O uso dos softwares Gaussview 3.07 e Gaussian 03W como ferramentas de ensino no estudo de reações orgânicas.

Carla Andreza Gomes Furtado[1](IC), Claudio Nahun Alves[2](PQ), Gleiciane Leal Moraes [1*](PG), Haydée Serrão de Castro Ranieri[1](IC), Jaqueline Souza Souza[1](IC), Jerônimo Lameira Silva[2](PQ), João da Silva Carneiro[2](PQ), Juliana Queiroz Pinto Marques[1](IC), Sávyo Castro Souza[2](PG). *gleicimoraes@ufpa.br

(1)Universidade do Estado do Pará. Tv. Dr. Enéas Pinheiro, Marco, CEP: 66030-600, Belém-PA.

(2)Universidade Federal do Pará, Rua Augusto Corrêa, 1-Guamá, CEP 66075-110, Belém-PA.

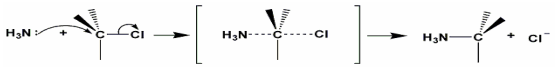
Palavras Chave: *ensino de química, Softwares GaussView 3.07 e Gaussian 03W, simulação de reação de substituição.*

Introdução

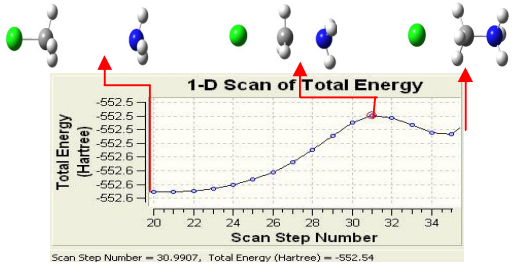
O uso de ferramentas computacionais no ensino tem sido apontado como uma das alternativas de atividade na prática pedagógica. A criação de imagens e modelos que auxiliem na construção do conhecimento é fundamental no processo de ensino aprendizagem de química orgânica, visto que este assunto tem como objeto a compreensão de conceitos abstratos, que fogem da realidade cognitiva dos alunos[2]. Partindo desta problemática, este trabalho tem por objetivo propor a utilização dos softwares GaussView 3.07 e Gaussian 03W para a construção de simulações de reações, bem como a produção de outros recursos imagéticos, como mapas de potencial eletrostático e gráficos de energia, que podem ser utilizados didaticamente no ensino de nível médio. Realizou-se a simulação da reação de substituição nucleofílica no substrato orgânico cloreto de metila, pelo nucleófilo amônia, com seu respectivo gráfico de energia e mapa de potencial eletrostático. As estruturas dos reagentes foram desenhadas no programa GaussView 3.07.

Resultados e Discussão

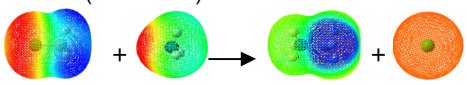
No vídeo produzido é possível observar a aproximação do nucleófilo ao carbono do substrato orgânico pelo lado oposto ao do grupo de saída, levando o sistema reacional ao estado de transição, onde o carbono e seus ligantes assumem geometria trigonal plana e ocorre simultaneamente a formação da ligação carbono-nitrogênio e rompimento da ligação cloro-carbono para formação do cátion metilamônio. Conforme mecanismo abaixo.



As etapas características das reações nucleofílicas de segunda ordem que são bem visualizadas no vídeo, se devem as características da base de Lewis usada, que funciona como nucleófilo forte, ao carbocátion primário formado pelo rompimento da ligação com o halogênio e a presença de um bom grupo de saída que favorece esse tipo de reação[1]. O alto conteúdo energético, que acompanha este tipo de reação, pode ser observado no gráfico de energia gerado durante o trabalho computacional. A seguir encontram-se o gráfico de energia e as estruturas moleculares nos pontos descritos.



No mapa de potencial eletrostático em concordância com a literatura, a região atacada no cloreto de metila é positiva (azul) e a região do amoníaco que se liga ao cloreto é a de maior densidade eletrônica da molécula (vermelho).



Conclusões

Do ponto de vista químico e pedagógico, a reação simulada atinge resultados plausíveis, aliando conceitos abstratos ao aspecto visual sem abrir mão da veracidade dos modelos moleculares. As simulações podem gerar nos estudantes, a habilidade de "ver" em nível molecular, promovendo o entendimento do conteúdo, tornando mais fácil o conhecimento.

Agradecimentos

A UFPA PELA INFRAESTRUTURA

---

[1] Allinger, N. L.; *et al*. *Química Orgânica*, 2ª Ed., Rio de Janeiro: LTC, **1976**.

[2]Good, R.; Berger, C. *O computador como um mecanismo poderoso para a compreensão da ciência. In* J. Mintzes, J. Wandersee e J. Novak (Eds.), *Ensinando Ciência para a Compreensão – uma visão construtivista* **2000**.