

UTILIZAÇÃO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO FERRAMENTA DE AUXÍLIO NO APRENDIZADO DOS CONTEÚDOS DO ENSINO MÉDIO.

Aline Fonseca Bezerra¹(PG)*, Kelson Carvalho Lopes¹(PQ), Regiane C.M.U. Araújo¹(PQ)

1 – Universidade Federal da Paraíba – Campus I. *alineafb@yahoo.com.br

Palavras-Chave: Química Computacional, Ensino de Química, Propriedades Moleculares.

RESUMO:

Melhorar o ensino da Química para os alunos do ensino médio têm sido um esforço praticado por vários professores. As novas tecnologias de informação e comunicação (NTIC) tem sido de grande ajuda para estimular o aluno ao aprendizado. Os programas utilizados na Química Computacional realizam um papel importante nessa tarefa, tornando mais simples a visualização de vários fenômenos químicos que anteriormente pareciam difíceis de serem entendidos. Este trabalho faz um apanhado em algumas propriedades moleculares discutidas durante as aulas de Química e que geram alguma dificuldade quanto ao seu entendimento, como por exemplo, a eletronegatividade, a acidez e as fórmulas moleculares. Utilizamos os programas computacionais para auxiliar no esclarecimento dessas propriedades em moléculas que são conhecidas no conteúdo do ensino de química no ensino médio. Os resultados obtidos foram bastante satisfatórios no que diz respeito ao aprendizado do conteúdo de química como também no domínio de alguns recursos computacionais.

I. INTRODUÇÃO

O ensino da química tem se mostrado de forma deficiente em instituições de ensino e entre alunos do ensino médio que ao ingressarem no ensino superior apresentam dificuldades em certos meios. Portanto, um dos principais objetivos de pesquisadores em ensino de química (bem como das demais ciências) é melhorar a compreensão dos alunos sobre os conceitos da química, que é de enorme importância para os diversos setores da vida cotidiana.

Uma das ferramentas de grande necessidade no ensino e aprendizagem da química é a utilização de ferramentas computacionais, essas ferramentas podem ser utilizadas para a construção de um currículo centrado sobre os problemas do mundo – Química do cotidiano ou ciências, tecnologia e sociedade, fornecendo suporte para o engajamento dos estudantes nas atividades escolares possibilitando a visualização de modelos que explicam fenômenos microscópicos e oferecendo aos professores e alunos oportunidades para reflexão e revisão de conteúdos¹.

Mesmo com o início da utilização da informática na educação há algumas décadas atrás ainda se faz necessário analisar suas funcionalidades, bem como a utilização do computador como facilitador no processo de ensino e aprendizagem em diversas áreas do conhecimento, instrumento este que pode ser considerado como uma ferramenta tecnológica de primordial importância nos dias atuais.

De acordo com Zanon² muitos alunos sentem dificuldades em aprender química, nos diversos níveis de ensino, devido principalmente a má contextualização dos conteúdos que vem a despertar o desinteresse e a desmotivação. A utilização de recursos que empreguem imagens e modelos que auxiliem na construção do conhecimento é de fundamental importância no processo de aprendizagem. Neste contexto a Química Computacional surge como uma alternativa para minimizar a distância entre os conteúdos da Química e o aluno, proporcionando uma maneira “macroscópica” de entender diversos conceitos da química.

II. A Química Computacional no Ensino Médio

Conforme definido pela IUPAC “A química computacional é uma disciplina que faz uso de métodos matemáticos para calcular propriedades moleculares ou para simular o comportamento molecular”.³

Segundo Arroio⁴, a introdução de conteúdos de Química Computacional no ensino médio é considerada complexa para o entendimento do aluno, pois parte de conceitos abstratos e uma matemática avançada que são, na maioria das vezes, não intuitivos. Mas, a partir do que se refere à estrutura molecular, trazendo a integração da linguagem e dos conceitos científicos para um melhor entendimento do universo microscópico a partir do macroscópico, o nível de interesse do aluno pode ir se aprofundando ao observar as moléculas em seu aspecto tridimensional e conformacional através do computador.

O desenvolvimento e o posterior uso de softwares em salas de aula auxiliam a resolução de problemas químicos. A versatilidade da química computacional permite sua aplicação no ensino de química e o desenvolvimento de laboratórios e indústrias.

De acordo com Melo & Melo⁵ os softwares de simulação têm surgido como uma nova opção no ensino da química, visando substituir as representações pictóricas, esquemáticas e os modelos estáticos anteriormente utilizados por ferramentas que proporcionam visualização de representações de modelos dinâmicos, proporcionando condições aos alunos de desenvolverem a compreensão conceitual dos estudos, sem que haja apenas o uso mecânico dos conceitos que envolvem os fenômenos estudados.

III. Objetivos

O principal objetivo do estudo é investigar algumas propriedades moleculares de substâncias escolhidas de acordo com sua utilização dentro do contexto aplicado ao aprendizado da química no ensino médio.

As substâncias investigadas são formadas por um número pequeno de átomos e com funções orgânicas bem conhecidas como, por exemplo, os hidrocarbonetos. Para as moléculas de etano, eteno e etino foram realizados estudos comparativos a respeito das mudanças que ocorrem em algumas propriedades moleculares devido à mudança da ligação química existente entre os átomos de carbono dessas moléculas. Para a molécula do etano também foi realizado um estudo conformacional a fim de identificar a conformação mais estável para essa molécula.

Outras substâncias químicas também foram investigadas a respeito da variação do comprimento de ligação e eletronegatividade, são elas: metano, amônia, água e fluoreto de hidrogênio.

Todo o estudo foi desenvolvido por alunos do ensino médio a fim de observarmos suas dificuldades e aprendizados.

IV. Recursos Computacionais Utilizados Neste Estudo

Na Química Quântica um dos softwares mais conhecido é o Gaussian⁶ que utiliza as leis da mecânica quântica para prevê as energias, estruturas, propriedades vibracionais e outras propriedades dos sistemas moleculares, este será o software utilizado neste estudo.

Os métodos computacionais utilizados serão o método *ab initio* Hartree-Fock⁷ e o método DFT⁸. As metodologias *ab initio* procuram resolver o problema químico-

quântico dentro de formalismos derivados diretamente dos postulados da mecânica quântica. As soluções são obtidas sem qualquer referência a dados experimentais, salvo algumas constantes fundamentais da física. Os cálculos *ab initio* envolvem a resolução da equação de Schrödinger. Tendo em vista que soluções analíticas exatas desta equação não existem para os sistemas moleculares de um modo geral, aplicam-se determinadas restrições matemáticas, na maioria das vezes altamente justificadas, ao procedimento de solução do problema.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) é uma teoria que trata da descrição mecânica quântica de sistemas moleculares em termos da densidade eletrônica. As propriedades de um sistema podem ser determinadas usando funcional, que nada mais são do que funções de outra função, que neste caso é a densidade eletrônica.

O método DFT foi utilizado juntamente com o funcional híbrido B3LYP^{9,10}. O conjunto de base de Pople 6-311++G(d,p)^{11,12} foi o escolhido para ser utilizado com os métodos computacionais já descritos. Ele é bastante utilizado em diversos sistemas, pois inclui funções de polarização e difusas, além de dividir a camada de valência melhorando os resultados obtidos quando comparado a outras bases de conjuntos mínimos.

V. Metodologia

Este estudo foi desenvolvido por alunos do 3º ano do ensino médio de uma escola pública de João Pessoa/PB dentro do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica para o Ensino Médio (PIBIC-EM).

Para cumprir os objetivos propostos serão realizados cálculos de barreira rotacional (quando necessário) e otimização de geometria para as moléculas propostas. Os cálculos serão realizados com o programa computacional Gaussian09W utilizando os métodos computacionais Hartree-Fock e DFT com o conjunto de base de Pople 6-311++G(d,p). No método DFT será utilizado, além do conjunto de base de Pople, o funcional híbrido B3LYP. Os resultados podem ser visualizados com o programa Gauss View 5.0¹³

VI. Resultados

O estudo teve início com a descoberta da conformação mais estável para a molécula do etano. Com base nos cálculos realizados para a molécula de etano foi possível verificar a estabilidade das conformações através dos cálculos de barreira rotacional. A Figura 1 mostra a barreira rotacional encontrada como também as conformações de máximo e mínimo de energia encontrado em cada etapa da barreira. Com isso foi possível perceber que a conformação eclipsada é desfavorável devido às repulsões entre as nuvens eletrônicas dos átomos. Na conformação alternada há um máximo de afastamento entre os átomos, favorecendo a estabilidade desta conformação.

Os alunos puderam perceber como o programa trabalha para fornecer a estrutura de menor energia, fazendo rotações em torno de um determinado ângulo da molécula a fim de gerar as energias que cada conformação apresenta. Dessa forma é possível entender melhor porque uma determinada conformação é mais estável que a outra e não apenas “decorar” qual a forma de desenhar uma determinada molécula.

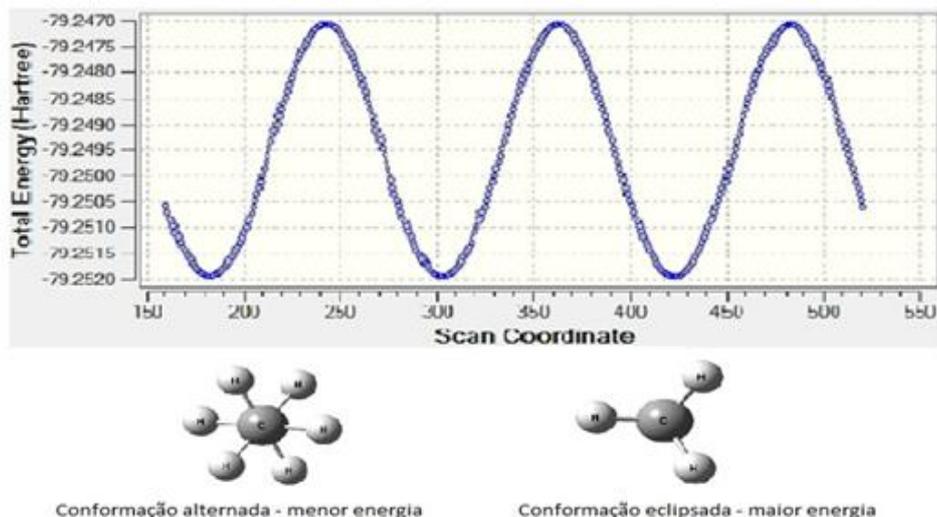


Figura 1: Análise conformacional do etano obtida com o método Hartree-Fock 6-311++G(d,p)

A partir deste cálculo também foi possível comparar as diferenças de energia que cada método de cálculo apresenta (Tab. 1). Este fato pode ser explicado pela forma com que cada método computacional aproxima as equações da Mecânica Quântica para calcular a função de onda.

Tabela 1: Energias (em Hartree) das conformações de máximo e mínimo do etano obtidas com o método Hartree-Fock e DFT

Método Utilizado para o Cálculo	Energia da Conformação de Mínimo Global (em Hartree)
Hartree-Fock 6-311++G(d,p)	-79.25193383
DFT/B3LYP 6-311++G(d,p)	-79.85657244

Os valores das cargas atômicas baseados na análise populacional de Mülliken¹⁴ foram obtidos com o objetivo de esclarecer a diferença de eletronegatividade existente entre os átomos nas moléculas de etano, eteno e etino. Nas Figuras 2, 3 e 4 podem ser visualizados os valores das cargas atômicas obtidas para as moléculas do etano, eteno e etino, respectivamente, utilizando os métodos de cálculo DFT/B3LYP e Hartree-Fock. A diferença nos valores das cargas atômicas é devido ao modo como cada método calcula a função de onda, porém, todos seguem a mesma tendência com relação aos valores das cargas atômicas.

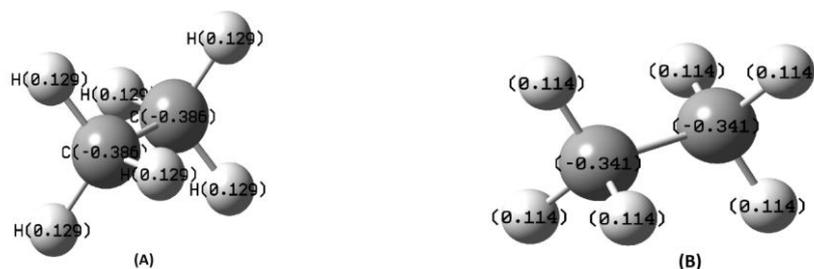


Figura 2: Cargas atômicas de Mülliken para a molécula do etano obtidas através do método DFT/B3LYP (A) e com o método Hartree-Fock (B), ambas com a base de Pople 6-311++G(d,p).



Figura 3: Cargas atômicas de Mulliken para a molécula do eteno obtidas através do método DFT/B3LYP (A) e com o método Hartree-Fock (B), ambas com a base de Pople 6-311++G(d,p).



Figura 4: Cargas atômicas de Mulliken para a molécula do etino obtidas através do método DFT/B3LYP (A) e com o método Hartree-Fock (B), ambas com a base de Pople 6-311++G(d,p).

Na Figura 5 é possível visualizar o comportamento das cargas atômicas nas moléculas de etano, eteno e etino através de uma escala de cores. Os átomos na cor vermelha apresentam maiores valores de carga atômica e, conseqüentemente, uma maior eletronegatividade, os átomos na cor verde apresentam valores menores de eletronegatividade e, conseqüentemente, menores valores de carga atômica.

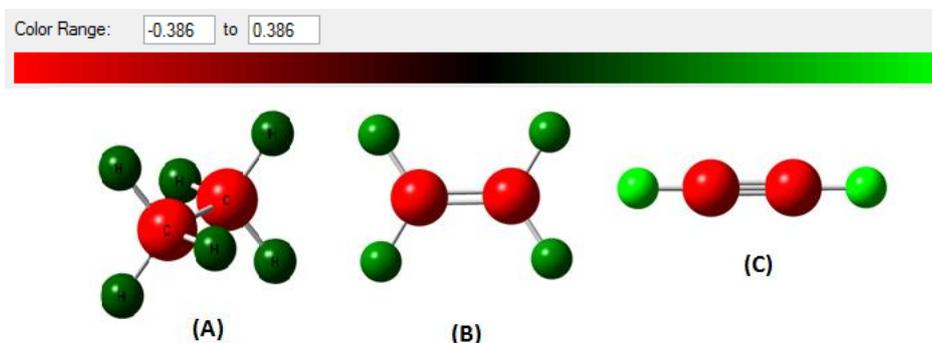


Figura 5: Cargas atômicas nas moléculas de etano (A), eteno (B) e etino (C) mostradas através de escala de cores.

Através destes cálculos os alunos puderam relacionar diversos conceitos da química como hibridização¹, afinidade eletrônica², energia³, eletronegatividade⁴, entre outros. Abaixo é descrito, de forma concisa, todas as explicações dadas pelos alunos do ensino médio com relação a esses resultados.

¹ A Teoria da Hibridização explica a presença de ligações covalentes em muitos elementos químicos. A partir do número de nuvens eletrônicas ao redor de um átomo, torna-se possível definir sua hibridização.

² Eletroafinidade ou afinidade eletrônica corresponde à energia liberada quando um elétron é adicionado a um átomo neutro no estado gasoso. A eletroafinidade diminui com o aumento do raio atômico, isto é na Tabela Periódica, ela aumenta de baixo para cima e da esquerda para a direita.

³ Energia química, ou energia potencial química, é a que se obtém a partir das ligações químicas ou da quebra dessas ligações.

⁴ Eletronegatividade é a tendência de um átomo em atrair elétrons compartilhados numa ligação química

“Podemos observar que todos os átomos de carbono são muito mais eletronegativos que os átomos de hidrogênio para todas as moléculas, porém, há uma diferença na coloração dos átomos de hidrogênio. De acordo com a tabela de cores quanto mais verde claro um átomo for maior é sua carga positiva. A molécula que apresenta as cores mais claras é a molécula do etino porque os átomos de carbono do etino agem como se eles fossem mais eletronegativos quando comparados aos carbonos do etano e eteno devido ao tipo de hibridização do carbono, sp no etino, sp^2 no eteno e sp^3 no etano. Os elétrons dos orbitais $2s$ têm energia mais baixa do que aqueles dos orbitais $2p$ porque os elétrons nos orbitais $2s$ tendem, em média, a estarem mais próximos do núcleo do que os elétrons nos orbitais $2p$.”

“Desse modo, quanto maior for a eletronegatividade, maior será a energia necessária para remover um elétron, ou seja, maior a energia de ionização. Assim, a tendência dele não será perder, mas sim ganhar cargas negativas porque possui grande afinidade por elétrons. Uma alta afinidade eletrônica significa que uma grande quantidade de energia é liberada quando um elétron é adicionado a um átomo em fase gasosa. Então, quanto mais eletronegativo for um átomo, mais facilmente ele aceitará elétrons em sua camada externa, logo, maior sua afinidade eletrônica.”

O comprimento de ligação também foi observado neste trabalho, é definido pela distância entre os centros de dois núcleos atômicos envolvidos numa ligação química. A ligação tripla carbono-carbono é mais curta do que a ligação dupla carbono-carbono, que por sua vez é mais curta que a ligação simples carbono-carbono. Analisando esse comportamento através da hibridização dos orbitais percebemos que as ligações mais curtas estão em orbitais com maior caráter s . O comprimento de ligação carbono-carbono encontrado através de métodos computacionais para as moléculas de etano, eteno e etino pode ser observado na Tabela 2.

Tabela 2: Comprimento da ligação carbono-carbono encontrado através de métodos computacionais para as moléculas de etano, eteno e etino.

Comprimento da ligação (Å)	Hartree-Fock 6-311++G(d,p)	DFT/B3LYP 6-311++G(d,p)	Valor Experimental ¹⁵
Etano C-C	1.524	1.531	1.535
Eteno C=C	1.318	1.329	1.329
Etino C≡C	1.183	1.199	1.203

Comparando os valores obtidos teoricamente com os valores experimentais vemos que os resultados são bastante coerentes. O método DFT/B3LYP se aproxima um pouco mais do valor experimental do que o método Hartree-Fock, mas este método também apresenta resultados bastante satisfatórios.

O aumento da acidez entre os elementos da tabela periódica segue uma determinada tendência, da esquerda para a direita quando comparamos os compostos em um determinado período. A eletronegatividade do átomo ligado ao hidrogênio afeta a acidez de duas maneiras relacionadas, afeta a polaridade da ligação ao próton e afeta a estabilidade relativa do ânion que se forma quando o próton é perdido. Assim, selecionamos hidretos dos elementos do primeiro período da tabela periódica para verificar o comportamento da eletronegatividade, são eles: metano, amônia, água e fluoreto de hidrogênio (Figura 6).

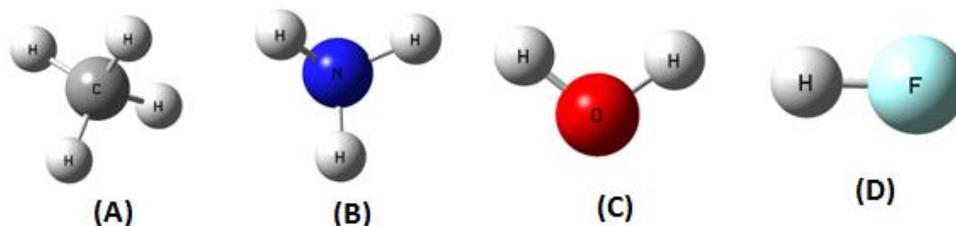


Figura 6: (A) Metano, (B) Amônia, (C) Água, (D) Fluoreto de Hidrogênio.

Através de cálculos de otimização de geometria foi possível gerar um mapa de potencial eletrostático para cada uma das estruturas investigadas. Foi possível perceber a tendência baseada na eletronegatividade e no aumento na polarização das ligações com o hidrogênio (Figura 7).

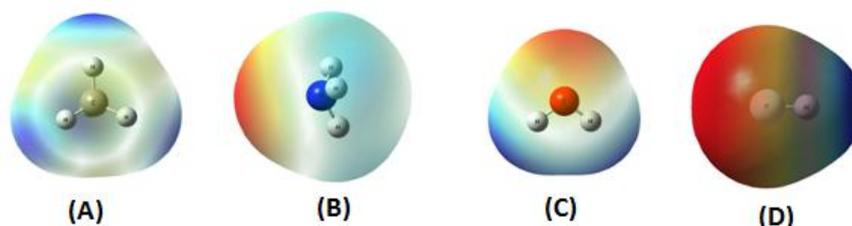


Figura 7: Mapa de potencial eletrostático para o metano (A), amônia (B), água (C) e fluoreto de hidrogênio (D).

Com os mapas de potencial eletrostático os alunos puderam perceber como é o comportamento dessas substâncias químicas formadas com elementos do primeiro período da tabela periódica. A tendência baseada na eletronegatividade e no aumento na polarização das ligações com o hidrogênio segue a seguinte ordem $C < N < O < F$. Praticamente nenhuma carga positiva é encontrada nos hidrogênios do metano (predominância da cor azul), isso é consistente com a fraca eletronegatividade do carbono. Quando se trata do fluoreto de hidrogênio percebemos que a quantidade de carga positiva aumenta significativamente (predominância da cor vermelha), resultando numa maior eletronegatividade da molécula.

VII. Conclusões

Durante o Desenvolvimento do projeto PIBIC– Ensino Médio foi necessário o domínio da química bem como da informática em conjunto para melhorar a compreensão no estudo da eletronegatividade nas moléculas de metano, amônia, fluoreto de hidrogênio e água; para a verificação da conformação mais estável para a molécula de etano e para identificar as modificações que ocorrem na acidez quando comparamos as moléculas do etano, eteno e etino. Foi necessária a utilização de vários cálculos químicos entre eles: barreira rotacional, e otimização de geometria molecular. Apesar da dificuldade inicial de aprender a manusear os programas computacionais o resultado foi bastante satisfatório. O estudo conformacional ajudou a entender melhor a geometria das substâncias químicas, como se comportam em reações e qual a interferência das nuvens eletrônicas entre os átomos.

Com relação à acidez de moléculas foi possível perceber, através das moléculas investigadas, que a acidez está diretamente relacionada com o caráter s das ligações

químicas, tornando o estudo da hibridização uma ferramenta de fundamental importância para a melhor compreensão da acidez em substâncias químicas.

A variação da eletronegatividade em um determinado período da tabela periódica foi facilmente identificada através dos mapas de potencial eletrostático onde constatamos que o flúor é mais eletronegativo que o carbono devido a sua maior capacidade de polarizar a ligação com o próton, nesse caso o hidrogênio.

É importante destacar o crescente interesse pela pesquisa científica por parte dos alunos envolvidos nesse projeto. Grande parte dos alunos optou por prestarem o vestibular para cursos relacionados com o que aprenderam durante o projeto como, por exemplo, farmácia, química, engenharia química, ciência e engenharia da computação, entre outros.

Referências

- ¹ Fernandez, N. L. R. Professores e computadores: navegar é preciso. Porto Alegre: Mediação, 2004.
- ² Zanon, L. B. e Palharini, E. M.; A química no ensino fundamental de ciências. Revista Química Nova na Escola, n. 2, p.15- 18, nov. 1995.
- ³ site: www.iupac.org acesso em 02/08/2011.
- ⁴ Arroio, A.; Honório, K. M.; Weber, K. C.; Mello, P. H.; Silva, A. B. F. 2005 [Online]. O ensino da química quântica e o computador na perspectiva de projetos. Homepage: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S01004042200500020003
- ⁵ Melo, E.S.N.; Melo, J.R.F. Softwares De Simulação No Ensino De Química Uma Representação Social Na Prática Docente Educação Temática Digital, v.6, n.2, p.43-52, 2005.
- ⁶ Gaussian 03, Revision E.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
- ⁷ Szabo, A.; Ostlund, N. S.; Modern Quantum Chemistry, 1st ed. revised, Dover: New York, 1996.
- ⁸ Kohn, W.; Sham, L.; Self-consistent equations including exchange and correlation effects, Phys. Rev. A. 140, a1133, 1965.
- ⁹ Becke, A. D.; A new mixing of Hartree-Fock and local density-functional theories, J. Chem. Phys.; 98, 1372, 1993.
- ¹⁰ Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G.; Development of the Colle-Salvetti correlation energy formula into a functional of the electron density, Phys. Rev. 37, 785 - 789, 1988.
- ¹¹ Hariharan, P.C., and Pople, J.A., Influence of polarization functions on MO hydrogenation energies, Theor. Chim. Acta, 28, 213–222, 1973C.
- ¹² Hehre, W.J.; Radom, L.; Shleyer, P.V.R.; Pople, J.A.; Ab Initio Molecular Orbital Theory, John Wiley & Sons, 1986.
- ¹³ GaussView, Version 5, Dennington, R.; Keith, T.; Millam, J. *Semichem Inc.*, Shawnee Mission KS, 2009.
- ¹⁴ Mulliken, R.S.; Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions.I, J. Chem. Phys. 23, 1833, 1955.
- ¹⁵ "Bond Lengths and Angles in Gas-Phase Molecules", in *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th Edition (Internet Version 2010)*, David R. Lide, ed., CRC Press/Taylor and Francis, Boca Raton, FL; consultado em 23/11/2011.