

## Modelagem molecular no aprendizado de química orgânica

Núbia Moura Ribeiro (PQ)\*, Alysson Luiz Mendes da Silva (IC Jr). **E-mail: nubia@cefetba.br**

Centro Federal de Educação Tecnológica da Bahia (CEFET-BA), Salvador-BA

Palavras Chave: representações estruturais, confôrmeros, calor de formação, modelagem molecular.

### Introdução

No processo de compreensão do conhecimento químico estão envolvidos três diferentes níveis de representação: macroscópico, microscópico e simbólico<sup>1,2</sup>. As representações estruturais facilitam as correlações entre o mundo microscópico molecular e o mundo macroscópico, através da simbologia. Entretanto, estudos revelam que muitos estudantes têm dificuldade em compreender as representações estruturais em química<sup>3</sup>, sobretudo as diferenças entre confôrmeros. Para superar essas dificuldades, pesquisadores e educadores têm sugerido uma variedade de abordagens instrucionais, como, por exemplo, o uso de modelos e ferramentas tecnológicas<sup>4</sup>.

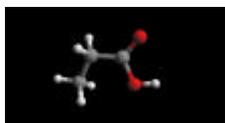
Neste trabalho, utilizou-se um programa de modelagem molecular, de acesso gratuito, para que os alunos pudessem representar as estruturas de compostos orgânicos, obter dados de cálculo de energia e realizar a otimização da geometria, acompanhando na tela, a transformação até o confôrmero mais estável. O programa utilizado foi o Arguslab<sup>5</sup>, com cálculos em nível semi-empírico (AM1). Para que os alunos pudessem comparar a energia liberada ou absorvida quando um mol de moléculas se forma a partir dos seus átomos no estado padrão, foram também calculados os valores de calor de formação de moléculas de séries homólogas e heterólogas.

### Resultados e Discussão

Os alunos desenharam, no programa Argus, as representações do propano, propanol e ácido propanóico, sem preocupação com proporcionalidade entre comprimento ou ângulo de ligação. A energia da molécula na representação desenhada foi calculada, e em seguida, foi realizada a otimização de geometria. Os alunos acompanharam na tela do computador as modificações ocorridas nos comprimentos e ângulos de ligação da representação estrutural da molécula até alcançar confôrmero estável, e compararam a energia deles. A Figura 1 mostra uma das representações do ácido propanóico e seu confôrmero mais estável, com as respectivas energias.



Energia = -25223.7kcal/mol



Energia = -25565.3kcal/mol

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Figura 1. Representações estruturais do ácido propanóico e suas respectivas energias

A modelagem molecular foi usada também para calcular o calor de formação de hidrocarbonetos, álcoois e ácidos carboxílicos de cadeia linear de 1 a 6 carbonos. A Figura 2 mostra o gráfico correlacionando o calor de formação e a massa molar dessas moléculas. Os alunos observaram que, nas séries homólogas, o aumento de unidades de CH<sub>2</sub> nas moléculas de todas essas funções orgânicas, resultou no decréscimo de cerca de 7 kcal/mol no calor de formação. Nas séries heterólogas, observaram o decréscimo de cerca de 37,0 kcal/mol no calor de formação dos álcoois em relação ao dos ácidos carboxílicos correspondentes; um decréscimo de cerca de 84,0 kcal/mol dos ácidos em relação aos hidrocarbonetos correspondentes; um decréscimo de cerca de 47,5 kcal/mol dos álcoois em relação aos hidrocarbonetos correspondentes. Concluíram que a presença de cada átomo de oxigênio reduzia o calor de formação da molécula de 37 a 47 kcal/mol.

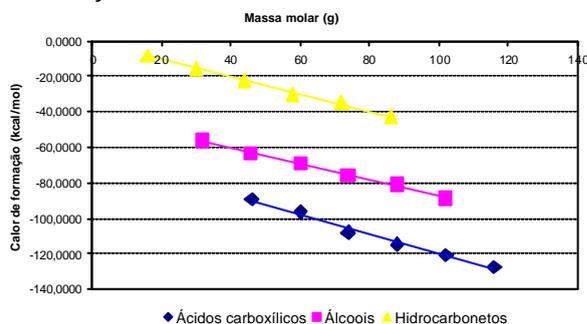


Figura 2. Correlação entre massa molar e calor de formação para hidrocarbonetos, álcoois e ácidos carboxílicos

### Conclusões

O uso de ferramentas tecnológicas, como de programas de modelagem molecular, permitiu a compreensão das diferenças entre confôrmeros, além de propiciar reflexões e a construção de correlações baseadas no calor de formação de moléculas de séries heterólogas.

### Agradecimentos

À FAPESB, pela bolsa do PIBIC Jr.

<sup>1</sup> Johnstone, A.H. *Journal of Chemical Education*. **1993**, 70, 701.

<sup>2</sup> Gois, J. e Giordan, M. *Química Nova na Escola*. **2007**, Cadernos temáticos 7, 34.

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

<sup>3</sup> Santos, F. M. T. e Greca, I. M. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias* **2005**, *4*, 1.

<sup>4</sup> Eichler, M. e Del Pino, J.C. *Química Nova*, **2000**, *23*, 835.

<sup>5</sup> ArgusLab. [www.planaria-software.com/arguslab40.htm](http://www.planaria-software.com/arguslab40.htm).

Acessado em 11 de janeiro de **2008**.