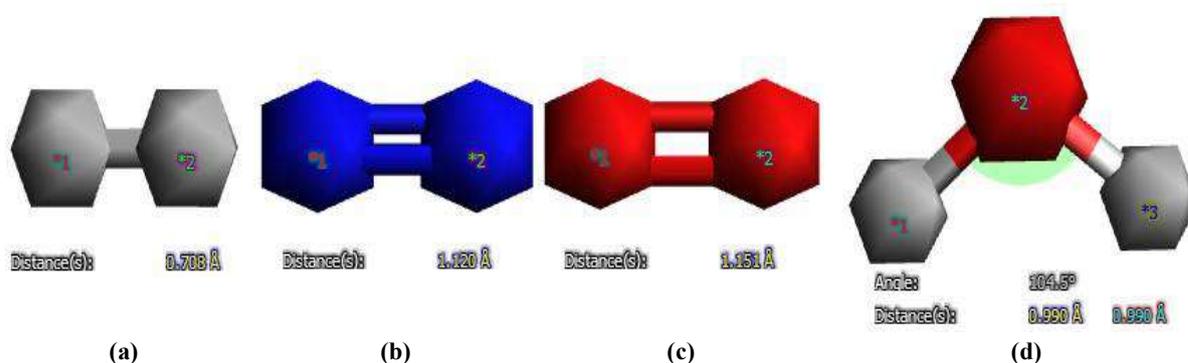
Figura 11: Ferramenta de medição do programa Avogadro.



Fonte: Imagem obtidas no programa (HANWELL *et al.*, 2012).

Compararam os dados obtidos (figura 12) com os dados experimentais e observaram que possuem um bom acordo entre os dados.

Figura 12: Comprimento de ligação e ângulo medidos no Avogadro para as moléculas de (a) H₂, (b) N₂, (c) O₂ e (d) H₂O.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

4.1.2 Tópico de Estequiometria

O tópico de estequiometria foi trabalho por meio do balanceamento da equação que descreve o processo de combustão da gasolina (quadro 3). Os alunos desenharam os compostos presentes na reação e partir do desenho realizaram o balanceamento dela.

Quadro 3: Atividade elaborada abordando o tópico estequiometria.

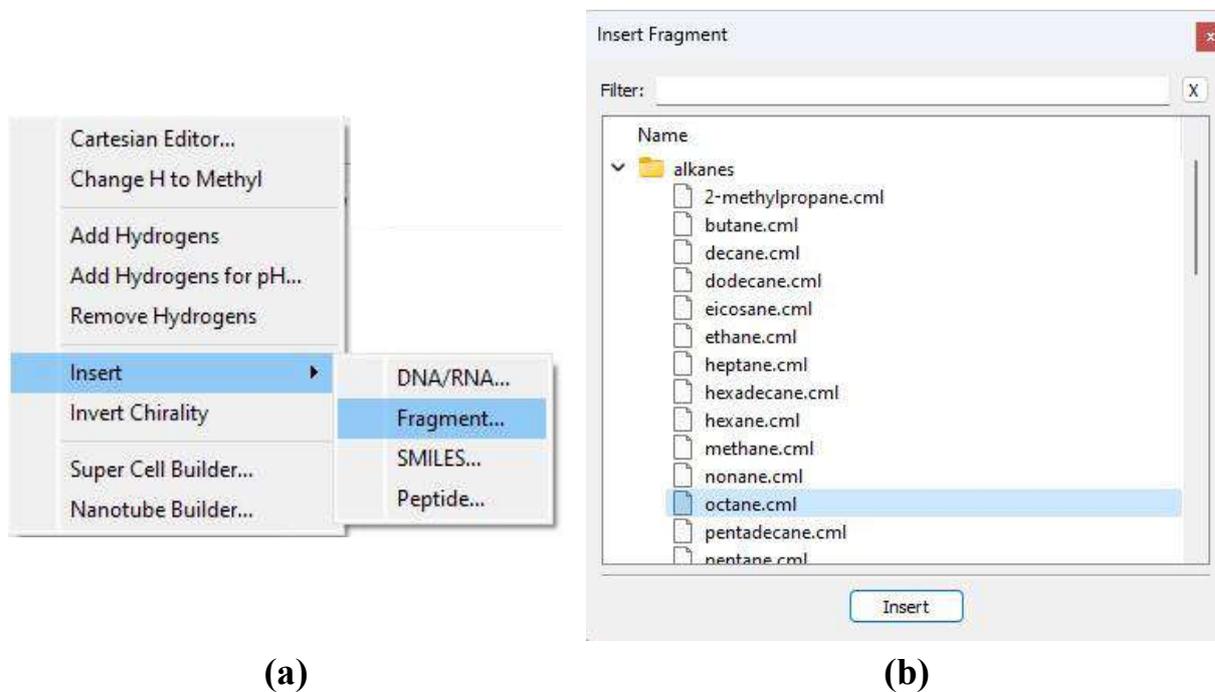
Atividade 2

A reação de combustão da gasolina ocorre quando o octano é queimado gerando gás carbônico e água. Usando o Avogadro como um programa de auxílio balanceie corretamente a reação que descreve o processo de combustão da gasolina.

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Usando as ferramentas de inserção de fragmentos de moléculas (figura 13a) contida no menu de construção (“*build*”) os alunos adicionaram o octano (figura 13b).

Figura 13: Adição de fragmentos de moléculas no Avogadro. (a) Inserção de fragmentos, (b) seleção do fragmento.

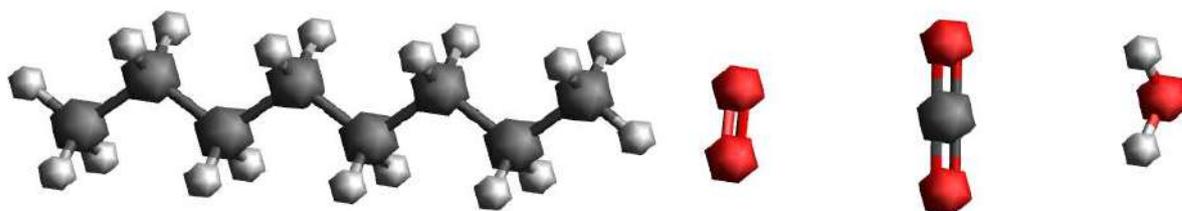


Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

Com as moléculas desenhadas (figura 14) balancearam a reação e encontraram os coeficientes estequiométricos descritos na equação 7.



Figura 14: Desenhos das moléculas usadas para balancear a reação de combustão do octano.



Fonte: Imagem obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

4.1.3 Tópico de Geometria Molecular

A geometria molecular foi abordada usando a molécula de amônia, o tetraflureto de enxofre, o difluoreto de enxofre e o trifluoreto de boro (quadro 4). Foi realizada a construção dos compostos e a otimização da geometria usando o campo de força UFF, onde a partir da geometria otimizada foi identificada a geometria molecular das moléculas.

Quadro 4: Atividade elaborada abordando o tópico geometria molecular.

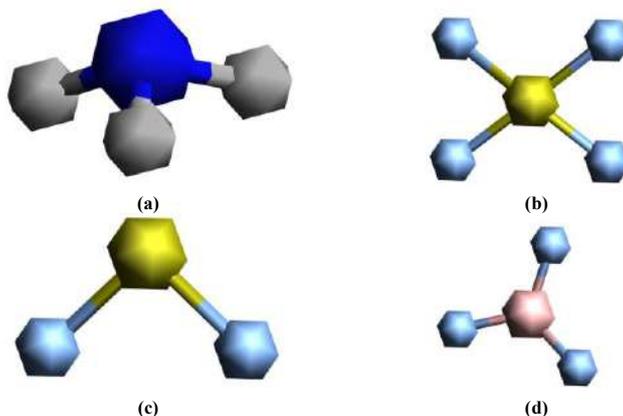
Atividade 3

A geometria molecular de diversos compostos sofre a influência de efeitos eletrônicos, muitas moléculas usadas cotidianamente podem se adequar a esses casos. Qual a geometria molecular da NH_3 , SF_4 , SF_2 e BF_3 ? Explique por que essas moléculas possuem as geometrias respondidas anteriormente usando as imagens obtidas no visualizador Avogadro.

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

As geometrias visualizadas no Avogadro (figura 15) para as moléculas NH_3 , SF_2 e BF_3 são piramidal, angular e trigonal plana, respectivamente, de acordo com dados apresentados na literatura. Entretanto, o composto SF_4 não apresentou a geometria gangorra, isso ocorre devido aos campos de força implementados no Avogadro não descreverem adequadamente a influência dos pares de elétrons livres no cálculo de otimização de geometria.

Figura 15: Estruturas otimizadas para as moléculas (a) NH_3 , (b) SF_4 , (c) SF_2 e (d) BF_3 .



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

4.1.4 Tópico de Alotropia

Foi abordado o tópico de alotropia com o auxílio do Avogadro para a visualização de fulerenos e nanotubos de carbonos (quadro 5), sendo discutidas diversas características e propriedades de compostos que apresentam alotropia.

Quadro 5: Atividade elaborada abordando o tópico alotropia.

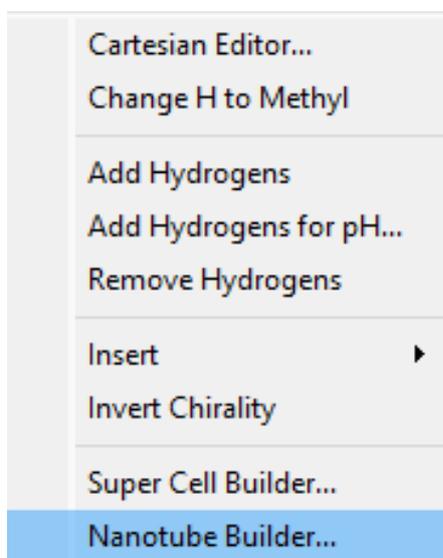
Atividade 4

A alotropia é definida como as diferentes modificações estruturais de um elemento. Os átomos que possuem esse comportamento mais comuns são o carbono (grafite, diamante, nanotubos, dentre outros), fósforo (vermelho e branco) e enxofre (monoclínico, rômboico, dentre outros). Usando o Avogadro obtenha a estrutura de um nanotubo de carbono e do fulereno C_{240} .

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

O fulereno C_{240} foi adicionado usando a ferramenta de inserção de fragmentos de moléculas. O nanotubo foi construído no menu de construção, “*build*” (figura 16), usando os parâmetros padrão do programa para o comprimento e diâmetro do nanotubo.

Figura 16: Adição de nanotubos de carbono no programa Avogadro.



Fonte: Imagem obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

A visualização dos alótropos de carbonos construídos no Avogadro (figura 17) auxiliam na compreensão do tópico abordado. Além disso são capazes de atrair a atenção dos alunos com as diferentes estruturas que podem ser construídas.

Figura 17: Alótropos de carbono construídos no programa Avogadro. (a) Nanotubo de carbono, (b) fulereno C_{240} .



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

4.1.5 Tópico de Momento de Dipolo e Polaridade

Os conceitos de momento de dipolo e polaridade foram abordados usando o etanal, clorometano, trifluoreto de boro, amônia e tricloreto de boro (quadro 6). Foram usadas as ferramentas de construção de superfícies de potencial eletrostático e de exibição do vetor de momento de dipolo. Além disso foi abordada a identificação de moléculas quanto a sua polaridade e a relação da geometria molecular de uma molécula com o momento de dipolo.

Quadro 6: Atividade elaborada abordando o tópico polaridade.

Atividade 5

- a) Quais dentre as moléculas abaixo são apolares?

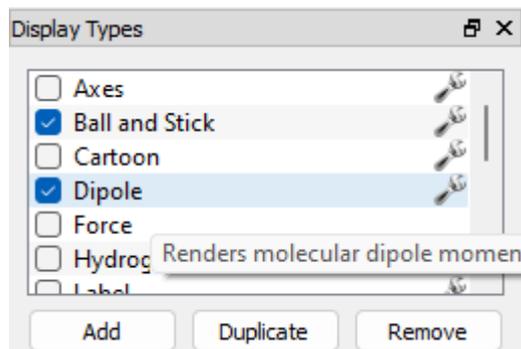


- b) Usando o Avogadro, compare os resultados acerca da polaridade dos compostos. Os resultados obtidos computacionalmente estão de acordo com o resultado esperado? Por quê?

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

O vetor do momento de dipolo foi adicionado pelos alunos marcando a opção dipolo (“*dipole*”) na caixa de ferramentas de tipos de exibição – *displays types* (figura 18).

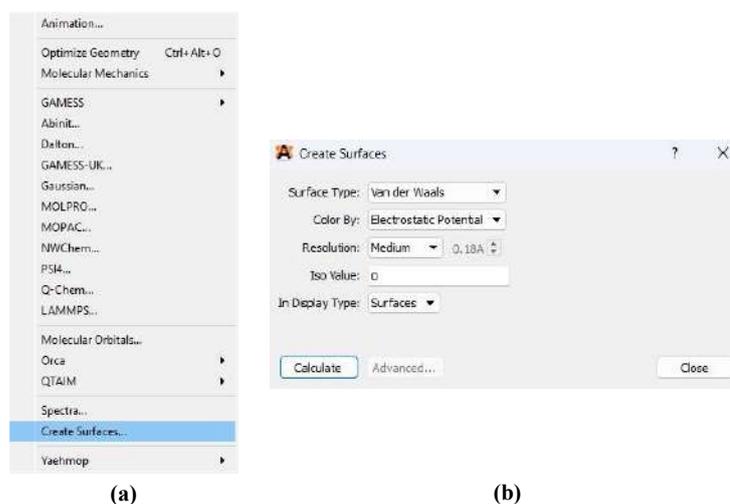
Figura 18: Adição do vetor de momento de dipolo no programa Avogadro.



Fonte: Imagem obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

As superfícies de potencial eletrostático foram construídas usando o menu de extensões – *extensions* (figura 19a), alterando o parâmetro padrão de coloração (“*color by*”) para superfície de potencial eletrostático – “*electrostatic potential*” (figura 19b). As regiões da superfície que apresentam a cor azul possuem menos densidade eletrônica, enquanto regiões de coloração avermelhada possuem maior densidade eletrônica. Em moléculas polares será visível a diferença de cargas em determinados polos das moléculas. Moléculas apolares apresentaram a distribuição de cargas uniforme e possuíram uma coloração esbranquiçada. Moléculas com muitos átomos que possuem partes polares e partes apolares também poderão ser identificadas usando superfícies de potencial eletrostático.

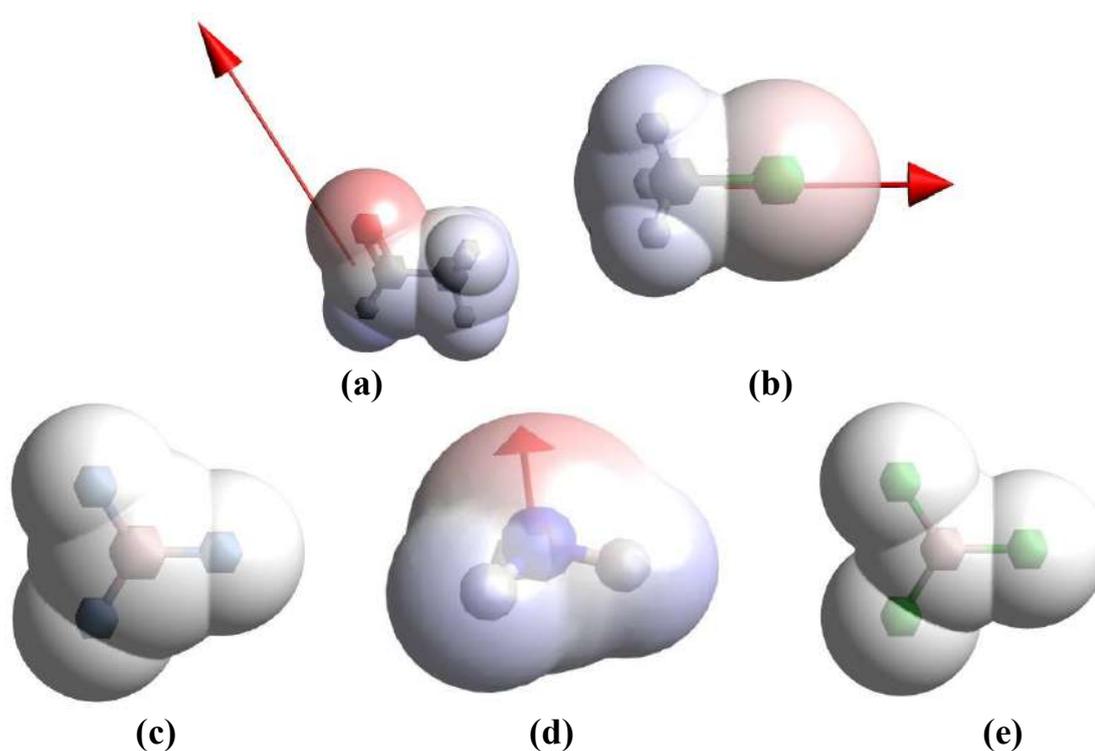
Figura 19: Adição de superfícies de potencial eletrostático no programa Avogadro.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

Usando as superfícies de potencial eletrostático e o vetor de momento de dipolo (figura 20), foi evidenciado que as moléculas C_2H_4O , CH_3Cl , e NH_3 são classificadas como polares, como pode ser observado pela presença do vetor de momento de dipolo e a diferente distribuição de cargas na superfície de potencial eletrostático. Os compostos BF_3 e BCl_3 são classificados como apolares, essas moléculas não apresentaram o vetor de momento de dipolo e a distribuição de cargas ocorreu proporcionalmente. As moléculas de NH_3 , BF_3 e BCl_3 possuem três átomos iguais ligados a um átomo central e a diferente classificação das moléculas quanto a polaridade ocorre devido as diferentes geometrias moleculares, para a amônia (geometria molecular piramidal) o momento de dipolo não se anula, enquanto para BF_3 e BCl_3 (geometria molecular trigonal plana) essa propriedade se anula.

Figura 20: Vetor momento de dipolo e superfícies de potencial eletrostático para as moléculas de (a) C_2H_4O , (b) CH_3Cl , (c) BF_3 , (d) NH_3 e (e) BCl_3 .



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

4.1.6 Tópico de Teoria do Orbital Molecular

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) foi abordada através da construção de um diagrama de energia de orbitais moleculares para o gás oxigênio. Previamente foi realizado um cálculo de otimização de geometria para a molécula no programa de mecânica quântica ORCA

5.0.3 (NEESE, 2012, 2022) e foram obtidas as figuras dos orbitais moleculares do composto. Os alunos construíram o diagrama de energia e puderam visualizar os orbitais moleculares no programa Avogadro (quadro 7).

Quadro 7: Atividade elaborada abordando o tópico teoria do orbital molecular.

Atividade 6

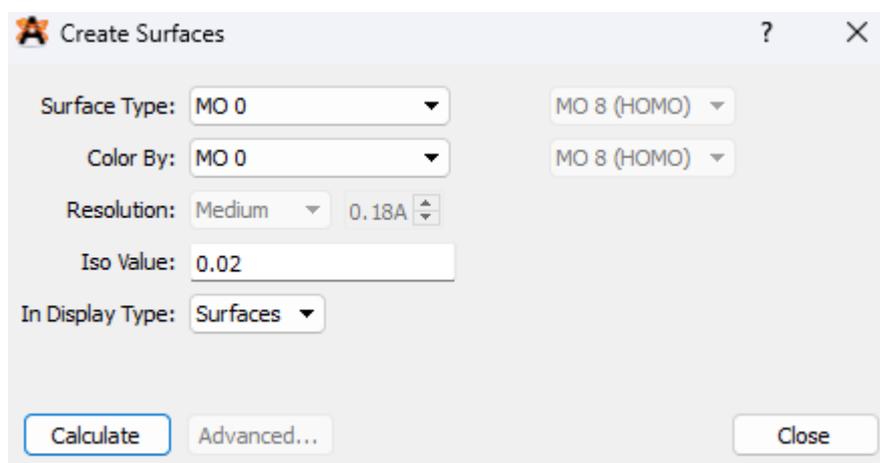
a) Desenhe o diagrama de energia do composto O_2 .

b) Utilize o programa Avogadro para visualizar os orbitais moleculares formados.

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Para a visualização dos orbitais moleculares os discentes adicionaram uma superfície usando os parâmetros de tipo de superfície (“*surface types*”) e coloração (“*color by*”) “MO X” sendo “X” o número do respectivo orbital molecular (figura 21).

Figura 21: Parâmetros para criação de superfícies para visualização de orbitais moleculares.

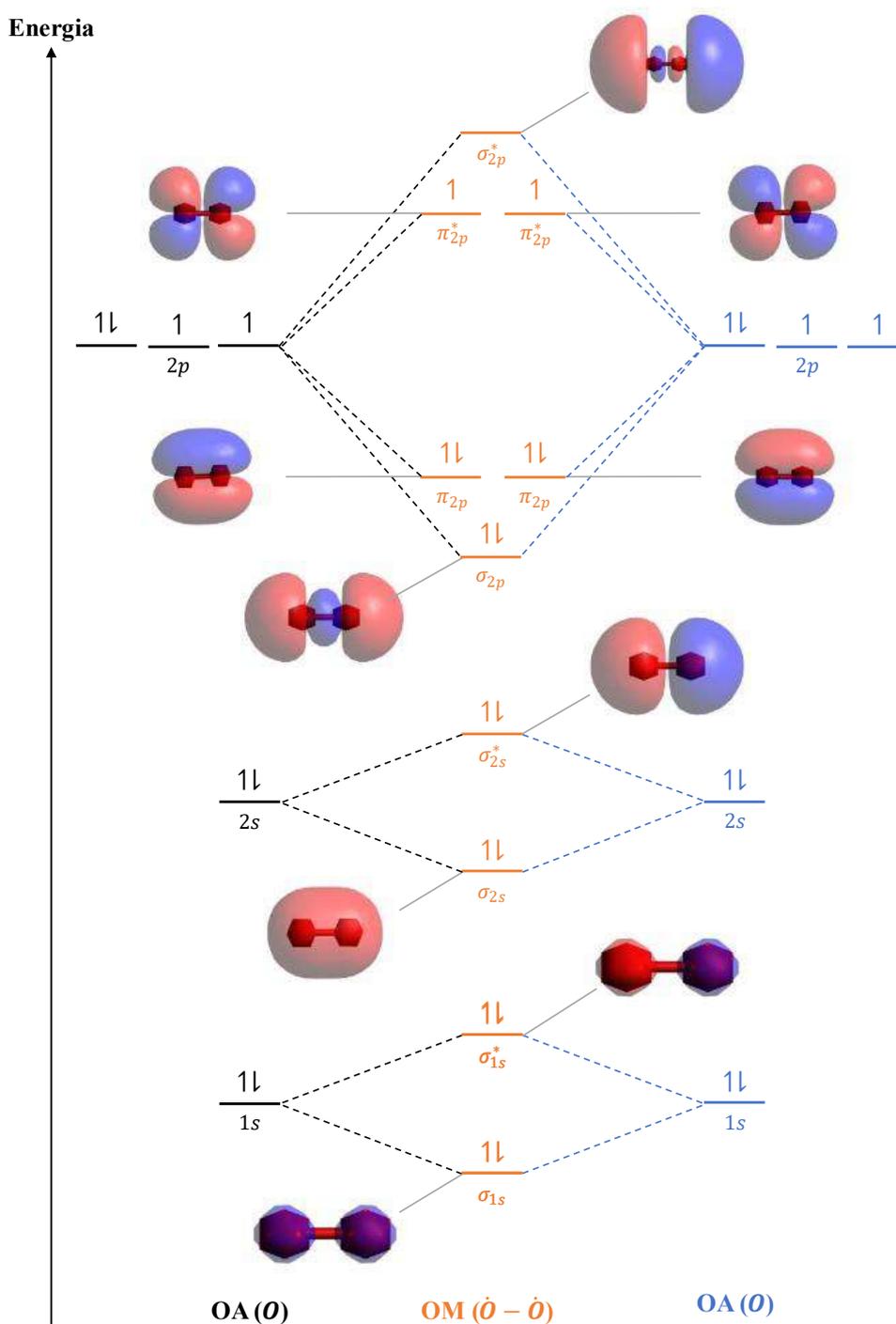


Fonte: Imagem obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

Durante a construção do diagrama de energia (figura 22) foi discutido que a teoria do orbital molecular descreve a ligação química através da combinação linear de funções de onda atômicas, assim os orbitais moleculares são formados por meio da combinação linear de orbitais atômicos, sendo que o número de orbitais moleculares formados é igual ao número de orbitais atômicos dos átomos que constituem a molécula, e possuem energia diferente dos orbitais atômicos. Os orbitais de fronteira, HOMO (π_{2p}^*) e LUMO (σ_{2p}^*), foram identificados e

visualizados pelos discentes. A visualização dos orbitais moleculares contribuiu para auxiliar o entendimento dos conceitos abordados na teoria, foi possível caracterizar os orbitais de caroço e os orbitais de valência, além disso a presença de um nó – região que não possui densidade eletrônica – auxiliou para diferenciar os orbitais moleculares ligantes dos orbitais moleculares antiligantes.

Figura 22: Diagrama de energia para o gás oxigênio.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro (HANWELL *et al.*, 2012).

4.2 APLICAÇÃO DAS ATIVIDADES ELABORADAS

As atividades elaboradas foram aplicadas em duas aulas realizadas nos dias 15 e 19 de dezembro do ano de 2022 no Laboratório Integrado de Graduação do Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé no bloco A (dia 15/12/2022) e bloco C (dia 19/12/2022). As atividades realizadas tiveram duração de três horas ocorrendo no horário entre 14h30 e 17h30. No primeiro dia participaram das atividades onze discentes e foram abordados os conteúdos de estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular e alotropia. No segundo dia houve a participação de cinco discentes e foram abordados os conteúdos de momento de dipolo, polaridade e teoria do orbital molecular.

Nas duas aulas ministradas foram aplicados questionários pré-aula e pós-aula para avaliação do impacto do programa Avogadro no processo de ensino-aprendizagem dos conteúdos trabalhados.

4.2.1 Respostas dos Questionários

No primeiro dia de atividades os questionários aplicados possuíam duas partes principais, a primeira delas buscava conhecer quais eram os conhecimentos que os alunos possuíam sobre a área da química computacional, já a segunda parte dos questionários abordava os temas de estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular e alotropia.

Figura 23: Quantidade de alunos que possuem conhecimento prévio sobre química computacional.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

No questionário pré-aula os alunos participantes das atividades foram perguntados se possuíam conhecimentos prévios sobre a área de química computacional. Dentre os participantes, 82% assinalaram que possuíam conhecimento sobre a área e os demais 18% disseram não possuir conhecimento (figura 23).

Os discentes também assinalaram como eles descreveriam a química computacional, as explicações dos discentes foram classificadas de acordo com as respostas para alunos que possuíam conhecimento prévio e àqueles que não possuíam e elencadas em tópicos, os dados obtidos são apresentados na tabela 2.

Tabela 2: Descrição da química computacional na visão dos alunos participantes da atividade.

Descrição da Química Computacional para os Alunos		
Respostas (Alunos que possuíam conhecimento)	Número de Alunos	
	Pré-Aula	Pós-Aula
A química realizada em computadores que possui ferramentas capazes de auxiliar o desenvolvimento de projetos por meio da visualização espacial, da resolução de problemas, prevendo resultados, poupando tempo e recursos.	8	6
É o ramo da química que realiza simulações computacionais.	1	1
É o ramo da química que utiliza das ferramentas de programação no cotidiano.	1	-
É a química que descreve processos complexos do cotidiano.	-	2
É o ramo da química que usa ferramentas computacionais no ensino de química.	-	2
Não responderam.	-	1
Respostas (Alunos que não possuíam conhecimento)	Número de Alunos	
A química que usa ferramentas computacionais para visualização e simulação de experimentos.	1	
Não responderam.	1	

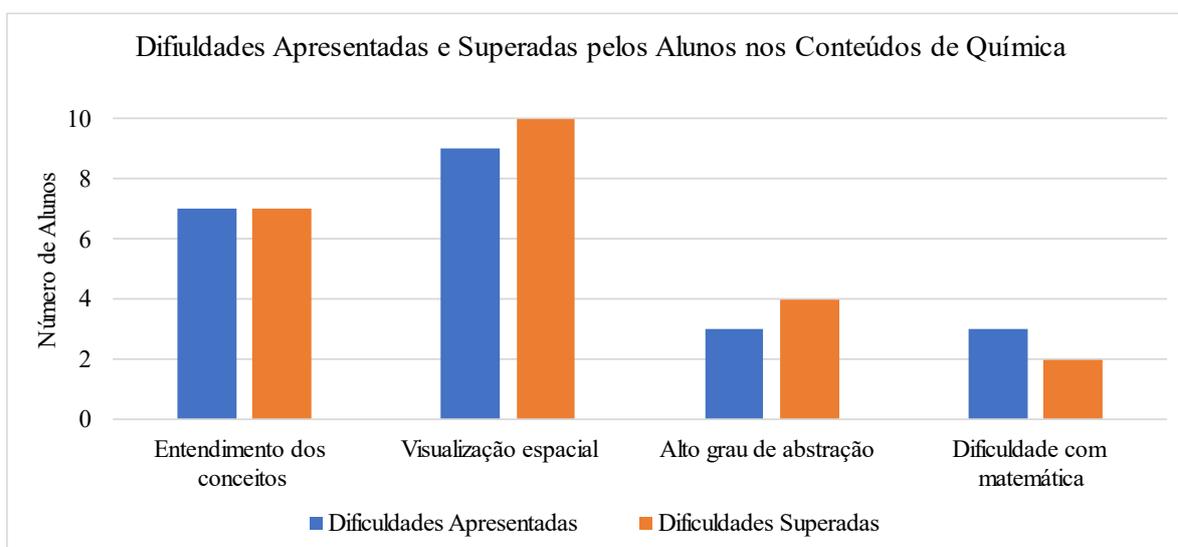
Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

As repostas dos alunos que participaram da aula elencadas no tópico “A química realizada em computadores que possui ferramentas capazes de auxiliar o desenvolvimento de projetos por meio da visualização espacial, da resolução de problemas, prevendo resultados,

poupando tempo e recursos” corresponde a 73% dos alunos no questionário que antecedeu as atividades e posteriormente a realização delas foi de 55%, 9% dos discentes discorreram que a química computacional “É o ramo da química que realiza simulações computacionais” antes e após a realização das atividades, outros 9% dos participantes descrevem a química computacional como sendo “O ramo da química que utiliza das ferramentas de programação no cotidiano” e após serem feitas as atividades não houve respostas dos participantes condizentes ao tópico. Dentre os alunos que alegaram não possuir conhecimento prévio sobre química computacional, um dos discentes não respondeu à pergunta no questionário, todavia o segundo aluno descreveu como “A química que usa ferramentas computacionais para visualização e simulação de experimentos”. Além disso, as respostas obtidas após a realização das atividades geraram dois novos tópicos onde, 18% dos alunos descrevem a química computacional como “A química que descreve processos complexos do cotidiano” e outros 18% descreveram-na como “O ramo da química que usa ferramentas computacionais no ensino de química”. No questionário aplicado após a aula 9% dos participantes não responderam à questão.

Os discentes que participaram das atividades relataram, em sua totalidade, que possuem algum tipo de dificuldade durante o processo de aprendizagem dos conteúdos abordados em química. Após a realização das atividades todos os alunos relataram que superaram alguma dificuldade apresentada anteriormente. A figura 24 apresenta o número de alunos para cada tipo de dificuldade apresentada e superada.

Figura 24: Dificuldades apresentadas e superadas pelos alunos no processo de aprendizagem dos conteúdos de química.

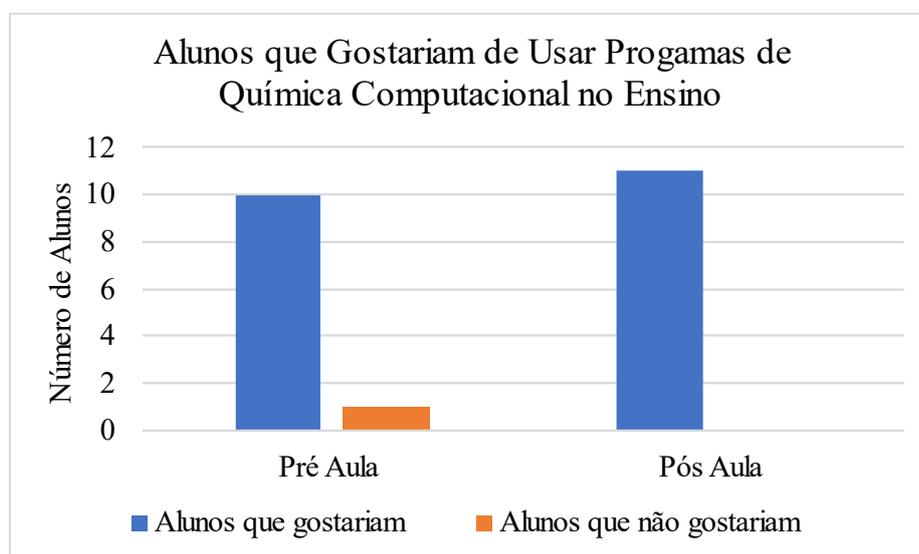


Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

O entendimento de conceitos químicos foi assinalado por 64% dos participantes como uma dificuldade apresentada durante o processo de aprendizagem dos conteúdos de química, essas dificuldades foram superadas por todos os alunos após a realização das atividades. A visualização espacial foi anotada como uma dificuldade apresentada por nove dos alunos e foi superada por dez dos participantes, já o alto grau de abstração dos conteúdos eram uma dificuldade apresentada por três alunos e foi superada por quatro alunos. Os alunos que apresentam dificuldades com a matemática usada nos conteúdos de química representam 27% dos participantes, essa dificuldade foi superada por 66% dos alunos que a apresentavam.

Os discentes foram abordados antes e após a aula sobre se desejariam usar programas de química computacional nas atividades de ensino (figura 25). No questionário aplicado pré-aula, dentre os participantes, 91% responderam que gostariam de usar essas ferramentas, os demais participantes não gostariam de seu uso e ressaltaram possuir pouca familiaridade com informática e segundo eles programas complexos que apresentam um número vasto de funcionalidades sem um design intuitivo. Posteriormente a realização das atividades, todos os alunos assinalaram que gostariam de usar esses programas nas atividades de ensino.

Figura 25: Número de alunos que gostariam de usar programas de química computacional nas atividades de ensino.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os participantes das atividades elencaram quais seriam as vantagens necessárias que deveriam estar contidas nesses programas para usá-los (tabela 3). O maior número de alunos (64%) apontou que é necessário a visualização espacial dos sistemas nesses programas. Foi citada a efetividade em pesquisa na área da química computacional por 27% dos discentes. A

efetividade e o aumento da velocidade no processo de aprendizagem foram descritos por 27% dos participantes.

Tabela 3: Vantagens necessárias para o uso dos programas de química computacional no processo de aprendizagem segundo os discentes.

Vantagens Necessárias para o Uso de Programas de Química Computacional no Processo de Aprendizagem em Química	
Vantagens	Número de Alunos
Visualização espacial.	7
Maior efetividade e velocidade na aprendizagem.	3
Efetividade em pesquisa na área da química computacional.	3

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Além disso, após a realização das atividades os alunos citaram as vantagens que puderam observar durante a realização das atividades usando programas de química computacional (tabela 4). Foi apontado por 64% dos discentes que a visualização espacial foi uma vantagem observada durante a realização das atividades, enquanto a velocidade e a facilidade na construção de um sistema e na obtenção de dados fora descrita por 46% dos participantes, outros 18% dos alunos não responderam quando questionados sobre as vantagens observadas.

Tabela 4: Vantagens observadas pelos alunos após o uso dos programas de química computacional no processo de aprendizagem em química.

Vantagens Observadas Após o Uso de Programas de Química Computacional no Processo de Aprendizagem em Química	
Vantagens	Número de Alunos
Visualização espacial.	7
Velocidade e facilidade na construção de sistemas e na obtenção de dados.	5
Não responderam.	2

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os alunos foram questionados sobre o conceito de comprimento de ligação nos formulários, suas repostas foram elencadas em diferentes grupos e são apresentadas na tabela

5. Os alunos em sua maioria descreveram o conceito de ligação química como “a distância entre os núcleos de dois átomos que formam uma ligação”, correspondendo a 73% dos participantes nos formulários aplicados antes e após a realização das atividades. Outras descrições para o conceito foram “é a distância dos elétrons de moléculas diferentes que estão realizando uma ligação” contabilizando 9% dos discentes anteriormente a realização das atividades, com o mesmo número de alunos após a realização das atividades o comprimento de ligação fora descrito como “a distância dos elétrons de átomos diferentes que estão realizando uma ligação”, a definição do comprimento de ligação como “a força de interação entre átomos formando uma ligação” foi apontada por 18% e posteriormente 9% dos alunos nos questionários pré-aula e pós-aula, respectivamente.

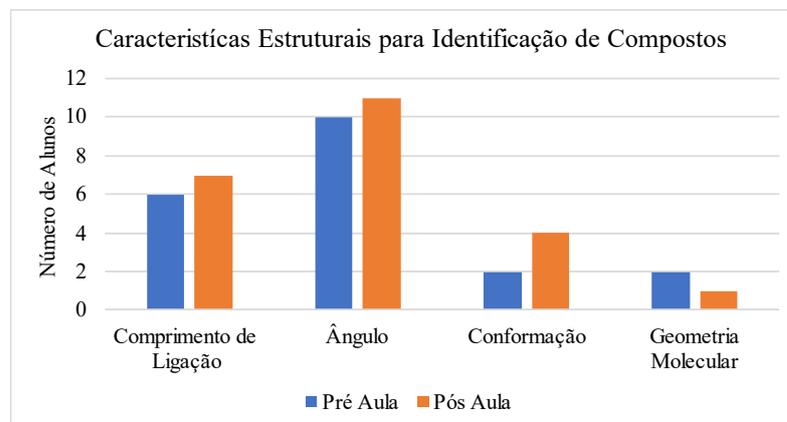
Tabela 5: Número de alunos que descreveram o conceito de comprimento de ligação de acordo com os tópicos agrupados.

Número de Alunos que Descreveram do Comprimento de Ligação		
Conceito Apresentado pelos Alunos	Pré Aula	Pós Aula
É a distância entre os núcleos de dois átomos que formam uma ligação.	8	8
É a distância dos elétrons de moléculas diferentes que estão realizando uma ligação.	1	-
É a distância dos elétrons de átomos diferentes que estão realizando uma ligação.	-	1
É a força de interação entre átomos formando uma ligação.	2	1
Não responderam	-	1

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Foi abordado com os alunos quais as características estruturais são necessárias para a identificação dos compostos (figura 26). Após a realização das atividades, foi evidenciado um aumento no número de alunos que assinalaram que o comprimento de ligação (55% para 64% dos participantes), o ângulo da molécula (91% para 100% dos discentes) e a conformação do composto (18% para 36% dos alunos) como sendo características fundamentais para a identificação de compostos. A geometria molecular agrupa moléculas, assim sendo, não é capaz de identificar especificamente uma molécula, ocorreu redução no número de alunos que citaram a geometria molecular como uma característica estrutural para identificação de compostos (18% para 9%).

Figura 26: Número de alunos que indicaram quais as características estruturais necessárias para a identificação de compostos.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Foram elencadas para os alunos afirmações que possuem correlação com os conteúdos estudados em estequiometria, os discentes também assinalaram conteúdos abordados durante o estudo dos conteúdos de estequiometria. Os dados obtidos são apresentados na tabela 6.

Tabela 6: Números de alunos que assinalaram correlação dos tópicos apresentados com os conteúdos abordados em estequiometria e tópicos elencados pelos alunos.

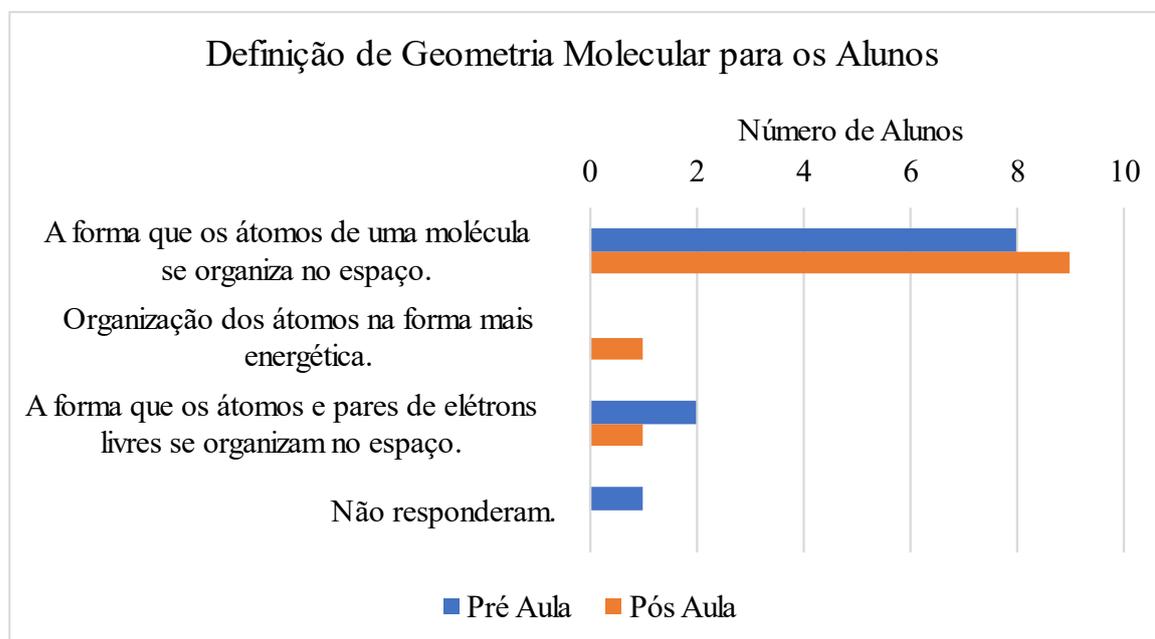
Número de Alunos que Assinalaram Relação dos Tópicos com os Conteúdos Abordados em Estequiometria		
Tópicos Assinalados	Pré-Aula	Pós-Aula
O balanceamento de equações é um tópico de estudo da estequiometria.	11	11
A estequiometria é baseada na “Lei de conservação das massas” e na “Lei das proporções constantes”.	8	10
Cálculos estequiométricos estão diretamente relacionados com as unidades dos parâmetros.	6	9
Outros Tópicos Elencados pelos Alunos	Pré-Aula	Pós-Aula
Obtenção de parâmetros para reações química: reagente limitante, pureza, excesso e rendimento dos compostos.	3	2
Tipos de ligação.	1	-

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Em sua totalidade, os alunos, assinalaram que o balanceamento de equações é um dos conteúdos abordados no estudo da estequiometria. Ocorreu um aumento no número de discentes após a realização das atividades que marcaram a opção que descreve a estequiometria se baseia na “Lei de conservação das massas” e na “Leis de proporções constantes”, 73% para 91% dos participantes. Houve aumento também no número de alunos que assinalaram que a relação das unidades dos parâmetros envolvidos em cálculos estequiométricos são abordados, 55% para 82% dos discentes. Os alunos elencaram a abordagem de parâmetros relacionados a reações químicas como reagente limitante, pureza, excesso, e rendimento, previamente as atividades 27% dos discentes assinalaram o tópico e após a realização das atividades o número de sinalizações para o tópico foi reduzido para 18%. Dentre os alunos 9% elencaram o tópico “tipos de ligação” antes de realizarem as atividades e foi reduzido para nenhum aluno após a realização delas, esse tópico descrito não faz parte dos conteúdos abordados em estequiometria.

Os questionários aplicados perguntavam aos alunos qual era a definição de geometria molecular. As respostas obtidas foram elencadas em três definições e organizadas de acordo com o número de alunos que assinalaram a definição (figura 27).

Figura 27: Definição de geometria molecular segundo os alunos participantes das atividades.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Antes da realização das atividades 9% dos alunos não responderam à pergunta, esse número foi reduzido para nenhum aluno após a realização das atividades. A definição de arranjo molecular, “a forma que os átomos e pares de elétrons livres se organizam no espaço”, foi

descrita por 18% dos alunos no questionário pré-aula e foi reduzido para 9% no questionário aplicado pós-aula. Logo, após a realização das atividades 9% dos alunos descreveram a geometria molecular como a “organização dos átomos na forma mais energética”. A definição de geometria molecular, como “a forma que os átomos de uma molécula se organiza no espaço”, foi apontada por 73% dos discentes, e após a realização das atividades houve um aumento no número de alunos para 82%.

Tabela 7: Classificação das moléculas de NH_3 , SF_4 e SF_2 quanto a sua geometria molecular pelos alunos.

Classificação da Geometria Molecular pelos Alunos			
Moléculas	Geometria	Número de Alunos	
		Pré-Aula	Pós-Aula
NH_3	Piramidal	7	8
	Triângulo planar	4	2
	Não sabiam/não responderam	-	1
SF_4	Bipirâmide de base triangular	4	2
	Quadrado Planar	3	-
	Tetraédrica	1	1
	Gangorra	2	7
	Não sabiam/não responderam	1	1
SF_2	Angular	4	11
	Linear	6	-
	Triângulo planar	1	-

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os discentes participantes classificaram a molécula de amônia, o tetraflureto de enxofre e difluoreto de enxofre de acordo com sua geometria molecular (tabela 7). Para a amônia houve um aumento do número de alunos que assinalaram sua geometria como sendo piramidal (64% para 73% dos participantes), e uma diminuição no número de alunos que a descreveram com geometria triângulo planar (36% para 18%), após a realização das atividades. Além disso, 9% dos alunos após a realização das atividades apontaram que não sabiam responder ou não responderam. O tetraflureto de enxofre foi assinalado por 36% dos discentes como possuente da geometria bipirâmide de base triangular, 27% quadro planar, 9% tetraédrica, 18% gangorra e 9% não sabiam/não responderam no questionário pré-aula. Todavia, no questionário pós-aula, a geometria molecular bipirâmide de base triangular foi apontada por

18% dos alunos, além disso 9% assinalaram a geometria tetraédrica, 64% gangorra e 9% não sabiam/não responderam. Antes da realização das atividades 36% dos alunos indicaram que o diflureto de enxofre tem geometria angular, 55% indicaram a geometria linear e 9% geometria triângulo planar. Contudo, após a realização das atividades, todos os participantes assinalaram que o composto possui a geometria molecular angular.

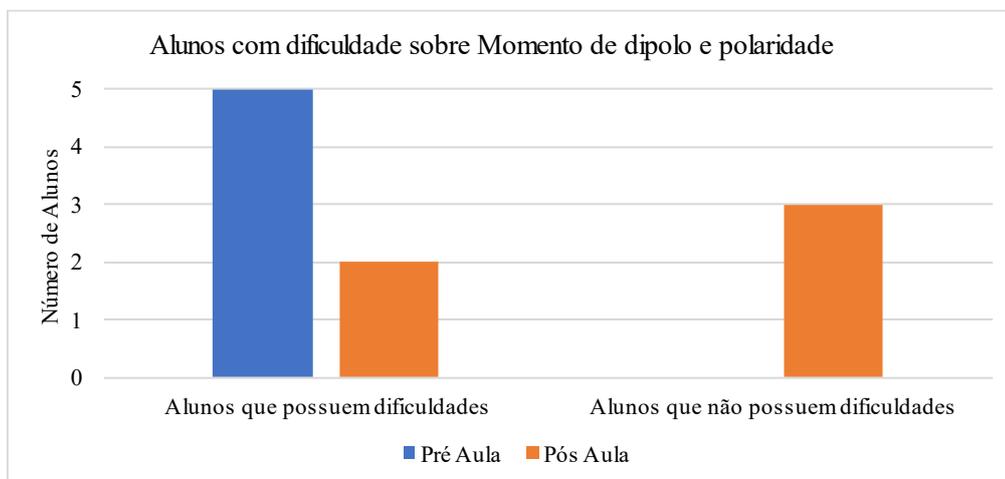
Foram elencadas diversas afirmações para os alunos que assinalaram quais estão relacionadas com a alotropia (tabela 8). A quantidade de alunos que indicaram a definição de alotropia “diferentes modificações estruturais de um elemento” permaneceu inalterada após a realização das atividades, correspondendo a 36% dos discentes. Também se manteve inalterado o número de alunos que marcaram a opção que a alotropia é a “propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas”, sendo indicada por 82% dos alunos. Ocorreu o aumento do número de alunos que assinalaram que átomos como o carbono, fósforo e enxofre apresentam formas alotrópicas, sendo 64% pré-aula e 73% pós-aula. Também houve aumento no número de alunos que marcaram a opção que o grafite e o diamante são formas alotrópicas do carbono (64% para 91% dos alunos).

Tabela 8: Número de alunos que assinalaram os conteúdos relacionados com os conceitos de alotropia.

Número de Alunos que Assinalaram os Conceitos Abordados em Alotropia		
Conceitos Abordados	Pré-Aula	Pós-Aula
Diferentes modificações estruturais de um elemento.	4	4
Propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas.	9	9
Dentre os átomos que apresentam formas alotrópicas pode-se citar o carbono, fósforo e enxofre.	7	8
Os alótropos do carbono são o grafite e o diamante.	7	10

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os formulários pré-aula e pós-aula para o segundo dia de atividades abordaram os temas de momento de dipolo, polaridade e teoria do orbital molecular. Esses formulários abordaram as dificuldades que os alunos possuem, a identificação e compreensão dos principais conceitos e avaliaram conhecimentos específicos referentes aos tópicos abordados. Os discentes participantes da pesquisa relataram que possuem conhecimento sobre os conteúdos abordados.

Figura 28: Alunos que apresentam dificuldades com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Todos os alunos possuíam dificuldade com os conceitos de momento de dipolo e polaridade e, após a realização das atividades usando o programa Avogadro, 60% dos discentes relataram não haver mais dificuldades envolvendo os tópicos abordados (figura 28).

Tabela 9: Número de alunos que assinalaram dificuldade envolvendo os conteúdos abordados sobre momento de dipolo e polaridade.

Dificuldades Assinaladas pelos Alunos Pré-Aula e Pós-Aula		
Dificuldades Apresentadas	Pré-Aula	Pós-Aula
Identificação da eletronegatividade dos átomos.	0	0
Compreensão sobre a geração de momento de dipolo parciais.	4	1
Orientação do vetor do momento de dipolo.	4	1
Classificação das moléculas em apolares ou polares.	1	0

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

As principais dificuldades trazidas pelos discentes são apresentadas na tabela 9. Os alunos relataram que não possuem dificuldade na identificação da eletronegatividade dos átomos presentes nas moléculas, entretanto 80% dos participantes possuíam dificuldades na identificação do momento de dipolo parcial, e na orientação do vetor resultante do momento de dipolo, nesse caso após a realização das atividades o número de alunos que apresentaram dificuldades com o conteúdo foi reduzido para 20%. Além disso, 20% dos alunos apresentavam dificuldades para classificar as moléculas quanto a sua polaridade antes de participar das

atividades, realizada as atividades nenhum aluno relatou apresentar dificuldade relacionada a identificação das moléculas quanto a sua polaridade.

Foram apresentados aos alunos diversos conceitos abordando os principais tópicos discutidos sobre momento de dipolo e polaridade. O número de alunos que indicaram que os conceitos abordados pertencem ao tópico é apresentado na tabela 10.

Tabela 10: Número de alunos que marcaram a opção relacionando os conceitos abordados com o conteúdo de momento de dipolo e polaridade.

Avaliação do Conhecimento dos Conceitos sobre Momento de Dipolo e Polaridade		
Conceitos abordados sobre momento de dipolo e polaridade	Pré-Aula	Pós-Aula
A capacidade de um átomo atrair mais densidade eletrônica para si gera dipolos parciais.	3	4
A orientação do momento de dipolo está relacionada com os conceitos de eletronegatividade de Pauling.	3	4
Para uma molécula poliatômica o momento de dipolo é a soma dos vetores dos momentos de dipolo gerados entre pares de átomos que realizam uma ligação química.	1	3
Moléculas que possuem momento de dipolo nulo são apolares, todavia aqueles que o momento de dipolo é não nulo são polares.	4	4
Nenhuma das afirmações acima correspondem aos conceitos de momento de dipolo e polaridade.	-	-

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A totalidade de participantes marcaram pelo menos uma opção dentre os conceitos abordados sendo relacionado com os tópicos de momento de dipolo e polaridade. Além disso, não houve tópicos em que 100% dos alunos assinalaram estar presente no estudo dos conteúdos abordados. Todavia, ocorreu uma melhora significativa na percepção dos alunos quando abordados sobre a orientação do momento de dipolo e sua magnitude em moléculas poliatômicas, onde ele é dado pela soma de vetores, enquanto antes a aula apenas 20% identificaram o conceito abordado, após a aula 60% identificaram. A relação da distribuição de cargas nas moléculas devido a existência da eletronegatividade dos átomos gera polos sobre os átomos e, estão relacionadas com a orientação do momento de dipolo, 60% dos alunos marcaram a opção desse comportamento, e após o uso da ferramenta computacional ocorreu

um aumento para 80% dos participantes. Entretanto não houve alterações no número de alunos (80%) que assinalaram a classificação das moléculas em apolares e polares usando o vetor do momento de dipolo pertencente ao conteúdo abordado nesses tópicos.

Os alunos classificaram um conjunto de moléculas de acordo com sua polaridade (tabela 11). Os dados coletados mostram que os alunos não possuem dificuldades para a classificação de moléculas quando elas apresentam um átomo mais eletronegativo quando comparado aos demais, para esses casos 100% dos participantes acertaram a classificação das moléculas de C_2H_4O e CH_3Cl , sendo essas polares. Contudo, a existência de pares de elétrons livres causa dificuldades para os alunos classificarem os compostos, de forma geral as moléculas de BF_3 , BCl_3 e NH_3 têm sua fórmula molecular expressa por XY_3 , no espaço a existência de um par de elétrons livre no átomo X ocasiona a alteração do comportamento planar das moléculas, assim sendo caracterizadas por meio de uma geometria molecular piramidal onde a soma dos vetores do momento de dipolo entre os átomos XY não se anulam. Todavia, para as moléculas BF_3 e BCl_3 , que possuem geometria triangular plana e caráter apolar, houve aumento no número de alunos que conseguiram identificar corretamente esse comportamento. Para a molécula de BF_3 , 80% dos alunos identificaram corretamente no formulário pré-aula e 100% deles no questionário pós-aula, enquanto para a molécula de BCl_3 o aumento foi de 40% para 80% dos participantes. A amônia possui caráter polar e geometria molecular piramidal, o número de alunos que identificaram corretamente a polaridade da molécula antes da aula foi de 40% e após foi de 60%.

Tabela 11: Classificação das moléculas quanto a polaridade.

Classificação das Moléculas quanto a Polaridade				
Questionário Moléculas	Pré-Aula		Pós-Aula	
	Apolar	Polar	Apolar	Polar
C_2H_4O	-	5	-	5
BF_3	4	1	5	-
BCl_3	2	3	4	1
CH_3Cl	-	5	-	5
NH_3	3	2	2	3

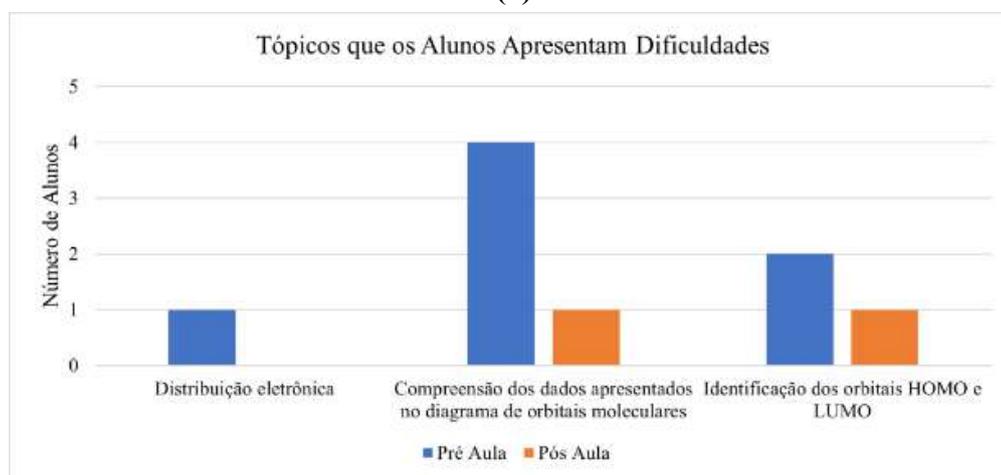
Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os alunos participantes das atividades, em sua totalidade, relataram possuir dificuldades com os conceitos abordados na TOM, entretanto a aplicação das atividades computacionais ocasionou a redução para 40% do número de alunos que apresentam dificuldades com o conteúdo (figura 29a). Os discentes possuíam dificuldades com os tópicos de distribuição eletrônica, inicialmente 20% dos alunos, após a realização das atividades não houve participantes que relataram dificuldade com esse item. O tópico que mais gera dificuldade para compreensão dos alunos é a interpretação dos dados apresentados no diagrama de energia, 80% dos discentes apresentaram dificuldades, houve uma diminuição significativa para 20% dos participantes após a realização das atividades usando o programa Avogadro. Além disso, reduziu-se o número de alunos que possuíam dificuldades na identificação dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), passando de 40% para 20% dos alunos.

Figura 29: Número de alunos que apresentam (a) dificuldades sobre os conceitos abordados na Teoria do Orbital Molecular e (b) tópicos que os alunos possuem dificuldades.



(a)



(b)

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os principais tópicos abordados na TOM foram elencados e o número de alunos que correlacionaram os conceitos como sendo componentes do tema abordado é apresentado na tabela 12.

Tabela 12: Número de alunos que assinalaram a relação dos conceitos abordados com o conteúdo da Teoria do Orbital Molecular.

Avaliação do Conhecimento dos Conceitos sobre Teoria do Orbital Molecular		
Conceitos abordados sobre teoria do orbital molecular	Pré-Aula	Pós-Aula
A teoria do orbital molecular descreva a ligação química como uma combinação linear de funções de onda.	1	3
Orbitais moleculares são formados pela combinação linear de orbitais atômicos.	1	3
O número de orbitais moleculares formados é igual a soma do número de orbitais atômicos de cada átomo.	4	3
O orbital chamado de HOMO é aquele que possui elétrons e é o mais energético enquanto o LUMO é o de menor energia que não têm elétrons.	2	3
Nenhuma das afirmações acima correspondem a conceitos abordados na teoria do orbital molecular.	-	-
Não responderam.	-	1

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os dados mostram que os alunos possuem compreensão limitada dos conceitos abordados na TOM. O número de alunos que entendem que a TOM descreve as ligações químicas e que os orbitais moleculares são formados pela combinação linear dos orbitais atômicos são de 20%. Apenas 40% dos alunos avaliaram que os conceitos que marcaram a opção que descreve os orbitais de fronteira sendo abordados na TOM, e 80% dos discentes relatam que o número de orbitais moleculares formados é igual ao número de orbitais atômicos. De forma geral, após a aula houve um aumento no número de alunos que conseguiram identificar os tópicos que fazem parte da TOM, para todos os tópicos passando para 60% dos participantes, exceto para a identificação da quantidade de orbitais moleculares que são formados a partir dos orbitais atômicos que ocorreu a diminuição da indicação dos alunos (80% para 60%).

Tabela 13: Avaliação de parâmetros para a construção do diagrama de orbitais moleculares.

Avaliação do Conhecimentos dos Alunos para Construção do Diagrama de Orbital Molecular														
Questionários	Pré-Aula						Pós-Aula							
	Perguntas		Sim	Não	Não sei		Sim	Não	Não sei					
Para você os orbitais atômicos do tipo “p” possuem a mesma energia?			2	3	-		2	3	-					
Para você os orbitais moleculares formados possuem a mesma energia?			-	4	1		-	5	-					
Dentro dos seus conhecimentos serão formados orbitais moleculares ligantes e antiligantes?			4	-	1		5	-	-					
			Quatro	Cinco	Seis	Sete	Oito	Não Sei	Quatro	Cinco	Seis	Sete	Oito	Não Sei
Para você será formado quantos orbitais moleculares a partir dos orbitais atômicos do tipo “p”?			2	1	-	-	-	2	2	-	3	-	-	-
Quantos elétrons ocuparam os orbitais moleculares que possuem contribuição dos orbitais atômicos do tipo “p”?			2	-	-	1	1	1	-	-	-	-	5	-

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os conceitos usados para a construção do diagrama de energia para o gás oxigênio foram abordados nos questionários, as respostas dos discentes são apresentadas na tabela 13. Os orbitais atômicos de momento angular “p” para o átomo de oxigênio são degenerados, 40% dos alunos compreendem esse conceito, todavia não ocorreu mudanças após a realização das atividades. Os orbitais moleculares formados não possuem a mesma energia dos orbitais atômicos que contribuem para sua forma, e ao serem formados apresentam orbitais ligantes e antiligantes. Após o uso do programa Avogadro houve um aumento na quantidade de alunos que conseguiram entender esses conceitos passando de 80% para 100% dos participantes. São formados seis orbitais moleculares a partir dos orbitais atômicos do tipo “p” para a molécula de O_2 , nenhum dos alunos indicou a opção no questionário pré-aula, 40% dos discentes apontaram que são formados quatro orbitais moleculares, 20% disseram que seriam formados cinco orbitais moleculares e 40% dos alunos não sabiam responder. Todavia, no questionário aplicado após as atividades, 40% dos alunos continuaram assinalando a opção que são formadas quatro orbitais moleculares e 60% dos discentes marcaram corretamente a opção que são formados seis orbitais moleculares a partir dos orbitais atômicos de momento angular “p”. Houve um crescimento expressivo na compreensão dos alunos para o número de elétrons que ocupam orbitais moleculares formados a partir da contribuição de orbitais atômicos do tipo “p”. Previamente a realização das atividades 40% dos alunos assinalaram quatro elétrons, 20% sete elétrons, 20% oito elétrons e 20% não sabiam responder e, posteriormente a realização das atividades, 100% dos alunos marcaram corretamente a opção que oito elétrons ocupam os orbitais moleculares formados.

4.3 AVALIAÇÃO DO USO DO PROGRAMA AVOGADRO NAS ATIVIDADES DE ENSINO PROPOSTAS

Anteriormente a realização das aulas, 82% dos alunos disseram possuir conhecimento sobre química computacional. A interpretação dos discentes que descrevem a química computacional foi baseada no uso de ferramentas computacionais para auxiliar na visualização espacial e na resolução de problemas, também foram abordadas algumas vantagens do uso de programas computacionais, como diminuição de tempo e baixo custo. Realizadas as atividades, 18% assinalaram que a química computacional usa ferramentas para auxiliar no ensino. Os dados apresentados mostram que os discentes interpretam a química computacional como ferramentas, não conseguindo visualizar como uma área química que utiliza métodos matemáticos por meio de ferramentas computacionais para o cálculo de propriedades etc.

Os alunos em sua totalidade relataram que possuem algum tipo de dificuldade no processo de aprendizagem em química, foram destacadas as dificuldades com entendimento dos conceitos, visualização espacial, alto grau de abstração e dificuldades com matemática. A realização das atividades na primeira aula abordando os tópicos de estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular e alotropia mostrou a efetividade do uso do programa Avogadro nas atividades, os discentes relataram superar as dificuldades que eles possuíam, com destaque para a dificuldade com visualização espacial, onde 91% dos alunos apontaram superar essa dificuldade.

Os discentes em sua maioria (91%) apontaram que gostariam de usar programas de química computacional previamente as atividades realizadas, os alunos que não desejavam (9%) assinalaram possuir dificuldades com informática e que os programas de química computacional seriam complexos. Entretanto, após a realização das atividades todos os participantes gostariam de usá-los, indicando, assim, que o Avogadro é um programa de fácil utilização e que pode contribuir no ensino. Além disso, os alunos elencaram a visualização espacial, a maior efetividade e rapidez no ensino e a efetividade em pesquisas como características necessárias para o uso dessas ferramentas. A realização das atividades com o Avogadro apresentou vantagens no uso de ferramentas computacionais no ensino, os participantes elencaram a visualização espacial, a velocidade e facilidade na construção de sistemas e na obtenção de dados.

A descrição do conceito que define o comprimento de ligação não houve mudanças significativas na quantidade de alunos que apresentaram interpretações alternativas, porém a quantidade de alunos que o descreveram como “a distância entre os núcleos de dois átomos que formam uma ligação” (73%) permaneceu inalterada. Porém, houve uma mudança expressiva no número de alunos que compreenderam que para a identificação de uma molécula é necessária analisar os comprimentos de ligação, o ângulo formado entre os átomos e a conformação da molécula. Em adição, houve uma diminuição no número de alunos que apontaram a geometria molecular como uma característica capaz de identificar uma molécula, uma vez que a geometria molecular organiza as moléculas em determinados grupos de acordo com a posição espacial dos átomos.

Também foi abordada a definição de geometria molecular para os alunos. Nesse caso não ocorreram mudanças significativas na descrição do conceito assinalado pelos discentes. Entretanto, ocorreu um aumento no número de alunos, de 73% para 82%, que descreveram a geometria molecular como a forma que os átomos de uma molécula se organizam no espaço. Foi possível observar que 18% dos alunos confundiram o conceito de geometria molecular com

arranjo molecular, a realização das atividades ocasionou na diminuição dessa interpretação para 9% dos participantes.

Conceitos que são abordados no ensino de estequiometria foram assinalados pelos alunos e houve um aumento significativo no número de alunos que conseguiram correlacionar os tópicos. O conteúdo baseado nos princípios de conservação e das proporções constantes, a realização das atividades auxiliara os alunos na percepção desses princípios, inicialmente 73% dos discentes assinalaram e após a aula foram 91%. Além disso, a correlação das unidades dos parâmetros calculados em estequiometria é fundamental para obtenção de dados, o número de alunos que assinalaram relação com o conteúdo de estequiometria aumentou de 55% para 82%. E, na sua totalidade, os participantes conseguiram correlacionar o balanceamento de equações com o tópico. Os alunos também elencaram tópicos estudados em estequiometria relacionados a cálculos como a obtenção de parâmetros como reagente limitante, excesso, pureza e rendimento dos compostos. Concepções apresentadas pelos alunos que a discussão de ligações químicas era um tópico de estequiometria, após a realização das atividades não foram apresentadas por nenhum dos participantes.

No tópico de alotropia foram apresentadas sua definição onde 36% dos alunos assinalaram possuindo correlação com o conteúdo, a alteração das propriedades físico-químicas dos compostos devido a mudança estrutural foi indicada por 82% dos discentes. Todavia, as discussões e a visualização de compostos no programa Avogadro, realizadas durante as atividades auxiliaram os participantes a perceberem que outros elementos como o enxofre e fósforo também possuem formas alotrópicas (64% para 73%), e conseguiram perceber que o grafite e o diamante são forma alotrópicas do carbono (73% para 91% dos discentes).

A visualização espacial foi o aspecto fundamental para a classificação das moléculas de acordo com sua geometria molecular, o auxílio das ferramentas computacionais ocasionou no aumento de 64% para 73% dos discentes que assinalaram a geometria piramidal para a amônia, além de ocasionar uma redução de 36% para 18% dos discentes que relataram a geometria triângulo planar para a molécula. Houve uma melhora expressiva quando se tratou da geometria molecular para o tetraflureto de enxofre de 18% para 64% dos discentes que assinalaram a geometria gangorra, mesmo com os campos de força usados para otimização de geometria no Avogadro não representarem corretamente a geometria do composto. Para o diflureto de enxofre, 55% dos discentes assinalavam que o composto apresentava geometria molecular linear, após a realização das atividades todos os discentes descreveram a geometria molecular como sendo angular.

Todos os discentes participantes das atividades apontaram possuir dificuldade nos conteúdos abordados sobre momento de dipolo e polaridade, o uso das ferramentas computacionais reduziu para 40% os alunos que possuem dificuldades. Os principais conceitos que o uso do Avogadro auxiliou a superar nas dificuldades dos alunos foi a compreensão da geração de momentos de dipolo parciais e a orientação do vetor resultante do momento de dipolo, para os dois tópicos houve uma redução de 80% para 20% dos discentes que relataram dificuldades. As atividades realizadas também auxiliaram os alunos a identificarem os conceitos que são abordados e discutidos no conteúdo, houve um aumento expressivo no número de alunos (20% para 60%) que passaram a compreender que o vetor do momento de dipolo resultante, em uma molécula poliatômica, é a soma dos vetores dos momentos de dipolo parcial, isso ocorre devido a análise da superfície de potencial eletrostático apresentar diferentes regiões com densidade de carga diferente, e a adição do vetor de momento de dipolo no programa apresenta um único vetor, o vetor resultante. Além disso, as atividades realizadas auxiliaram na classificação das moléculas quanto a sua polaridade, o tricloreto de boro classificado como apolar devido sua geometria plana, não apresentando elétrons livres, foi classificado como apolar por 40% dos alunos antes da realização das atividades, após a realização 80% dos discentes classificaram corretamente. Para a molécula de amônia houve um aumento de 40% para 60% dos participantes que a classificaram como polar. Dessa forma, o programa Avogadro foi uma ferramenta útil para o ensino desse conteúdo.

Os alunos que relataram apresentar dificuldades com os conteúdos de teoria do orbital molecular, em sua totalidade antes da realização das aulas, diminuiu para 40% após a atividade. A atividade realizada com o auxílio do programa Avogadro ocasionou na diminuição das dificuldades apresentadas pelos alunos sobre o conteúdo. Os tópicos elencados pelos participantes foram distribuição eletrônica, com 20% dos alunos apresentando dificuldade e, posteriormente, nenhum deles relataram dificuldades. As dificuldades apresentadas na compreensão dos dados expressos no diagrama de energia foram reduzidas de 80% para 20% dos discentes, e de 40% para 20% na identificação dos orbitais de fronteira. Além disso, a atividade realizada contribuiu significativamente para os participantes correlacionarem e compreenderem sobre tópicos abordados no ensino do conteúdo, principalmente que a teoria é capaz de descrever ligações químicas como a combinação linear de funções de onda atômicas, e a formação dos orbitais moleculares a partir da combinação linear de orbitais atômicos. Houve também uma contribuição expressiva para auxiliar os alunos na montagem e interpretação dos dados descritos no diagrama de energia para o gás oxigênio, a visualização dos orbitais moleculares formados no programa contribuiu para o aumento do número de alunos que

visualizaram a diferença de energia dos orbitais moleculares formados a partir de orbitais atômicos, assim como a formação de orbitais moleculares ligantes e antiligantes, foi de 80% para todos os participantes.

De forma geral, para todos os tópicos abordados houve aumento no número de alunos que assinalaram correlação dos conceitos abordados com os tópicos trabalhados, além de aumentar o número de alunos que identificaram corretamente as características para identificação de moléculas, a classificação de moléculas quanto a sua polaridade e as principais características para a construção do diagrama de energia do gás oxigênio. Nesse contexto, mostrou-se que a metodologia de ensino empregada, com auxílio do programa Avogadro, durante as aulas foi capaz de auxiliar os alunos durante o processo de ensino-aprendizagem.

5 CONCLUSÃO

No presente trabalho foi desenvolvido um conjunto de seis atividades, que foram aplicadas para alunos da disciplina de Química Geral dos cursos de Licenciatura e Bacharelado em Química visando avaliar a efetividade do uso do programa Avogadro como ferramenta auxiliar no processo de ensino-aprendizagem de química.

As seis atividades foram desenvolvidas para serem aplicadas com o programa Avogadro, abordando os conteúdos de estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), geometria molecular, estequiometria, alotropia, momento de dipolo e polaridade e teoria do orbital molecular, apresentando um elevado número de conceitos para serem discutidos durante sua aplicação. Além disso, foram apresentadas as ferramentas do programa usadas e a resolução das atividades usando o Avogadro.

Na aplicação das atividades os discentes participantes responderam formulários pré-aula e pós-aula, que abordaram tópicos gerais de química computacional, as dificuldades apresentadas pelos discentes no processo de ensino-aprendizagem, a compreensão e identificação de conceitos e aplicação deles.

Após a realização das atividades todos os alunos participantes relataram que desejariam usar ferramentas computacionais no ensino, foram ressaltadas a possibilidade da visualização espacial e a maior efetividade e velocidade durante esse processo como as principais vantagens no uso dessas ferramentas. Os dados apresentados mostram que o Avogadro é uma ferramenta útil para auxiliar no processo de ensino-aprendizagem. Em todos os tópicos abordados houve aumento no número de alunos que apresentaram maior entendimento dos conceitos, com ênfase para aqueles que envolviam visualização espacial, seja do composto, seus orbitais ou distribuições de carga.

De forma geral o Avogadro apresentou-se como uma ferramenta útil na descrição de conceitos durante as atividades de ensino-aprendizagem. As atividades realizadas com auxílio do programa colaboraram para a percepção dos discentes em vários conceitos abordados nos tópicos trabalhados. Por fim, a visualização espacial foi o elemento trazido pelas ferramentas usadas que possui maior influência no auxílio da aprendizagem dos alunos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALMEIDA, W. B. de; SANTOS, H. F. dos. Observações experimentais e modelos teóricos. **Química Nova na Escola**, v. 4, p. 6–13, 2001.
- ARROIO, A.; HONÓRIO, K. M.; WEBER, K. C.; HOMEM-DE-MELLO, P.; SILVA, A. B. F. da. O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. **Química Nova**, v. 28, n. 2, p. 360–363, 2005.
- ATKINS, P. W.; JONES, L. L. **Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 5. ed. [s.l: s.n.]848 p.
- AUSUBEL, D. P.; NOVAK, J. D.; HANESIAN, H. **Psicologia Educacional**. Rio de Janeiro: Editora Interamericana, 1980. 383 p.
- BEDIN, E.; DEL PINO, J. C. Da discência à docência: concepções e perspectivas na formação inicial de professores de química sobre a Sequência Didática – SD. **Revista Exitus**, v. 9, n. 1, p. 119, 1 jan. 2019. Disponível em: <<http://www.ufopa.edu.br/portaldeperiodicos/index.php/revistaexitus/article/view/718>>.
- BEKMAN, L. da S.; LIMA, R. C. P. de; ALMEIDA, L. C. de. Integração de um aplicativo de química em uma sequência didática à luz dos princípios de David Ausubel. **Ambiente: Gestão e Desenvolvimento**, p. 13–38, 22 set. 2021. Disponível em: <<https://periodicos.uerr.edu.br/index.php/ambiente/article/view/649>>.
- BERBEL, N. A. N. BERBEL A problematizacao e a aprendizagem baseada em problemas. **Interface – Comunic, Saúde, Educ** 2, p. 139–154, 1998.
- BERNARDI, S. T. Utilização de Softwares Educacionais nos Processos de Alfabetização, de Ensino e Aprendizagem com uma Visão Psicopedagógica. p. 1–15, 2010.
- BROWN, T. L.; LEMAY, H. E.; BURSTEN, B. E.; CATHERINE, J.; PETRUCCI, R. H.; HARWOOD, W. S.; HERRING, F. G.; MADU-, J. D.; THOMSON, C. A.; COLE, B.; HORTON, H. R.; MORAN, L.; SCRIMGEOUR, K. G.; PERRY, M. **Química a ciência central**. 13. ed. [s.l: s.n.]1157 p.
- BURKE, K. A.; GREENBOWE, T. J.; WINDSCHITL, M. A. Developing and Using Conceptual Computer Animations for Chemistry Instruction. **Journal of Chemical Education**, v. 75, n. 12, p. 1658, 1 dez. 1998. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed075p1658>>.
- DE ALMEIDA, G. B.; DA BORGES, R. S.; RAUL DE SÁ, É. A. Simulações Computacionais: Uma Proposta de Transposição Didática no Ensino de Química Computer Simulations: A

Proposal for Didactic Transposition in Chemistry Teaching. **RCT - Revista de Ciência e Tecnologia**, v. 7, n. 0, 2021. Disponível em: <<https://revista.ufrr.br/rct/article/view/6786>>.

DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, v. 117, n. 778, p. 610–624, fev. 1928. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01328377>>.

DUARTE, H. A. Ligações Químicas: Ligação Iônica, Covalente e Metálica. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, p. 4, 2001.

DUARTE, H. A.; ROCHA, W. R. Teoria do Funcional de Densidade. *In*: MARINHO, J. R. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. 1. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2007. p. 73–111.

EALY, J. B. Students? Understanding Is Enhanced Through Molecular Modeling. **Journal of Science Education and Technology**, v. 13, n. 4, p. 461–471, dez. 2004. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10956-004-1467-x>>.

FELLER, S. E.; DALLINGER, R. F.; MCKINNEY, P. C. A Program of Computational Chemistry Exercises for the First-Semester General Chemistry Course. **Journal of Chemical Education**, v. 81, n. 2, p. 283, 1 fev. 2004. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed081p283>>.

FELTRE, R. **Química: química geral**. [s.l.: s.n.]v. 1670 p.

FIRMINO, E. D. S.; SAMPAIO, C. D. G.; NOJOSA, A. C. B.; GUERRA, M. H. F. S.; SALDANHA, G. C. B.; VASCONCELOS, A. K. P.; BARROSO, M. C. da S. Uso do Software Avogadro no Ensino de Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE). **Revista ENCITEC**, v. 10, n. 2, p. 67, 17 jun. 2020. Disponível em: <<http://srvapp2s.santoangelo.uri.br/seer/index.php/encitec/article/view/3026>>.

GILBERT, J. K. Visualization: A Metacognitive Skill in Science and Science Education. *In*: **Visualization in Science Education**. Dordrecht: Springer Netherlands, 2005. p. 9–27.

HANWELL, M. D.; CURTIS, D. E.; LONIE, D. C.; VANDERMEERSCH, T.; ZUREK, E.; HUTCHISON, G. R. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. **Journal of Cheminformatics**, v. 4, n. 1, p. 17, 13 dez. 2012. Disponível em: <<https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/1758-2946-4-17>>.

HARTSHORN, R. M.; HELLWICH, K.-H.; YERIN, A.; DAMHUS, T.; HUTTON, A. T. Brief guide to the nomenclature of inorganic chemistry. **Pure and Applied Chemistry**, v. 87, n. 9–10, p. 1039–1049, 1 out. 2015. Disponível em: <<https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/pac-2014-0718/html>>.

- HAYNES, W. N.; LIDE, D. R.; BRUNO, T. J. **CRC Handbook of Chemistry and Physics**. 95. ed. [s.l.] CRC Press, 2014. 2666 p.
- HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous Electron Gas. **Physical Review**, v. 136, n. 3B, p. B864–B871, 9 nov. 1964. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>>.
- HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. **Inorganic chemistry**. [s.l: s.n.]1–1213 p.
- JOHNSTONE, A. H. The development of chemistry teaching: A changing response to changing demand. **Journal of Chemical Education**, v. 70, n. 9, p. 701, 1 set. 1993. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed070p701>>.
- JONES, L. L.; JORDAN, K. D.; STILLINGS, N. A. Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 6, n. 3, p. 136–149, 2005. Disponível em: <<http://xlink.rsc.org/?DOI=B5RP90005K>>.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. **Physical Review**, v. 140, n. 4A, p. A1133–A1138, 15 nov. 1965. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>>.
- LEAL, R. C.; NETO, J. M. M.; LIMA, F. D. C. A.; FEITOSA, C. M. The quantum chemistry in the understanding of theories of organic chemistry. **Química Nova**, v. 33, n. 5, p. 1211–1215, 2010.
- LISTYARINI, R. V. Implementation of Molecular Visualization Program for Chemistry Learning. **Prisma Sains : Jurnal Pengkajian Ilmu dan Pembelajaran Matematika dan IPA IKIP Mataram**, v. 9, n. 1, p. 64, 30 jun. 2021. Disponível em: <<http://e-journal.undikma.ac.id/index.php/prismasains/article/view/3941>>.
- LOK, M. **The IUPAC Compendium of Chemical Terminology**. Research Triangle Park, NC: International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), 2019. 135–151 p.
- MACHADO, A. S. Uso de Softwares Educacionais, Objetos de Aprendizagem e Simulações no Ensino de Química. **Química Nova na Escola**, v. 38, n. 2, p. 104–111, 2016.
- MELIA, L. F.; BARRIONUEVO, S. D.; IBÁÑEZ, F. J. Think Outside the Lab: Modeling Graphene Quantum Dots in Pandemic Times. **Journal of Chemical Education**, v. 99, n. 2, p. 745–751, 8 fev. 2022. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.1c00879>>.
- MILLS, I. A. N.; HOMANN, K.; CVITAS, T.; KALLAY, N.; KUCHITSU, K. **Quantities, units and symbols in physical chemistry**. [s.l: s.n.]165 p.
- MINKIN, V. I. Glossary of terms used in theoretical organic chemistry. **Pure and Applied Chemistry**, v. 71, n. 10, p. 1919–1981, 30 out. 1999. Disponível em:

<<https://www.degruyter.com/document/doi/10.1351/pac199971101919/html>>.

MORGON, N. H. Computação em química teórica: Informações técnicas. **Química Nova**, v. 24, n. 5, p. 676–682, 2001.

MORTIMER, E. F.; MOL, G.; DUARTE, L. P. Regra do Octeto e Teoria da Ligação Química no Ensino Médio: Dogma ou Ciência? **Química Nova**, v. 17, n. 3, p. 243–252, 1994.

MULLER, P. Glossary of terms used in physical organic chemistry (IUPAC Recommendations 1994). **Pure and Applied Chemistry**, v. 66, n. 5, p. 1077–1184, 1 jan. 1994. Disponível em: <<https://www.degruyter.com/document/doi/10.1351/pac199466051077/html>>.

NEESE, F. The ORCA program system. **WIREs Computational Molecular Science**, v. 2, n. 1, p. 73–78, 28 jan. 2012. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/wcms.81>>.

NEESE, F. Software update: The <scp>ORCA</scp> program system—Version 5.0. **WIREs Computational Molecular Science**, v. 12, n. 5, p. 1–15, 7 set. 2022. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/wcms.1606>>.

PASCHOAL, C. R. S.; PASCHOAL, D. F. da S.; ABREU, P. A. Ferramentas digitais gratuitas online: um olhar sobre as suas funcionalidades no ensino/ Free online digital tools: a look at their teaching functionalities. **Brazilian Journal of Development**, v. 7, n. 10, p. 96544–96562, 2021.

PHANKINGTHONGKUM, S.; LIMPANUPARB, T. A virtual alternative to molecular model sets: a beginners' guide to constructing and visualizing molecules in open-source molecular graphics software. **BMC Research Notes**, v. 14, n. 1, p. 66, 17 dez. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1186/s13104-021-05461-7>>.

POZO, J. I. **A Solução de Problemas: Aprender a Resolver, Resolver para Aprender**. [s.l.: s.n.]178 p.

RUSSELL, J. W.; KOZMA, R. B.; JONES, T.; WYKOFF, J.; MARX, N.; DAVIS, J. Use of Simultaneous-Synchronized Macroscopic, Microscopic, and Symbolic Representations To Enhance the Teaching and Learning of Chemical Concepts. **Journal of Chemical Education**, v. 74, n. 3, p. 330, 1 mar. 1997. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed074p330>>.

SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. **Annalen der Physik**, v. 384, n. 6, p. 489–527, 1926. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/andp.19263861802%0Ahttps://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19263861802%0Ahttps://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/andp.19263861802>>.

SIMPSON, S.; AUTSCHBACH, J.; ZUREK, E. Computational Modeling of the Optical Rotation of Amino Acids: An 'in Silico' Experiment for Physical Chemistry. **Journal of Chemical Education**, v. 90, n. 5, p. 656–660, 14 maio 2013. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ed300680g>>.

SIMPSON, S.; LONIE, D. C.; CHEN, J.; ZUREK, E. A Computational Experiment on Single-Walled Carbon Nanotubes. **Journal of Chemical Education**, v. 90, n. 5, p. 651–655, 14 maio 2013. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ed3006067>>.

SNYDER, H. D.; KUCUKKAL, T. G. Computational Chemistry Activities with Avogadro and ORCA. **Journal of Chemical Education**, v. 98, n. 4, p. 1335–1341, 13 abr. 2021. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.0c00959>>.

TORRES QUEZADA, C.; VARELA GANGAS, P.; FRÍAS, M. V.; FLORES-MORALES, P. Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. **Educación Química**, v. 28, n. 2, p. 91–98, abr. 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.eq.2016.08.004>>.

TRINDADE, J. O. da; HARTWIG, D. R. Uso Combinado de Mapas Conceituais e Estratégias Diversificadas de Ensino: Uma Análise Inicial das Ligações Químicas. **Química Nova na Escola**, v. 34, p. 83–91, 2012.

VAN DE WATERBEEMD, H.; CARTER, R. E.; GRASSY, G.; KUBINYI, H.; MARTIN, Y. C.; TUTE, M. S.; WILLETT, P. Glossary of terms used in computational drug design (IUPAC Recommendations 1997). **Pure and Applied Chemistry**, v. 69, n. 5, p. 1137–1152, 1 jan. 1997. Disponível em: <<https://www.degruyter.com/document/doi/10.1351/pac199769051137/html>>.

WEINTROP, D.; BEHESHTI, E.; HORN, M.; ORTON, K.; JONA, K.; TROUILLE, L.; WILENSKY, U. Defining Computational Thinking for Mathematics and Science Classrooms. **Journal of Science Education and Technology**, v. 25, n. 1, p. 127–147, 8 fev. 2016. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10956-015-9581-5>>.

YONEDA, J. D.; HUGUENIN, J. A. O. Proposta de sequência didática para disciplina de Química Geral explorando o uso de tecnologias digitais. **Revista Docência do Ensino Superior**, v. 8, n. 2, p. 60–77, 10 dez. 2018. Disponível em: <<https://periodicos.ufmg.br/index.php/rdes/article/view/2519>>.

ZABALA, A. **A prática educativa - como ensinar**. [s.l.] Artemed, 1998. 224 p.

APÊNDICE A – Formulário aplicado pré-aula no primeiro dia.

**FORMULÁRIO PRÉ-AULA (ESTRUTURA MOLECULAR, ESTEQUIOMETRIA,
GEOMETRIA MOLECULAR E ALOTROPIA)**

1. Você já ouviu falar sobre química computacional? Sim. Não.

Como você descreveria a química computacional?

2. Quais são as dificuldades apresentadas no processo de aprendizagem dos conteúdos de química?

- Entendimento dos conceitos. Alto grau de abstração dos conteúdos.
 Dificuldade de visualização espacial. Dificuldade com matemática.
 Outras: _____

3. Você gostaria de usar programas de química computacional durante as atividades de ensino?

- Sim. Não.

Quais vantagens seriam necessárias para usar os programas de química computacional? Por quê?

4. Para você o que é o comprimento de uma ligação?

5. Quais características estruturais de uma molécula podemos usar para identificá-la?

- Comprimento de ligação. Ângulo entre os átomos. Conformação.
 Outros: _____

6. Assinale as afirmações que você entende que estão relacionadas com a estequiometria.

O balanceamento de equações é um tópico de estudo de estequiometria.

A estequiometria é baseada na “Lei de conservação das massas” e na “Lei das proporções constantes.

Cálculos estequiométricos estão diretamente relacionados com as unidades dos parâmetros calculados.

Quais outros tópicos/conteúdos e/ou métodos você enxerga como fundamentais no estudo de estequiometria?

7. Para você o que é geometria molecular?

Dentro dos seus conhecimentos quais são as geometrias moleculares das moléculas abaixo?

a) XeOF₄: _____

b) NH₃: _____

c) SF₄: _____

d) ICl₄⁻: _____

e) SF₂: _____

8. Considerando seus conhecimentos, assinale as alternativas as afirmações relacionadas ao conceito de alotropia?

Diferentes modificações estruturais de um elemento.

Propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas.

Dentre os átomos que apresentam formas alotrópicas pode-se citar o carbono, fósforo e enxofre.

Os alótropos do carbono são o grafite e o diamante.

6. Assinale as afirmações que você entende que estão relacionadas com a estequiometria.

O balanceamento de equações é um tópico de estudo de estequiometria.

A estequiometria é baseada na “Lei de conservação das massas” e na “Lei das proporções constantes.

Cálculos estequiométricos estão diretamente relacionados com as unidades dos parâmetros calculados.

Quais outros tópicos/conteúdos e/ou métodos você enxerga como fundamentais no estudo de estequiometria?

7. Para você o que é geometria molecular?

Dentro dos seus conhecimentos quais são as geometrias moleculares das moléculas abaixo?

f) XeOF₄: _____

g) NH₃: _____

h) SF₄: _____

i) ICl₄⁻: _____

j) SF₂: _____

8. Considerando seus conhecimentos, assinale as alternativas as afirmações relacionadas ao conceito de alotropia?

Diferentes modificações estruturais de um elemento.

Propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas.

Dentre os átomos que apresentam formas alotrópicas pode-se citar o carbono, fósforo e enxofre.

Os alótropos do carbono são o grafite e o diamante.

APÊNDICE C – Formulário aplicado pré-aula no segundo dia.

FORMULÁRIO PRÉ-AULA (MOMENTO DE DIPOLO, POLARIDADE E TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR)

1. Dentre as dificuldades que podem ser apresentadas no estudo dos conceitos de momento de dipolo e polaridade descritas abaixo, quais você possui?

Identificação da eletronegatividade dos átomos.

Compreensão sobre a geração de momento de dipolo parciais.

Orientação do vetor do momento de dipolo.

Classificação das moléculas em apolares ou polares.

Outras: _____

Não apresento dificuldade com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

2. Assinale as afirmações abaixo que você considera que estão relacionadas com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

A capacidade de um átomo atrair mais densidade eletrônica para si gera dipolos parciais.

A orientação do momento de dipolo está relacionada com os conceitos de eletronegatividade de Pauling.

Para uma molécula poliátômica o momento de dipolo é a soma dos vetores dos momentos de dipolo gerados entre pares de átomos que realizam uma ligação química.

Moléculas que possuem momento de dipolo nulo são apolares, todavia aqueles que o momento de dipolo é não nulo são polares.

Nenhuma das afirmações acima correspondem aos conceitos de momento de dipolo e polaridade.

Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

3. Para você as moléculas abaixo são apolares ou polares?

a) C_2H_4O : _____

b) CH_3Cl : _____

c) BF_3 : _____

d) NH_3 : _____

e) BCl_3 : _____

Não sei classificar.

4. Abaixo estão listadas algumas dificuldades que podem ser encontradas no estudo da teoria do orbital molecular. Você possui alguma dessas dificuldades?

Distribuição eletrônica.

Compreensão dos dados apresentados no diagrama de orbitais moleculares.

Identificação dos orbitais HOMO e LUMO.

Outras: _____

Não apresento dificuldade com os conceitos que envolvem a teoria do orbital molecular.

Não tenho conhecimento sobre os conceitos que envolvem a teoria do orbital molecular.

5. Para você quais das frases abaixo descrevem a teoria do orbital molecular e/ou conceitos descritos via teoria.

A teoria do orbital molecular descreva a ligação química como uma combinação linear de funções de onda.

Orbitais moleculares são formados pela combinação linear de orbitais atômicos.

O número de orbitais moleculares formados é igual a soma do número de orbitais atômicos de cada átomo.

O orbital chamado de HOMO é aquele que possui elétrons e é o mais energético enquanto o LUMO é o de menor energia que não têm elétrons.

Elétrons desemparelhados no orbital HOMO caracterizam compostos como paramagnéticos, todavia, elétrons emparelhados caracterizam compostos diamagnéticos.

Nenhuma das afirmações acima correspondem a conceitos abordados na teoria do orbital molecular.

Não tenho conhecimento sobre os conceitos que envolvem a teoria do orbital molecular.

6. Pensando na construção do diagrama de orbital molecular para a molécula de O_2 .

a) Para você os orbitais atômicos do tipo “p” possuem a mesma energia?

Sim.

Não.

Não sei.

b) Para você os orbitais moleculares formados possuem a mesma energia?

Sim.

Não.

Não sei.

c) Dentro dos seus conhecimentos serão formados orbitais moleculares ligantes e antiligantes?

Sim.

Não.

Não sei.

d) Para você será formado quantos orbitais moleculares a partir dos orbitais atômicos do tipo “p”?

Quatro.

Cinco.

Seis.

Sete.

Oito.

e) Quantos elétrons ocuparam os orbitais moleculares que possuem contribuição dos orbitais atômicos do tipo “p”.

Quatro.

Cinco.

Seis.

Sete.

Oito.

APÊNDICE D – Formulário aplicado pós-aula no segundo dia.

FORMULÁRIO PÓS-AULA (MOMENTO DE DIPOLO, POLARIDADE E TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR)

1. Quais as dificuldades no estudo dos conceitos de momento de dipolo e polaridade descritas abaixo o uso do programa de química computacional auxiliou a superar?
- Identificação da eletronegatividade dos átomos.
 - Compreensão sobre a geração de momento de dipolo parciais.
 - Orientação do vetor do momento de dipolo.
 - Classificação das moléculas em apolares ou polares.
 - Outras: _____
-

- Não apresentava dificuldades com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.
- Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

2. Assinale as afirmações abaixo que você considera que estão relacionadas com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.
- A capacidade de um átomo atrair mais densidade eletrônica para si gera dipolos parciais.
 - A orientação do momento de dipolo está relacionada com os conceitos de eletronegatividade de Pauling.
 - Para uma molécula poliatômica o momento de dipolo é a soma dos vetores dos momentos de dipolo gerados entre pares de átomos que realizam uma ligação química.
 - Moléculas que possuem momento de dipolo nulo são apolares, todavia aqueles que o momento de dipolo é não nulo são polares.
 - Nenhuma das afirmações acima correspondem aos conceitos de momento de dipolo e polaridade.
 - Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

3. Para você as moléculas abaixo são apolares ou polares?

f) C_2H_4O : _____

g) CH_3Cl : _____

h) BF_3 : _____

i) NH_3 : _____

j) BCl_3 : _____

Não sei classificar.

4. Abaixo estão listadas algumas dificuldades que podem ser encontradas no estudo da teoria do orbital molecular. Quais dificuldades o uso do programa de química computacional te auxiliou a superar?
- Distribuição eletrônica.
 - Compreensão dos dados apresentados no diagrama de orbitais moleculares.

Identificação dos orbitais HOMO e LUMO.

Outras: _____

Não apresentava dificuldades com os conceitos que envolvem a teoria do orbital molecular.

Não tenho conhecimento sobre os conceitos que envolvem a teoria do orbital molecular.

5. Para você quais das frases abaixo descrevem a teoria do orbital molecular e/ou conceitos descritos via teoria.

A teoria do orbital molecular descreva a ligação química como uma combinação linear de funções de onda.

Orbitais moleculares são formados pela combinação linear de orbitais atômicos.

O número de orbitais moleculares formados é igual a soma do número de orbitais atômicos de cada átomo.

O orbital chamado de HOMO é aquele que possui elétrons e é o mais energético enquanto o LUMO é o de menor energia que não têm elétrons.

Elétrons desemparelhados no orbital HOMO caracterizam compostos como paramagnéticos, todavia, elétrons emparelhados caracterizam compostos diamagnéticos.

Nenhuma das afirmações acima correspondem a conceitos abordados na teoria do orbital molecular.

Não tenho conhecimento sobre os conceitos que envolvem a teoria do orbital molecular.

6. Pensando na construção do diagrama de orbital molecular para a molécula de O_2 .

a) Para você os orbitais atômicos do tipo “p” possuem a mesma energia?

Sim.

Não.

Não sei.

b) Para você os orbitais moleculares formados possuem a mesma energia?

Sim.

Não.

Não sei.

c) Dentro dos seus conhecimentos serão formados orbitais moleculares ligantes e antiligantes?

Sim.

Não.

Não sei.

d) Para você será formado quantos orbitais moleculares a partir dos orbitais atômicos do tipo “p”?

Quatro.

Cinco.

Seis.

Sete.

Oito.

e) Quantos elétrons ocuparam os orbitais moleculares que possuem contribuição dos orbitais atômicos do tipo “p”.

Quatro.

Cinco.

Seis.

Sete.

Oito.