

Uso de tecnologias digitais de informação e comunicação - TDIC - no ensino de química

Luiza Cristina de Moura^{1*}, Marco Antonio Barreto Leite¹, Ana Cristina B. Leite²

¹Professores da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Rio de Janeiro, RJ/Brasil,

²Professora do Colégio Pedro II, Rio de Janeiro, RJ/Brasil *lcmoura@acd.ufrj.br

Recebido em: 30/03/2019 Aceito em: 15/04/2019 Publicado em: 31/05/2019

RESUMO

A disciplina de Química Geral, ministrada em âmbito universitário, pode ser vista como uma disciplina que auxilia a compreensão da ciência em si. O presente estudo descreve o trabalho didático realizado nesta disciplina usando software para cálculos de orbitais como ferramenta de auxílio à compreensão do mundo molecular, recuperando e analisando os dados obtidos. Utilizou-se o software para calcular os orbitais moleculares de duas moléculas e/ou íon diatômicos, uma homonuclear e outra heteronuclear: O₂ e HF; O₂⁺ e HCl; N₂ e HBr; F₂ e HI; Cl₂ e NO; Br₂ e CN⁻, em uma turma de Química Geral da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, no primeiro semestre de 2017. Aos alunos foram explicadas as bases do modelo e, em seguida, oferecido o programa para experimentação, levantamento de possibilidades, implementação do modelo, análise e interpretação dos resultados gerando uma aprendizagem muito mais significativa.

Palavras-chave: TDIC. Ligação química. Orbital molecular.

Use of digital information and communication technologies - TDIC - in the teaching of chemistry

ABSTRACT

At the university level, the general discipline of chemistry can be considered as a discipline that helps the understanding of science itself. This study describes teaching work in this discipline using regular software for orbital calculations. This software is a useful tool to understand the molecular world by retrieving and analyzing data. We calculate molecular orbitals of two molecules and / or diatomic ions. The two molecules were one homonuclear and one heteronuclear, such as: O₂ and HF; O₂⁺ and HCl, N₂ and HBr, F₂ and HI; Cl₂ and NO; Br₂ and CN⁻. The students who participated in this work were in the general chemistry classes of the School of Chemistry of the Federal University of Rio de Janeiro in the first semester of 2017. The professor explained the bases of the model and showed the program to raise possibilities, implement models, analyze and interpret of results. This work has generated much more meaningful learning.

Keywords: TDIC. Chemical bonding. Molecular orbital.

INTRODUÇÃO

Na disciplina de Química Geral dos cursos de Química são discutidos os conceitos de ligação química, introduzindo o modelo de orbitais moleculares. Esse modelo utiliza conceitos que estão intimamente vinculados à compreensão de como os

orbitais atômicos interagem no espaço entre os núcleos. O modelo é inteiramente matemático, de difícil acesso e compreensão para alunos de química geral. Para alunos que estão ingressando na universidade, a possibilidade da visualização dos modelos em ligação química, facilita a compreensão das propriedades das moléculas.

A utilização de recursos tecnológicos - a aplicação direta das tecnologias digitais de informação e comunicação (TDIC) - no processo de ensino e aprendizagem de Química tem-se mostrado importantíssima para a compreensão dos conteúdos de Química; na solução de problemas qualitativos e quantitativos; na habilidade da apresentação da informação científica, tanto na forma oral como na escrita; bem como na capacidade de agir com curiosidade, iniciativa e espírito empreendedor (LEITE, 2017). O presente trabalho apresenta um estudo da implementação das Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação, partindo do uso de um software de modelagem matemática, na disciplina de Química Geral, tendo como base um ambiente de aprendizagem colaborativa para aquisição da informação e da experimentação.

METODOLOGIA

Os livros de Química Geral utilizados na graduação dos cursos de Química e Engenharia Química têm como conteúdo programático os modelos de ligação química, isto é, ligação iônica e ligação covalente.

Em sua quase totalidade esses livros iniciam explicando as ligações covalentes introduzindo os conceitos do modelo de Lewis para as moléculas e classificando os elétrons da camada externa em elétrons de valência. Os elétrons da camada mais interna são negligenciados.

O modelo de Lewis prevê, com sucesso, as estruturas de moléculas e íons, carga formal e ressonância. O modelo de repulsão dos pares de elétrons da camada de valência mostra geometrias, ângulos de ligação e polaridade das moléculas de uma forma simples de compreensão e sem as bases matemáticas (BROWN, 2006). Em seguida, são introduzidos os conceitos de ordem de ligação, comprimento de ligação e energia de ligação.

Duas abordagens são descritas a partir do modelo de orbitais: a teoria de ligação por valência (TLV) e teoria dos orbitais moleculares (TOM), para explicar as ligações químicas. O modelo TLV discute sobreposição dos orbitais atômicos e formação de novos orbitais híbridos. O modelo TOM relaciona a ligação química com a formação de novos orbitais, denominados Orbitais Moleculares. Este modelo introduz o conceito de

orbitais ligantes, antiligantes, diagrama de energias, ordem de ligação, energia de dissociação da ligação e o comportamento magnético (KOTZ, 2016).

O uso do programa HyperChem (2017) da HyperCube, que proporciona a visualização dos orbitais, vem facilitar a compreensão do modelo de ligação que utiliza o conceito da formação dos orbitais moleculares e fornece parâmetros como energia dos orbitais e comprimentos das ligações. Desta forma, pode-se empregar no estudo de caso utilizando moléculas diatômicas e o programa de cálculo como instrumento facilitador da compreensão das propriedades moleculares, quando abordados os conceitos de ligação química.

A tecnologia fornece aos alunos ferramentas que auxiliam, por exemplo, a visualização dos orbitais moleculares formados e o diagrama de energias desses orbitais. A partir dos diagramas de energias dos orbitais moleculares podem ser discutidos os conceitos de HOMO – orbitais moleculares ligantes de mais alta energia - e LUMO - orbitais moleculares antiligantes de mais baixa energia - de diferentes moléculas, ordem de ligação, comprimento e energia ou entalpia de ligação.

A turma foi dividida em grupos para a realização dos cálculos foram feitos em grupos; lembrando que os ambientes de aprendizagem mediados pelos TDIC favorecem a interação entre os participantes e o professor como mediador do processo de aprendizagem (GOMES, 2002). Esses cálculos foram realizados pelo método semi-empírico, o qual utiliza somente os elétrons da camada de valência e o *ab initio*, que considera todos os elétrons, internos e da camada de valência. Uma abordagem entre resultados obtidos pelos dois métodos pode ser realizada, dependendo do desenvolvimento das atividades propostas (SANT' ANNA, 2009).

“Lembrando que Vygotsky dá importância à experiência compartilhada, ao diálogo, a colaboração, concebendo, desse modo, a aprendizagem como um processo de mudança e, portanto, necessariamente social. Nesta concepção, as interações têm um papel crucial e determinante. A participação do professor como mediador, estimulando a aquisição potencial a partir do conhecimento da zona de desenvolvimento proximal (ZDP) do aluno e proporcionando a interação entre eles, pode permitir aos estudantes desenvolver e utilizar estratégias de exploração e descoberta, bem como o planejamento e controle da própria atividade” (LEITE, 2014).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

No curso de Química Geral foram realizados cálculos de íons e moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares simples, a saber: O_2 , O_2^+ , N_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 , HF , HCl , HBr , HI , CO , NO e CN^- . Os resultados obtidos, pelos alunos, foram

apresentados nas formas oral e escrita. As informações relacionadas aos métodos utilizados foram correlacionadas com o tempo de máquina gasto para a sua realização. Na resposta do programa se pôde ainda obter diagramas de energia dos orbitais, bem como, as formas dos orbitais moleculares e suas energias. O programa ainda mostra os orbitais ligantes e os antiligantes dando para ver as contribuições desses orbitais para formação das ligações. Os orbitais HOMO e LUMO podem ser relacionados com um modelo mais simples de reatividade, como exemplo, ácido-base.

Os resultados dos cálculos realizados podem ser agrupados de tal modo que possibilite uma melhor compreensão, como por exemplo, O_2 e N_2 . Os conceitos de ordem de ligação, energia e comprimento ligação e as formas desses orbitais foram discutidos. A mesma discussão foi realizada para a molécula O_2 e o íon O_2^+ , e para as moléculas homonucleares: F_2 , Cl_2 , Br_2 e I_2 ; e moléculas heteronucleares: HF , HCl , HBr e HI .

As tabelas 1, 2 e 3 fornecem os resultados esperados de alguns parâmetros importantes que são de fácil compreensão e comparação durante a apresentação dos resultados. A correlação existente entre ordem de ligação e comprimento ligação pôde ser discutida comparando as moléculas de O_2 e N_2 , e a molécula de O_2 com o íon O_2^+ (Tabela 1). Outras discussões como magnetismo e a energia dos orbitais HOMO foram abordados.

Tabela 1- Dados fornecidos para as moléculas O_2 e N_2 , O_2 , e O_2^+ .

Ligação X-X	O_2	N_2	O_2^+
Ordem de ligação	2	3	2,5
Entalpia de formação (kcal/mol)	131,15	194,21	109,95
Comprimento (Å)	1,382	1,129	0,994
Magnetismo	Paramagnética	Diamagnético	Paramagnética
Orbitais LUMO (eV)	0,268	0,547	-10,33
Orbitais HOMO (eV)	-10,95	-13,31	-20,97

As tabelas 2 e 3 apresentam, respectivamente, as propriedades das moléculas homonucleares e heteronucleares do grupo 17 da tabela periódica. Uma contextualização abordando comprimentos das ligações, entalpia de formação e energia de orbitais moleculares HOMO foi correlacionada com propriedades periódicas dos elementos.

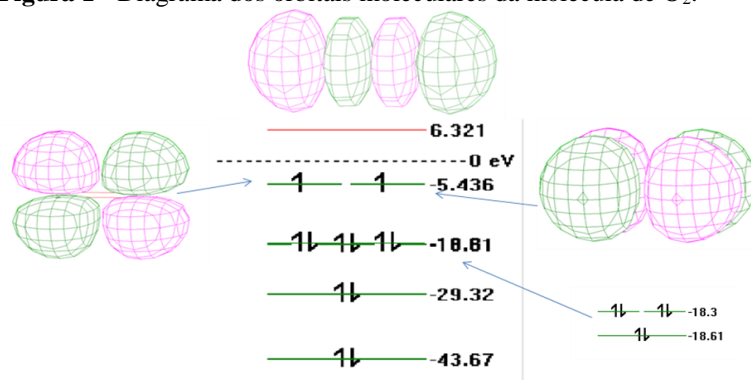
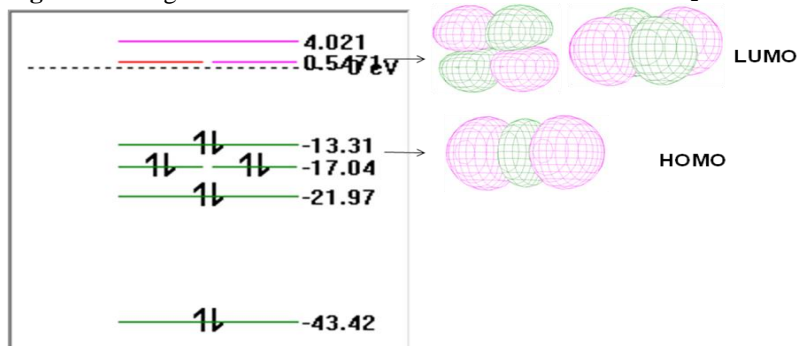
Tabela 2- Dados fornecidos para as moléculas de F₂, Cl₂, Br₂, e I₂

Ligação X-X	F ₂	Cl ₂	Br ₂	I ₂
Entalpia de formação (kcal/mol)	-41,20	-65,258	-38,496	-12,479
Comprimento (Å)	1,310	2,0624	2,228	2,702
Orbitais LUMO (eV)	1,579	-3,013	-3,528	-4,096
Orbitais HOMO (eV)	-15,55	-11,3	-9,791	-9,272

Tabela 3- Dados fornecidos para as moléculas de HF, HCl, HBr, e HI

Ligação H-X	HF	HCl	HBr	HI
Energia formação (kcal/mol)	-138,78	-105,01	-81,70	-51,88
Comprimento (Å)	0,917	1,271	1,445	1,609
Orbitais LUMO (eV)	-5,34	-1,05	0,496	0,045
Orbitais HOMO (eV)	-15,62	-12,03	-11,19	-9,94

A Figura 1 e 2 apresentam os resultados obtidos após o cálculo semi-empírico realizado para as moléculas de O₂ e N₂, respectivamente. Observando o diagrama de energia pôde-se verificar a forma dos orbitais moleculares, bem como, definir os orbitais ligantes e antiligantes. Os orbitais ligantes não apresentam plano nodal entre os átomos, favorecendo a ligação química. Já os orbitais antiligantes apresentam um plano nodal desfavorecendo a ligação.

Figura 1 - Diagrama dos orbitais moleculares da molécula de O₂.**Figura 2** - Diagrama dos orbitais moleculares da molécula de N₂.

Para a realização das atividades propostas na turma de química geral do primeiro semestre de 2017, os alunos foram organizados em grupos e utilizaram o software para calcular os orbitais moleculares de duas moléculas e/ou íon diatômicos, uma homonuclear e outra heteronuclear. As seguintes moléculas e íons foram analisados: O_2 e HF; O_2^+ e HCl; N_2 e HBr; F_2 e HI; Cl_2 e NO; Br_2 e CN^- . Foram utilizados cálculos semi-empíricos e/ou *ab initio* para as duas espécies estudadas. Todos os grupos apresentaram os diagramas de energia, mostrando os orbitais moleculares envolvidos.

Observa-se nas figuras 3, 4, 5 e 6 os resultados obtidos para os cálculos semi-empíricos realizados pelos grupos para as moléculas: HF, HCl, HBr e HI. Foram apresentados os diagramas de energias e as modelagens dos orbitais moleculares HOMO e LUMO. Nota-se uma preocupação dos alunos de fazer uma comparação dos diagramas obtidos com os propostos pela literatura.

Discussão de casos

Para a realização das atividades propostas na turma de química geral do primeiro semestre de 2017, os alunos foram organizados em grupos e utilizaram o software para calcular os orbitais moleculares das seguintes moléculas e íons: O_2 e HF; O_2^+ e HCl; N_2 e HBr; F_2 e HI; Cl_2 e NO; Br_2 e CN^- . Foram utilizados cálculos semi-empíricos e/ou *ab initio* para as duas espécies estudadas. Todos os grupos apresentaram os diagramas de energia, mostrando os orbitais moleculares envolvidos.

Observa-se nas figuras 3, 4, 5 e 6 os resultados obtidos para os cálculos semi-empíricos realizados pelos grupos para as moléculas: HF, HCl, HBr e HI. Foram apresentados os diagramas de energias e as modelagens dos orbitais moleculares HOMO e LUMO. Nota-se uma preocupação dos alunos de fazer uma comparação dos diagramas obtidos com os propostos pela literatura.

Figura 3 - Resultados das TDIC apresentadas para a molécula de HF.



Figura 4 - Resultados das TDIC apresentadas para a molécula de HCl.

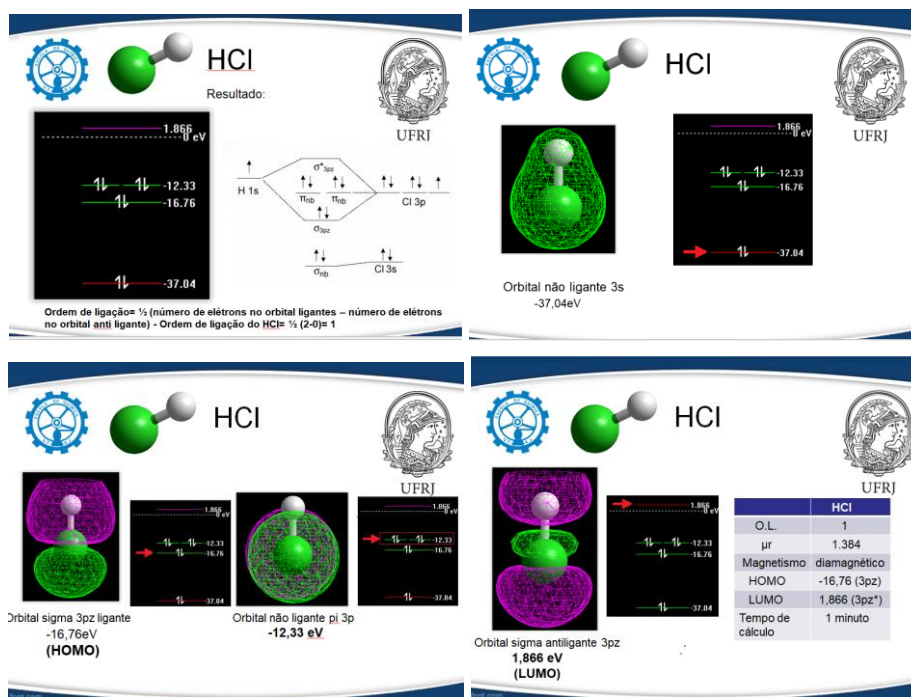


Figura 5 - Resultados das TDIC apresentadas para a molécula de HBr.

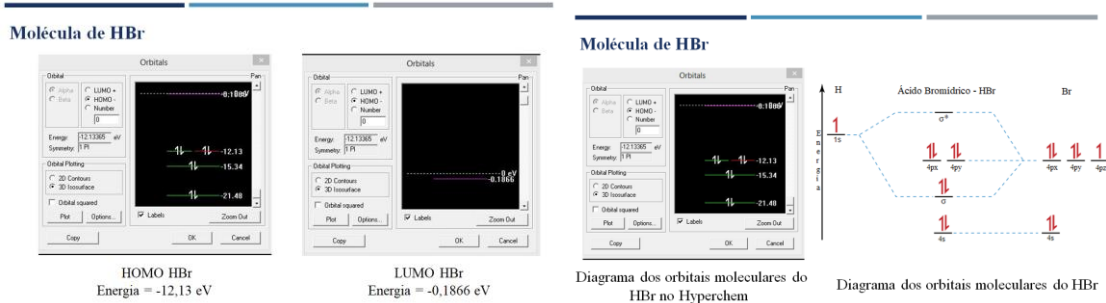
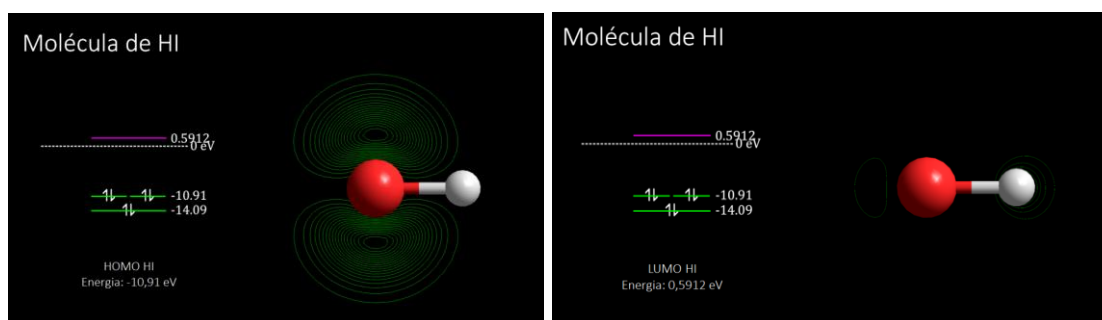


Figura 6 - Resultados das TDIC apresentadas para a molécula de HI.



As conclusões dos estudos, mostradas na figura 7, foram apresentadas pelos seis grupos em um seminário.

Eles tiveram que estudar e entender o programa para resolver duas estruturas das moléculas propostas. As estruturas estudadas foram uma molécula neutra e um íon ou uma molécula com elétron desemparelhado, o que acarretou uma ampliação do debate.

Figura 7 - Comentários e conclusões das apresentações dos alunos do curso de Química geral.



Conclusão

- Em moléculas diatômicas heteronucleadas, como o HF, as interações entre os orbitais é dada pela aproximação de energias e não por orbitais semelhantes.
- Nos orbitais HOMO a densidade fica concentrada entre os núcleos e nos orbitais LUMO a densidade fica espalhada ao redor da molécula.

- A Teoria dos Orbitais Moleculares preenche algumas explicações as quais a teoria de ligação de valência e os orbitais híbridos não explicam.
- Também explica algumas falhas da TLV (Teorema de Ligação de Valência), como por exemplo o paramagnetismo da molécula de oxigênio.
- Dão origem a um novo conjunto de energia.
- Em moléculas diatômicas homonucleares, como o O₂, as interações entre os orbitais ocorre entre orbitais semelhantes.



Comentários

- O programa permitiu uma visualização e exemplificação da ordem de ligação e dos orbitais HOMO e LUMO.
- As energias dos orbitais permitem melhor compreensão da TOM e do diagrama.



Conclusão e Comentários

O HyperChem é um software amplamente útil para representar moléculas em seus diversos âmbitos. Representando de forma eficaz as características das moléculas de N₂ e HBr quanto ao comprimento de ligação e energia dos orbitais (HOMO e LUMO).

A partir da representação das moléculas N₂ e HBr, percebemos que ambas possuem propriedade diamagnética.

O software é capaz de explorar estas propriedades em moléculas ainda mais complexas, e desta forma, contribui imensamente para uma compreensão mais aprofundada destas e várias outras moléculas, agregando conhecimentos também visuais.



Conclusões

Os cálculos, representação das moléculas, e outras informações apresentadas no trabalho, mostram-se verídicos consoante as teorias estudadas em sala de aula.

Pela Teoria do Orbital Molecular, por exemplo, confere-se as características diamagnéticas, tanto de HI, quanto de F₂, visto que não existem elétrons desemparelhados, além de provar a possibilidade da formação desses compostos, já que a OL ≠ 0.



CONCLUSÃO

- Método AB Initio:
 - Não possuem parâmetros empíricos em sua equação;
 - As respostas são cálculos aproximados;
 - É definida uma margem de erro.
- Método Semi-Empírico:
 - Formalismo Hartree-Fock;
 - Uso de aproximações e dados experimentais;
 - Método mais adequado ao tratamento de grandes moléculas.
- O programa HyperChem, apresenta resultados de propriedades magnéticas e ordem de ligação iguais a Teoria do Orbital Molecular.



CONCLUSÃO

- O programa forneceu resultados iguais aos da teoria (propriedades magnéticas e ordem de ligação)
- Pelos modelos ainda nota-se 3 ligações no ion cianeto contra 1 para o bromo molecular → de acordo com as OL's obtidas.
- Os resultados também estão de acordo com os valores obtidos para as entalpias de ligação das moléculas

$Br_2 = 192,5 \text{ (kJ.mol}^{-1}\text{)}$

$CN^- = 891 \text{ (kJ.mol}^{-1}\text{)}$



Com a metodologia utilizada o uso das TDIC os alunos puderam testar o software e aprender sobre os modelos químicos e suas limitações, além de entenderem as ligações químicas de maneira concreta, prática e lúdica.

O conteúdo programático matemático envolvido nos modelos, mesmo não sendo do conhecimento dos alunos, não foi um entrave para a utilização do programa. Isso foi decisivo para o sucesso da aprendizagem dos modelos, já que os alunos não se sentiram ameaçados pela falta desse conteúdo específico.

CONCLUSÃO

A utilização das Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação no curso de Química Geral favoreceu a compreensão dos conceitos de orbitais moleculares mostrando a importância de seu uso nas disciplinas de graduação.

Além disso, simulações práticas realizadas a partir das TDIC auxiliaram na construção de argumentos a partir da informação e da experimentação realizada.

O trabalho em grupos promoveu interação entre os alunos expandindo possibilidades de troca de informações e a construção de conhecimento.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos aos alunos das turmas de Química Geral do primeiro semestre de 2017, IQG 115 – tarde e noite, Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, pela participação na experimentação das TDIC.

REFERÊNCIAS

BROWN, T. L., H. LeMAY-JR, E.; BURSTEN, B. E. **Química: a ciência central**, tradutor Robson Matos, 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

GOMES, N. G., **Computador na escola: novas tecnologias e inovações educacionais in a formação na sociedade** do espetáculo, São Paulo: Loyola, 2002, p. 119-134.

KOTZ, J. C.; TREICHEL, P. M.; TOWNSEND, J. R.; TREICHEL, D. A. **Química geral e reações químicas**, tradução Noveritis do Brasil, 9. ed. Brasil: Cengage Learning, 2016, v. 1.

LEITE, A. C. B.; LEITE, M. A. B. **TIC em la clase de química inorgánica**, Española: Editorial Académica, 2017.

LEITE, A. C. B. **Introducción de las competencias TIC em el currículo: desarrollo parcial em las áreas de tecnología, ingeniería química y matemáticas**, Ana C. B. LEITE, Carlos G. MACIAS, Ceneida F. VERDÚ, Instituto Universitario de Posgrado, Universidade Carlos II – Madri, 2010.

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

SOFTWARE HYPER CHEM DA HYPERCUBE. Disponível em: <www.hyper.com>. Acesso em: 20 mar. 2018.