

## PROGRAMAS COMPUTACIONAIS AUXILIANDO A EDUCAÇÃO EM QUÍMICA.

Lódino Serbim U. Neto<sup>1</sup>(PG)\*, Humberto Gomes da Silva Neto<sup>1</sup>(IC), Daniela M. A. Ferraz Navarro<sup>1</sup>(PQ), Ricardo Luiz Longo<sup>1</sup>(PQ). *professorlodinoserbim@yahoo.com.br*

(1) Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Av. Luiz Freire s/n, CDU, CEP 50740-540, Recife – Pernambuco.

Palavras Chave: Educação química, software, ensino.

### Introdução

No Brasil, a questão da qualidade do ensino é tema de debates universitários e governamentais. Dentre os temas envolvidos, encontram-se a estrutura curricular e as metodologias de aprendizagem que são apresentadas aos licenciandos, pela necessidade desses conhecimentos serem adquiridos pelos estudantes das licenciaturas, dada à realidade de ensino dessa década. Com o advento da tecnologia, os computadores têm ocupado cada vez mais espaço na sociedade atual. Diante da evolução e difusão dessa tecnologia, somadas à diminuição dos preços, sua utilização é cada vez mais freqüente na educação. Em particular, nas últimas décadas, essa ferramenta deu ênfase à química computacional. Motivados pela ausência de experimentos computacionais no Ensino de Química do curso de Licenciatura em Química da UFPE, apresentaremos nesse trabalho, uma proposta para implementar na grade curricular, experimentos computacionais usando programas como o Gaussian03W, Gaussview3.0 e similares gratuitos. Esse trabalho foi desenvolvido na perspectiva de introduzir aos licenciandos, formas alternativas de ensino-aprendizagem<sup>1</sup>.

### Resultados e Discussão

Foram propostos três experimentos: **1) obter da estrutura de equilíbrio (geometria) da água e do ozônio.** Nesse foram introduzidas às características dos programas, como por exemplo, formas de inserção dos dados para os cálculos e a verificação dos resultados obtidos. Nesta etapa, foi demonstrado ao discente como fazer a especificação da geometria da molécula nos programas e a especificação do tipo de cálculo. O discente ficou responsável por inserir a carga, multiplicidade e especificar a geometria para molécula, além de analisar os dados obtidos e comparar com a literatura. **2) realizar a varredura de energia versus ângulo, apresentando a curva de energia potencial em programas gráficos como o Excel e o GaussView.** O experimento foi utilizado para o cálculo de varredura da superfície de energia potencial do ozônio e será efetuado automaticamente especificando a coordenada interna adequada e o

passo da varredura. A análise e visualização da curva de energia potencial serão realizados diretamente com o programa GaussView em termos da energia total (em  $E_n$ ) em função do passo. Com o programa Excel construiu-se o gráfico da energia relativa (em  $\text{kJ mol}^{-1}$ ) em função do ângulo ( $^\circ$ ). A partir deste, visualizou-se as estruturas de mínimo e a barreira de energia. **3) gerar os arquivos adequados para a visualização dos orbitais canônicos e localizados do metano.** Este último permitiu a previsão do espectro foto-eletrônico e sua comparação com o espectro experimental. Com esse experimento lançou-se a discussão sobre a utilização dos modelos de orbitais canônicos e localizados na descrição de estruturas moleculares, ligações químicas e espectroscopia. Visualizaram-se, então, os orbitais canônicos e localizados do metano. Com base na forma e energias dos orbitais foram previstos, pelos discentes, espectros foto-eletrônicos diferentes para cada tipo de representação dos orbitais. Da comparação com o espectro experimental, os estudantes foram estimulados a concluir que os orbitais canônicos fornecem a descrição adequada. Entretanto, com estes orbitais os alunos concluíram erroneamente que as quatro ligações GH não eram equivalentes, e, portanto, que a estrutura do metano não seria tetraédrica (simetria  $T_d$ ). Sendo corrigidos, pesquisaram e elaboraram relatórios das práticas, explicando e representando as diferenças entre os orbitais canônicos e localizados.

### Conclusões

A utilização dos softwares para a obtenção das moléculas de água e ozônio, além da varredura da superfície de energia potencial do ozônio, foi realizada sem grandes problemas. Contudo, dificuldades foram constatadas no entendimento dos métodos, das aproximações e dos conceitos de orbitais canônicos e localizados.

### Agradecimentos

DQF-UFPE e DE-UFPE.

<sup>1</sup> Viste, A. J. *Chem. Educ.* **1999**, 76, 1065.