



INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DA PARAÍBA.

CURSO SUPERIOR DE LICENCIATURA EM QUÍMICA\_Campus João Pessoa

EMERSON GONÇALVES MOREIRA

**UTILIZAÇÃO DE PRÁTICAS COMPUTACIONAIS COMO FERRAMENTA  
DIDÁTICA PARA A DISCIPLINA DE QUÍMICA ORGÂNICA**

João Pessoa – PB

Julho de 2017

Emerson Gonçalves Moreira

**UTILIZAÇÃO DE PRÁTICAS COMPUTACIONAIS COMO FERRAMENTA  
DIDÁTICA PARA A DISCIPLINA DE QUÍMICA ORGÂNICA**

Monografia submetida à Coordenação do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba, Campus I, como requisito para a conclusão do Curso de Licenciatura em Química.

Orientador: Dr. Italo Curvelo dos Anjos

João Pessoa – PB

Julho de 2017

Emerson Gonçalves Moreira

**UTILIZAÇÃO DE PRÁTICAS COMPUTACIONAIS COMO FERRAMENTA  
DIDÁTICA PARA A DISCIPLINA DE QUÍMICA ORGÂNICA**

Trabalho monográfico apresentado a coordenação do curso de Licenciatura em Química, do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia *campus* João Pessoa, como requisito parcial para a obtenção de título de licenciado em Química. Apreciado pela Banca examinadora composta pelos seguintes membros:

---

Prof. Dr. Italo Curvelo dos Anjos

Orientador

---

Ex: Prof. Dr. Jailson Machado Ferreira

Examinador

---

Ex: Prof. Ms. Jorge Gonçalo Fernandez Lorenzo

Examinador

JOÃO PESSOA, \_\_\_\_/\_\_\_\_/ 2017

À minha mãe que acreditou nos meus esforços e me incentivou durante esta jornada. Dedico

## **AGRADECIMENTOS**

*A Deus, pelo dom da vida, por me confortar nos momentos mais difíceis e me dando forças para sempre seguir em frente.*

*A minha mãe por todo o incentivo, apoio, dedicação, carinho e por todos os sacrifícios que fizestes em prol da minha educação. Minhas palavras não serão suficientes para agradecer, muito obrigado!!*

*A minha irmã e meu cunhado, Layane e Glesdon por todo apoio incentivo e por sempre estarem presente em todos os momentos.*

*Ao meu orientador, professor Ítalo por toda paciência, orientação, apoio, amizade e por sempre tentar simplificar os conceitos bizarros da Química Quântica. E claro, por ter me apresentado o mundo da Química Computacional. Muito obrigado!*

*Ao professor Jailson Machado (Tutor do PET Química) pelos ensinamentos, puxões de orelha e por sempre acredita em mim.*

*Aos meus amigos do PET Química: Isabele Francelino, Bruno Enedino, Marconi Júnior, Paulo Ricardo, Jefferson Santos, Rayssa Medeiros, Lay Alicy, Glauris Ferreira, Jonildo Junior, Edna Sabino, Mayzza Nascimento, Henrique e Mileny por todas as conversas nem sempre tão produtivas, mas sempre descontraídas.*

*Aos professores do curso de Licenciatura em Química do IFPB por toda dedicação e empenho na minha formação, agradecimento em especial a Francisco Emanuel, Jorge Gonçalo, Fátima Villar, Alessandra Marcone, Márcia Santos, Geovana*

*Camargo, Carlos Alberto, Sérgio Ricardo, Jailson Machado, Graça Medeiros e Suely Carneiro.*

*A Isabele Francelino e Marconi, o “grupo não amigos’ pela amizade, apoio e companheiros ao longo dessa caminhada. Os caminhos para a Vasco da Gama não é o mesmo sem vocês. Muito obrigado!!*

*Aos meus amigos de caminhada Daniel Gabriel, Carlos Alberto e Márcio Silva por todas as conversas e momentos que passamos juntos ao longo deste curso.*

*Aos meus amigos: Áfia Regina (coach pré-vestibular), Geniellen (vida de campo, vida que amo!!), Thiane (Tibiri), Rayssa Medeiros, Neidson Caio, Glaurius (companheira de biblioteca) e Mattheus Mousinho pela amizade, por escutarem meus choros e por sempre estarem presente em todos os momentos. Muito obrigado!!*

*Ao professor Antonio Florêncio (canal universidade da Química) por todas as aulas compartilhadas e pelo empenho em divulgar a Química. Minha formação não seria a mesma sem elas!!*

*Ao IFPB campus João Pessoa por todo o suporte dado durante esses três.*

*“Se apaixonar por uma atividade e a faça. Ninguém nunca descobriu do que se trata a vida, e não importa. Quase tudo é realmente interessante se você olhar perto o bastante.”*

Richard Feynman (1918-1988)

## **RESUMO**

O aprendizado da disciplina de Química ainda é, em grande parte baseado nas metodologias tradicionais de ensino. No entanto, várias são as propostas recentes de adaptar o currículo através do uso de tecnologia em sala de aula para propiciar aos discentes uma aprendizagem mais significativa que esteja de acordo com a realidade atual. Em detrimento dessa perspectiva, propôs-se nesse trabalho utilizar a Química computacional como ferramenta didática para facilitar o processo de ensino-aprendizagem da disciplina de Química Orgânica I. O presente estudo se configurou em três etapas: (i) a elaboração das práticas de Química Computacional, (ii) a realização dos cálculos químicos computacionais de conteúdos pertinentes da disciplina, (iii) o desenvolvimento de uma oficina com discentes do curso de Licenciatura em Química do IFPB, campus João Pessoa no qual o material elaborado na primeira etapa foi utilizado. A utilização da Química Computacional enquanto recurso didático mostrou-se muito satisfatória e eficiente no que diz respeito ao processo de ensino-aprendizagem da disciplina de Química Orgânica I, possibilitando aos discentes a visualização em escala microscópica e a compreensão de propriedades energéticas dos sistemas químicos estudados.

**Palavras Chaves:** Química Computacional. Química Orgânica. Ferramenta didática.



## **ABSTRACT**

Learning the discipline of chemistry is still largely based on traditional teaching methodologies. However, there are several recent proposals to adapt the curriculum through the use of technology in the classroom to provide students with a more meaningful learning that is in accordance with the current reality. In this way, it was proposed in this work to use Computational Chemistry as a didactic tool to facilitate the teaching-learning process of the discipline of Organic Chemistry I. The present study was comprised of three stages: (i) the formulation of the practices of Computational Chemistry, (ii) computational calculations of pertinent contents of the discipline, (iii) the development and the execution of a workshop with students of the Licentiate course in Chemistry of IFPB, João Pessoa campus in which the material formulated in the first stage was used. The use of Computational Chemistry as a didactic resource was very satisfactory and efficient in regard to the teaching-learning process of the discipline of Organic Chemistry I, which allowed the students to visualize chemical systems on a microscopic scale and also to understand the energetic properties of those systems.

**Keywords:** Computational Chemistry. Organic chemistry. Didactic tool.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

<b>Figura 1:</b> Métodos de Química Computacional.....	18
<b>Figura 2</b> Representação de uma molécula utilizando princípios de modelagem molecular onde as esferas são os átomos e as molas representam as ligações entre eles.....	19
<b>Figura 3</b> Representação de uma superfície de energia potencial.....	26
<b>Figura 4</b> Pontos estacionários em uma PES.....	27
<b>Figura 5</b> Solvente como um contínuo dielétrico.....	28
<b>Figura 6</b> Um gráfico do potencial de energia (kcal) versus a rotação (grau) das ligações do etano.....	30
<b>Figura 7</b> Um gráfico do potencial de energia (kcal) versus a rotação (grau) das ligações do 1,2dicloroetano.....	31
<b>Figura 8</b> Estrutura tridimensional dos (A) reagentes; (B) Estado de Transição (C) Produtos. Fonte: próprio autor.....	32
<b>Figura 9</b> Gráfico de coordenada de reação com a energia livre de gibbs negativa..	33
<b>Figura 10</b> Gráfico de coordenada de reação com a energia livre de gibbs positiva..	34
<b>Figura 11</b> Estrutura tridimensional dos (a) Reagentes; (b) Estado de Transição (c) Produtos.....	35
<b>Figura 12</b> Gráfico de energia livre de Gibbs e energia de ativação de cada grupo abandonador.....	36
<b>Figura 13</b> Respostas dos alunos da primeira questão do questionário.....	38
<b>Figura 14</b> Respostas dos alunos da segunda questão do questionário.....	38

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 1:</b> Algumas funções de bases e modo da descrição dos orbitais atômicos.....	22
<b>Tabela 2:</b> Energia livre de Gibbs das estruturas otimizadas.....	33
<b>Tabela 3:</b> Informações termodinâmicas da reação.....	35

## **LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS**

**TIC: Tecnologias da Informação e Comunicação**

**SE: Semi-Empírico**

**DFT: Teoria do Funcional da Densidade**

**MM: Mecânica Molecular**

**HF: Hartree-Fock**

**SCF: Campo autoconsistente**

***LDA: Aproximação da densidade local***

***GGA: Aproximação do gradiente generalizada***

**SEP: Superfície de energia potencial**

**TS: Estado de Transição**

**IRC: Coordenada Intrínseca de Reação**

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	15
<b>2. OBJETIVOS</b> .....	16
2.1 Objetivo Geral .....	16
2.2 Objetivos Específicos.....	16
<b>3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> .....	17
3.1 O uso de tecnologia no Ensino de Química .....	17
3.2 Métodos de Química Computacional .....	18
3.3 Teoria do Funcional da Densidade .....	23
3.4 Estudo computacional de reações .....	25
<b>4. METODOLOGIA</b> .....	29
4.1 Elaboração da apostila de Química Computacional Aplicada a Química Orgânica .....	29
4.2 Procedimento computacional .....	29
4.3 Aplicação didática .....	29
<b>5. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	31
5.1 Resultado dos cálculos .....	31
5.1.1 Análise conformacional do Etano e Dicloroetano .....	31
5.1.2 Reação de Substituição Nucleofílica com inversão de estereoquímica .....	33
5.1.3 O grupo abandonador.....	35
5.2 Aplicação didática .....	37
<b>6. CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	43
<b>7. PERSPECTIVAS</b> .....	44
<b>8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	45
<b>9. APÊNCIDES</b> .....	50
9.1 APÊNDICE I: Roteiros das Práticas Computacionais .....	51
9.1.1 PRÁTICA I – Análise Conformacional Do Etano .....	52

9.1.2 PRÁTICA II – Análise Conformacional Do 1,2-Dicloroetano .....	54
9.1.3 PRÁTICA III – Modelagem De Reação De Substituição Nucleofílica Com Inversão De Estereoquímica. ....	56
9.1.4 PRÁTICA IV – Grupo Abandonador.....	58
9.2 APENDICÊ II: Questionário.....	60

## 1. INTRODUÇÃO

O ensino da disciplina de Química para discentes do Ensino médio e dos cursos de graduação ainda configura-se como um desafio tanto para os docentes quanto para os alunos. Quando os conceitos na visão microscópica são mal trabalhados e transmitidos de forma limitada, os estudantes tendem a desenvolver concepções alternativas. Como por exemplo, o estudo dos mecanismos de reação que envolvem fenômenos em nível molecular (microscópico) e macroscópicos dos sistemas químicos investigados: reagentes, estado de transição, produtos, entre outros.<sup>1</sup>

Assim, o uso e aplicação das tecnologias da informação em sala de aula podem promover uma efetivação da aprendizagem científica. Tais ferramentas denotam sua potencialidade reforçando a ação docente em sala de aula de modo a favorecer colaborativa e substancialmente a aprendizagem significativa dos conteúdos curriculares.<sup>2</sup> Destarte, os recentes avanços nos programas de Química Computacional vêm possibilitando mudanças significativas no Ensino de Química.

A Química Computacional torna-se capaz de fornecer resultados confiáveis sobre geometria molecular e outras propriedades químicas, que são provenientes de experimentações químicas ou derivados de abordagem puramente teóricas. Dentre as abordagens pode-se destacar: os métodos de mecânica molecular, mecânico quântico e pela teoria do funcional da densidade. Logo, a Química Quântica Computacional apresenta-se como um poderoso recurso didático uma vez que pode proporcionar condições aos alunos de, a partir da modelização de determinado fenômeno, desenvolverem a compreensão conceitual dos estudos desenvolvidos.<sup>3</sup>

Diante da preocupação crescente com o processo de ensino-aprendizagem da Química em cursos de graduação, o presente trabalho pretende utilizar métodos de Química Computacional aliados a programas de visualização molecular como ferramenta didática, a partir da elaboração de práticas computacionais para a disciplina de Química Orgânica I.

## 2. OBJETIVOS

### 2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste estudo é utilizar a Química Computacional como recurso didático para facilitar o processo de ensino-aprendizagem da disciplina de Química Orgânica I.

### 2.2 Objetivos Específicos

- Realizar uma análise conformacional nas moléculas de etano e 1,2-dicloroetano através de cálculos computacionais;
- Modelar o mecanismo de uma reação de substituição nucleofílica bimolecular ( $S_N2$ ) com inversão de estereoquímica usando cálculos computacionais;
- Modelar os mecanismos de reações  $S_N2$  com diferentes grupos abandonadores e avaliar o efeito desses grupos nas energias envolvidas utilizando cálculos computacionais;
- Realizar uma oficina com discentes do IFPB para:
  - Difundir a Química Computacional e suas aplicações,
  - Utilizar os resultados dos cálculos para melhorar a compreensão dos discentes em relação a estereoquímica e mecanismo de reações orgânicas,
  - Avaliar o potencial da Química Computacional enquanto recurso didático,
- Desenvolver práticas de Química Computacional como material complementar à disciplina Química Orgânica I.



### 3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 3.1 O uso de tecnologia no Ensino de Química

A sociedade atual encontra-se mergulhada nas novas Tecnologias da Informação e Comunicação (TIC), as quais oferecem progressos na comunicação, promovem melhoria na qualidade de vida, favorecem um maior fluxo de informação, estimulam e impulsionam o desenvolvimento de novas pesquisas. Dessa maneira, essas novas tecnologias não poderiam estar ausentes de um campo bastante relevante da nossa sociedade: a Educação.<sup>3,4</sup>

Os computadores desenvolveram-se ao longo dos anos e vem ganhando cada vez mais espaço nas instituições de ensino. No campo educacional estão sendo utilizados como ferramentas para facilitar o processo de ensino-aprendizagem.<sup>1</sup> Conforme Gabini e Diniz<sup>5</sup>,

“a utilização do computador como um recurso didático à ação do professor em sala de aula, visando enriquecer as situações de aprendizagem e elaboração do saber, pode colaborar para que esse conhecimento adquira um grau maior de significação.” (p. 347)<sup>3</sup>

As potencialidades das tecnologias digitais no ambiente de aprendizagem favorecem oportunidades adicionais aos discentes, expandindo os limites da sala de aula. Ao mesmo tempo em que as ferramentas computacionais possibilitam a apresentação de conceitos clássicos em uma roupagem mais moderna e atrativa ao discente, ela também deve ser um canal de ligação entre professor-aluno-conhecimento.<sup>5,6</sup>

Ribeiro e Greca (p. 542)<sup>3</sup> nos alertam que “a utilização de computadores em sala de aula requer não só seu uso de maneira adequada, mas uma integração conveniente com o enfoque educacional adotado: a tecnologia deve se adequar à Educação e não o contrário”.

A utilização do computador no ensino de Química permite ao professor simular e demonstrar as variáveis envolvidas nos fenômenos em que a matéria é transformada. Os *softwares* existentes na área de Química permitem que sejam estudados os arranjos geométricos, as ligações químicas, a atomística, os processos físico-químicos e ainda os compostos orgânicos.<sup>2</sup>

A presença do ambiente virtual permite simular situações que seriam impossíveis ou perigosas em um laboratório experimental, o que permite ao discente aplicar o conhecimento que seria simplesmente teórico usando um ambiente realístico. É necessário ressaltar que o computador não deve ser observado como um substituto das aulas experimentais, já que diversas habilidades e procedimentos só podem ser proporcionados pelas atividades realizadas em um laboratório de Química Experimental. <sup>2,7</sup>

Dessa maneira, é necessário que a escolha do *software* seja realizada pelo docente, que satisfaça seus objetivos, como também, respeitando as características dos discentes, possibilitando diversas maneiras de aprendizagem.<sup>8</sup> Eichler e Del Pino<sup>9</sup> verificaram que o *software* por si só não funciona como desencadeador do processo de aprendizagem, e para que ele seja eficaz, é necessário que exista uma coerência com o currículo e com as atividades desenvolvidas em sala de aula.

### *3.2 Métodos de Química Computacional*

#### *3.2.1 Considerações Gerais*

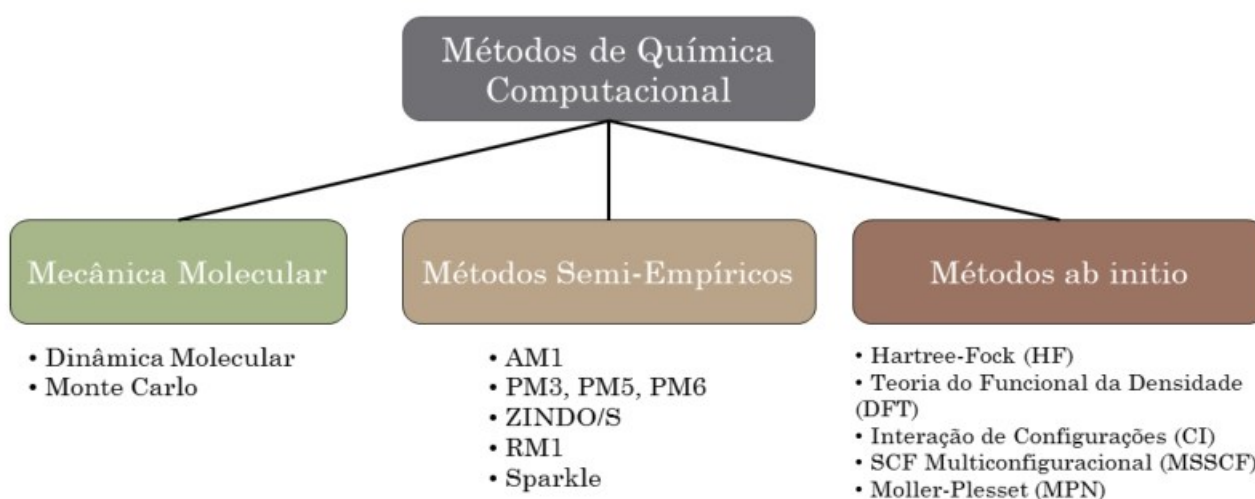
Química Computacional é um campo da Química que utiliza a simulação computacional na resolução de problemas químicos. Utiliza-se os resultados da Química teórica aliados a programas de computadores, para calcular as propriedades e estruturas de sólidos e moléculas. Conforme Hase<sup>10</sup> é um método fundamental para estudos da estrutura da matéria e de nanomateriais, física do estado sólido, biofísica e outros campos da ciência relacionados à investigação das estruturas eletrônicas dos compostos.

Vários estudos são encontrados na literatura envolvendo os cálculos de Química Computacional, principalmente cálculos de análise conformacional<sup>11</sup>, Reatividade Química <sup>12</sup>, Ressonância Magnética Nuclear (RMN) <sup>13</sup>, espectros de Infravermelho (IV) <sup>14</sup>, espectros Ultravioleta (UV)<sup>15</sup>, desenvolvimento de novos fármacos <sup>16</sup> e de propriedades gerais das substâncias <sup>17</sup>. Normalmente, os resultados computacionais complementam as informações obtidas por meio da

Ciência experimental, em alguns casos pode até prever fenômenos químicos ainda não observados.

Segundo Atkins<sup>18</sup>, o desafio principal para os cálculos estruturais em Química computacional é a solução da equação de onda de Schrödinger,  $\hat{H}\psi = E\psi$ , em que  $E$  é a energia eletrônica e  $\psi$  é a função de onda multieletrônica, que é função das coordenadas de todos os elétrons e do núcleo. A equação só pode ser resolvida para átomos que sejam monoelétrônicos, como é o caso do átomo de hidrogênio. Para átomos polieletrônicos e moléculas é necessário utilizar de aproximações matemáticas para encontrar uma solução para a equação de Schrödinger. <sup>18,19, 20</sup>

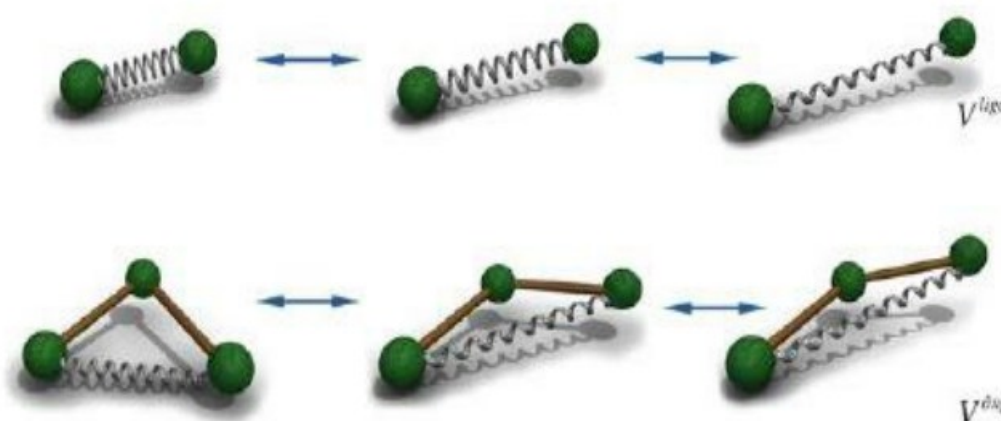
Assim, diferentes métodos de aproximação com o interesse de encontrar uma solução para essa equação foram desenvolvidos. Dentre eles estão os métodos Semi-Empíricos (SE), de Ab Initio e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Esses métodos continuam se desenvolvendo e são utilizados rotineiramente no estudo da modelagem molecular. São mostrados na Figura 1 alguns dos principais métodos utilizados em Química Computacional.



**Figura 2** Métodos de Química Computacional. Fonte: Próprio autor.

Os métodos de mecânica molecular (MM), pela simplicidade computacional e eficiência vem sendo aplicado em estudos de estruturas moleculares e energias conformacionais de sistema com milhares de átomos, tipicamente para a modelagem de sistema de interesse químico e biológico. <sup>20, 21</sup>

Esses métodos não se fundamentam nos princípios da Mecânica Quântica, já que não empregam em sua metodologia as funções de onda nem utilizam de aproximações para tentar solucionar a equação de Schrödinger. A MM está baseada na mecânica clássica e utiliza como por exemplo, as leis de Newton e de Hooke para descrever o sistema químico. Assim, pode-se admitir que a mecânica molecular trata a molécula como uma coleção de esferas conectadas por molas, onde as esferas representam os núcleos e as molas representam as ligações, como mostra a Figura 2.22,23



**Figura 2** Representação de uma molécula utilizando princípios de modelagem molecular onde as esferas são os átomos e as molas representam as ligações entre eles. Fonte: VERLI 23

Nessa metodologia, são utilizados campos de força, que podem ser definido como um conjunto de funções e parametrização usadas em cálculos de mecânica molecular para obter a geometria e a energia de uma molécula. Os métodos de MM são utilizados para sistemas relativamente grandes, como por exemplo, aminoácidos e compostos bioativos. Existem programas com acesso gratuito para este tipo de cálculo como, por exemplo, o Tinker<sup>25</sup> e o GROMACS<sup>26</sup>. 24, 27

Os métodos Semi-Empíricos (SE), usam nas suas formulações, além das constantes universais, parâmetros empíricos introduzidos com o intuito de diminuir o tempo computacional sem tornar seus resultados muito diferentes em relação aos resultados experimentais. Além disso, utilizam algumas considerações simplificadoras de natureza teórica que permitem anular certas integrais. Um exemplo destas simplificações é a aproximação ZDO (*Zero Differential Overlap*) a qual reduz o número de integrais de repulsão eletrônica, que apresentam baixas contribuições e, portanto, poderiam ser omitidas.<sup>22, 28</sup>

Ultimamente outros métodos SE vem sendo desenvolvidos e utilizados, como por exemplo, o método *Austin Model 1* (AM1), *Parametric Method number 5* (PM5), *Modified Neglect of Differential Overlap* (MNDO), Recife Model 1 (RM1), dentre outros. Cada método faz a eleição de quais integrais igualar à zero, e em quais integrais utilizar valores experimentais, porém o princípio é o mesmo.<sup>29</sup>

Os métodos Semi-Empíricos, devido às aproximações introduzidas em suas implementações, apresentam menor demanda computacional e conseguem calcular as propriedades de sistemas maiores que os dos métodos *ab initio*. Desta maneira, é possível calcular as propriedades de frações finitas de polímeros, aglomerados iônicos, mecanismos de reação, dentre outros sistemas, utilizando-se as parametrizações adequadas para cada sistema.<sup>22</sup>

Os métodos *ab initio* começaram a ganhar força na década de 30 com cálculos para sistemas relativamente pequenos, como por exemplo, moléculas diatômicas. O termo latim *ab initio*, que significa *a partir do princípio*, implica que não há aproximações e que apenas constantes universais são utilizadas (constante de Planck, velocidade da luz, entre outras) e que as formulações são obtidas teoricamente, desde o início de sua concepção.<sup>22</sup> Apresentam uma limitação computacional, já que o aumento no sistema estudado produz um grande aumento no custo computacional do cálculo, devido à quantidade de integrais que precisam ser resolvidas numericamente.<sup>29</sup> O método mais simples, e mais utilizado de cálculos *Ab Initio* é o método de Hartree-Fock (HF).<sup>30</sup>

O método de Hatree-Fock (HF) foi desenvolvido entre os anos de 1927 e 1930 pelos físicos D. R. Hartree e V. Fock. Hartree propõe a função de onda global do sistema como o produto das funções monoelétrônicas, conhecida como aproximação orbital, e também desconsidera a repulsão elétron-elétron. Mas, observou-se que essa aproximação não levava em consideração os princípios da indistinguibilidade e da antissimetria da função de onda. Um ano após a publicação do artigo de Hartree, Fock propõe a utilização do determinante de Slater para que assim fosse possível satisfazer esses princípios.<sup>31</sup>

A equação de HF na forma canônica é uma versão mais moderna da Equação de Schrödinger, da seguinte forma:

Onde:

- : Operador de Fock
- : Função de onda monoelétrônicas
- : Energia individual

O primeiro termo da equação de HF é conhecido como operador de Fock ( ). É nesse operador que se encontra uma das maiores falhas do método, no qual a repulsão elétron-elétron é considerada apenas como uma interação do elétron com a nuvem eletrônica. <sup>30</sup>

A equação de HF é resolvida pelo método do campo autoconsistente (SCF), no qual é utilizada uma função de onda como chute inicial, ela entra no cálculo, é melhorada e o processo continua até que o cálculo possa convergir. Esse caminho de resolução é muito difícil até para os computadores, assim, Roothaan propõe uma forma alternativa para resolver esse problema. Ele sugere que a função de onda deve ser descrita como a combinação de orbitais, o qual os nomeou como base.

Assim, conjuntos de funções de base são atualmente utilizadas nos cálculos do método de Hartree-Fock-Roothaan, como as funções do tipo Slater (STOs) e do tipo Gaussiana (GTO). Uma quantidade mínima de funções de bases deve ser utilizada para representar cada orbital do átomo ou molécula no estado fundamental. Tendo como exemplo, a base mínima para o átomo de H seria uma função do tipo 1s, enquanto para o átomo de Mg são necessárias funções do tipo 1s, 2s, 2px, 2py, 2pz, 3s. Já para representar o orbital molecular de H<sub>2</sub> é preciso utilizar duas funções de base do tipo 1s. <sup>23</sup>

Para descrever o sistema com maior precisão, é necessário utilizar bases estendidas, ou seja, aumentar o número de funções para certos orbitais. As maneiras mais comuns de estender a base são: multiplicando todos os orbitais (*double-zeta*, *triple-zeta*, etc.); multiplicando apenas os orbitais de valência (*Split-valence basis set*); as funções de polarização (p, d, f, ...) e as difusas (+, ++, ...). <sup>32</sup>

As funções de polarização são boas para descrever ligações químicas, já que as mesmas inserem orbitais com maior momento angular que os existentes. Tendo como exemplo, a inserção de orbitais d para átomos pesados e de orbitais p para o hidrogênio. É representado pelos orbitais que são adicionados entre parênteses,

tendo como exemplo, 6-311G(d,p). Já as funções difusas permitem descrever sistemas que apresentem elétrons fracamente ligados e com expansão da densidade eletrônica. Por exemplo, ânions, interações intermoleculares, estados excitados e entre outros. A introdução de funções difusas na base é representada pela adição do símbolo (+), como no exemplo: 6-31++G. O primeiro (+) refere-se a inserção de funções difusas para átomos pesados, e (++) significa que funções difusas também foram inseridas para os hidrogênios. <sup>33</sup>

Tabela 1. Algumas funções de bases e modo da descrição dos orbitais atômicos. Fonte: adaptado de ORTOLAN (2014) e Pereira (2008). <sup>19, 33</sup>

Base	Descrição
STO-3G	1 função de base com 3 gaussianas primitivas por orbital
3-21G	<b>Caroço:</b> 1 função de base com 3 gaussianas primitivas <b>Valência:</b> 2 funções de base, uma com 2 gaussianas primitivas e outra com apenas 1
6-31G	<b>Caroço:</b> 1 função de base com 6 gaussianas primitivas <b>Valência:</b> 2 funções de base, uma com 3 gaussianas primitivas e outra com apenas 1
6-31++G(d,p)	6-31G com funções difusas (++) e de polarização (d,p)
6-311+G (d, p)	<b>Caroço:</b> 1 função de base com 6 gaussianas primitivas <b>Valência:</b> 3 funções de base, uma com 3 gaussianas primitivas e as duas outras com apenas uma gaussianas primitivas. Uso de funções difusas (+) e de polarização (d,p)

### 3.3 Teoria do Funcional da Densidade

A teoria do funcional da densidade (sigla em inglês DFT) surge com a proposta de determinar as propriedades do sistema através da densidade eletrônica  $\rho(r)$ . Uma função de onda ( $\Psi$ ) apresenta  $4n$  variáveis (as coordenadas espaciais  $x, y, z$  e o spin de cada elétron), entretanto, a densidade eletrônica depende apenas das três variáveis cartesianas ( $x, y, z$ ) que independem da quantidade de elétrons. Enquanto na função de onda o problema aumenta com o número de elétrons, a densidade eletrônica continua com a mesma quantidade de variáveis, sendo assim, há ganho na velocidade e também redução do custo computacional. (PEREIRA, 2008); <sup>34</sup>

As primeiras ideias de utilizar a densidade eletrônica para obter as propriedades do sistema surgiu com os trabalhos dos físicos Thomas-Fermi (1927), Dirac (1930), Slater (1937 e 1951).<sup>34</sup>

A teoria do funcional da densidade ressurgiu nos anos 60, através dos estudos de Walter Kohn e Pierre Hohenberg que propuseram e comprovaram dois postulados:

1. As propriedades do sistema no estado fundamental são determinadas através da densidade eletrônica no estado fundamental.<sup>31</sup> Assim, a energia eletrônica no estado fundamental  $E_{e(0)}$  é um funcional de  $\rho$ , de modo que:

$$E_{e(0)} = E[\rho(r)] \quad (2)$$

2. A densidade eletrônica obedece ao princípio variacional, uma vez que a densidade eletrônica do estado fundamental é aquela que minimiza a energia do sistema<sup>35</sup>, de forma que:

$$E[\rho'(r)] \geq E[\rho(r)] \quad (3)$$

Os teoremas propostos por Kohn-Hohenberg comprovaram que é possível obter as propriedades do sistema através da densidade eletrônica, mas, não sabia-se como obter a  $E_{e(0)}$  através da  $\rho$ , visto que o funcional  $E[\rho(r)]$  é desconhecido, da mesma forma que não sabia-se como obter a densidade eletrônica sem ter a função de onda.<sup>31</sup>

Em 1965, Kohn e Sham propuseram um sistema de referência fictício, onde as partículas não interagem ( $n$  elétrons) sob a ação de um potencial efetivo, o potencial de Kohn-Sham, de tal forma que a densidade eletrônica do sistema de referência é igual à densidade eletrônica do sistema real. As equações de Kohn-Sham assemelham-se às equações do método de Hartree-Fock, sendo resolvidas por processo iterativo e pelo método autoconsistente, mas, difere-se pelo termo de troca-correlação ( $V_{xc}$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} - \\ \end{array} \right\} \quad (4)$$

Em que:

- $-$  : Energia cinética do elétron  $i$ ;
- $-$  : Atração elétron-núcleo;



- : Repulsão elétron-elétron;
- : Potencial de troca-correlação
- : Orbitais de Kohn-Sham
- : Energia do sistema de referencia do elétron  $i$ .

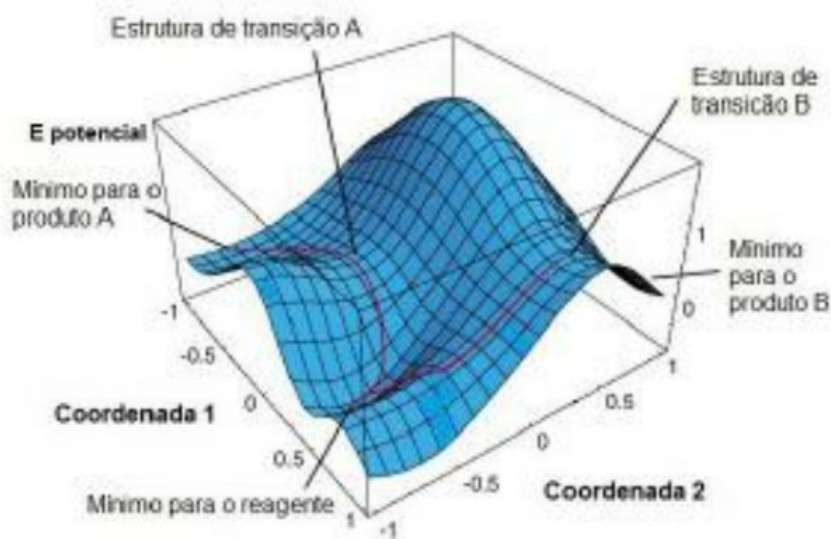
O potencial de troca-correlação ( $V_{xc}$ ) não apresenta uma solução analítica, assim, é necessário utilizar de aproximações para encontrar uma. Dessa forma, vários são os estudos para melhorar as aproximações existentes, como por exemplo, a *Aproximação da densidade local (de spin)* (siga em inglês *LDA*) e *aproximação do gradiente generalizada (GGA)*. Em geral, os diferentes métodos de DFT distinguem-se pela forma aproximada com a qual calculam o potencial de troca-correlação. <sup>31</sup>

O B3LYP é um dos funcionais mais utilizados nos cálculos de DFT. É um funcional GGA híbrido que combina termos troca do método de HF com parâmetros empíricos. A letra B indica que termos de troca desenvolvidos por Becke foram inseridos, já o LYP (Lee, Yang e Parr) constitui os termos de troca e o 3 indica que três parâmetros empíricos foram inseridos para melhorar sua performance. <sup>31</sup> Não existe um funcional perfeito, é necessário avaliar o sistema e os interesses do pesquisador.

### 3.4 Estudo computacional de reações

Para estudar como uma reação química se processa através de simulação computacional, é necessário compreender o conceito da superfície de energia potencial (SEP). A SEP aponta como a energia de um sistema molecular varia a medida que pequenas alterações ocorrem em sua estrutura. Assim, ela consegue relacionar a estrutura molecular e a respectiva energia. <sup>36</sup>

O Progresso de uma reação química pode ser descrito através de um ponto em uma SEP em que uma das coordenadas seria a distância entre átomos. <sup>36</sup> Uma representação de uma SEP é mostrada na Figura 3, nos eixos x e y é representado as distâncias interatômicas, já no eixo z se apresenta o valor da energia potencial dos reagente e produtos.



**Figura 3** Representação de uma superfície de energia potencial. Fonte: TOLDO 36

O caminho de uma reação é descrito como sendo o percurso entre os reagentes, formação do estado de transição e produtos. Para se ter conhecimento das energias dos reagentes, estado de transição (TS), produtos, como também, a barreira energia que separa os reagentes do TS, é fundamental calcular alguns pontos da SEP: o ponto de sela (relativo ao TS) e os pontos de mínimos (relacionados aos reagentes e produtos), denominados pontos críticos. Caracteriza-se como ponto crítico, os pontos que possuem a primeira derivada igual a zero. <sup>36</sup>

A figura 4 representa uma SEP que contém 3 pontos críticos devidamente identificados, o primeiro, descreve um mínimo global, pois em toda a PES esse é o ponto de menor energia. Outros pontos são caracterizados como mínimo, entretanto, não representam a menor energia do sistema, nomeados como mínimos locais. O trajeto que interliga dois mínimos é denominado como Coordenada intrínseca de reação (IRC). O estado de transição é um ponto máximo em relação ao IRC e um mínimo para todas as outras direções, sendo assim, um ponto de sela. <sup>36</sup>

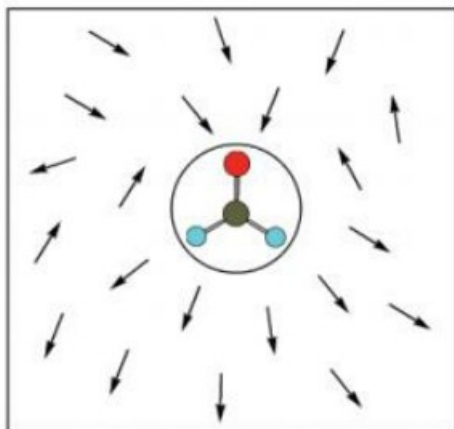


**Figura 4** Pontos estacionários em uma PES Fonte: CARVALHO <sup>37</sup>

O cálculo de IRC investiga o caminho de reação, através de uma estrutura de transição ao longo da SEP. Assim, o IRC é empregado para conferir se um TS está de fato conectado aos mínimos do sistema, reagentes e produtos. Além disso, o cálculo de IRC é uma boa forma de identificar outros estados de transição e também processos que envolvem mecanismos concertados. <sup>36</sup>

As superfícies de energia potencial são importantes para a Química, uma vez que ela relacionam a geometria molecular com a energia potencial. Por isso, grande parte dos programas de Química Computacional utilizam essas superfícies para identificar e caracterizar as estruturas pesquisadas. Além de facilitar a compreensão das reações químicas, as SEP's também podem ser utilizadas para compreender outros fenômenos da Química, como por exemplo, a análise conformacional de moléculas.

Grande parte das reações químicas ocorre em meio solvatado, de modo que o solvente pode afetar a velocidade da reação e também alterar os reagentes e produtos. Na década de 90, houve um aumento no interesse de investigar a inclusão dos solventes em cálculos químicos quânticos, dentre as várias metodologias existentes a mais usada é a que o solvente é descrito como um contínuo dielétrico, assim, as moléculas explícitas do solvente se transformam em dipolos pontuais, como mostra a figura 5. <sup>38</sup>



**Figura 5** Solvente como um contínuo dielétrico Fonte: PLIEGO<sub>38</sub>

## 4. METODOLOGIA

### 4.1 *Elaboração da apostila de Química Computacional Aplicada a Química Orgânica*

Foi confeccionada uma série de práticas computacionais visando sua aplicação no curso de licenciatura em Química do IFPB Campus João Pessoa, contendo quatro práticas que abordam conteúdos como análise conformacional de alcanos, bem como mecanismo de reações de substituição nucleofílica, os roteiros encontra-se no Apêndice I.

### 4.2 *Procedimento computacional*

O estudo da análise conformacional do etano ( $C_2H_6$ ) e do dicloroetano ( $C_2H_4Cl_2$ ) foram investigadas através do método DFT utilizando o funcional B3LYP e a base 6-31g, para o etano, e B3LYP/6-31g(d), para o dicloroetano. A busca pela conformação mais estável foi realizada através de um scan modo *redundant coordinates* variando o diedro em  $60^\circ$  em dez passos. Já o estudo dos mecanismos das reações investigadas neste trabalho foram obtidos pelo método DFT com as configurações B3LYP 6-31+g(d,p), as reações foram realizadas utilizando o dimetilsulfóxido  $(CH_3)_2SO$  como solvente implícito.

As etapas envolvidas no estudo dos mecanismos de reação em meio solvatado foram: a) Cálculo de frequência e otimização completa das estruturas dos reagentes e produtos; b) Procura pelo estado de transição, utilizando a metodologia QST3 (explicar isso aqui); c) Cálculo de frequência e otimização completa da geometria do estado de transição; e d) determinação da coordenada intrínseca de reação (IRC). Para o estudo termodinâmico das reações em fase líquida, foram considerados os resultados dos cálculos anteriores.

### 4.3 *Aplicação didática*

A aplicação foi realizada no Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba (IFPB) campus João Pessoa, com discentes do curso de licenciatura em Química. Essa aplicação didática foi feita na forma de uma oficina com duração de duas horas. Inicialmente, os conceitos de Química computacional e

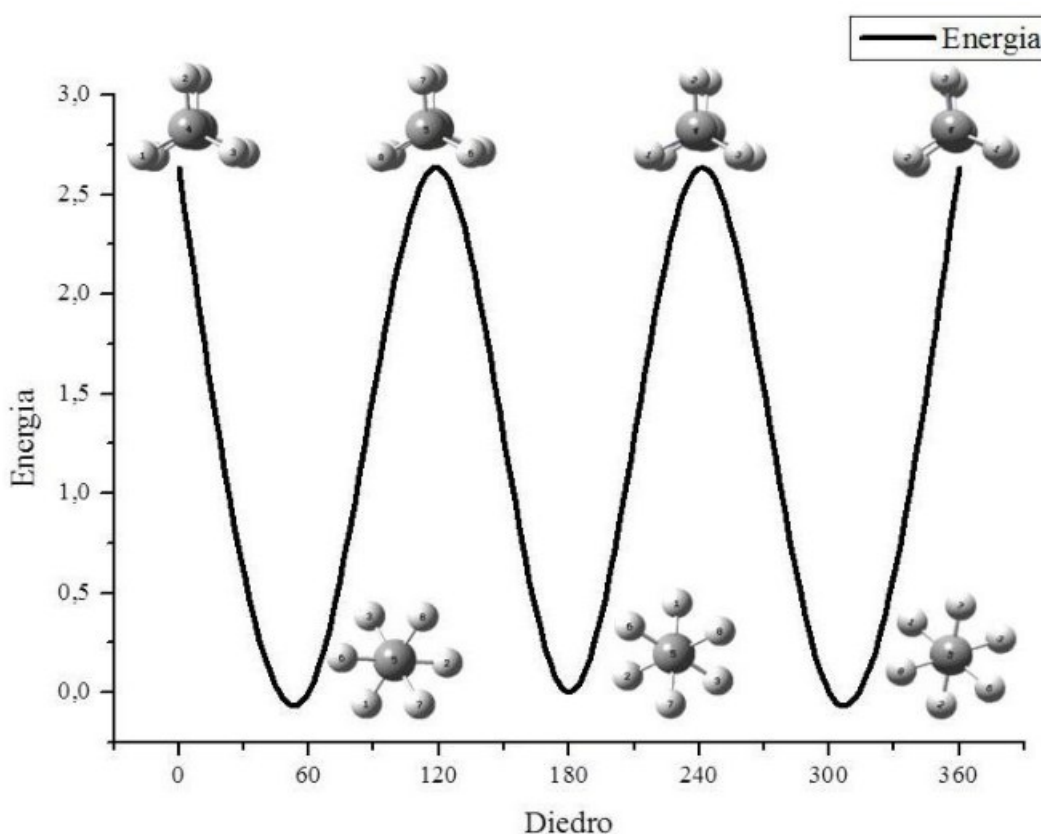
suas aplicações foram apresentados aos discentes, e posteriormente foram realizadas aulas sobre análise conformacional de moléculas orgânicas acíclicas e mecanismo de reações de substituição nucleofílica do tipo  $S_N2$  (mecanismo concertado) utilizando os resultados obtidos na etapa deste estudo. Logo depois, um questionário (APENDICE II) fora aplicado com objetivo de avaliar o impacto e o potencial da Química Computacional enquanto recurso didático.

## 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 Resultado dos cálculos

#### 5.1.1 Análise conformacional do Etano e Dicloroetano

Seguindo a metodologia descrita na seção 4, foi possível obter a análise conformacional do etano. Observou-se um perfil periódico como mostra a figura 6, apresentando pontos mínimos e máximos de intensidades equivalentes, correspondendo às conformações estrelar e eclipsada respectivamente.



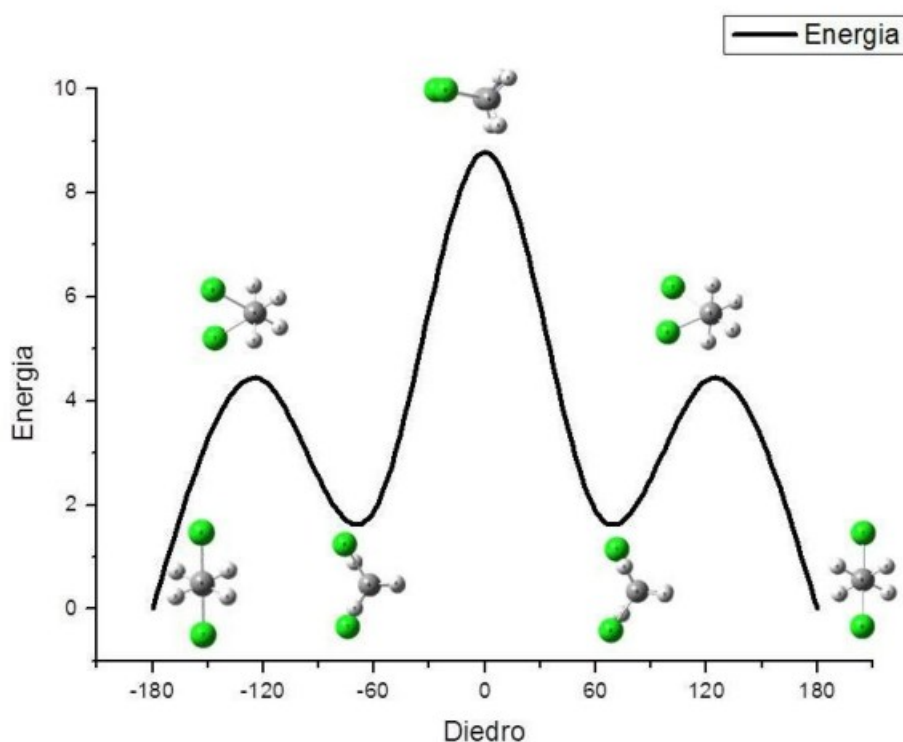
**Figura 6** Um gráfico do potencial de energia (kcal) versus a rotação (grau) das ligações do etano. Fonte: próprio autor.

Os pontos de máximo representam os confôrmeros com maior energia (menos estáveis) nos quais as ligações C-H estão bem próximas umas das outras. Já os de menor energia (mais estáveis), são aqueles em que as seis ligações C-H estão bem distantes uma das outras. Assim, se observa que grande parte das moléculas do etano encontra-se na conformação de menor energia, ou seja, na conformação

estrelar. A diferença de energia calculada entre o máximo e o mínimo (ou barreira rotacional) foi de 2,824 kcal/mol, aproximando-se do valor experimental de 2,9 kcal/mol.<sup>39</sup>

A análise conformacional do 1,2-dicloroetano apresenta um comportamento mais complexo do que o etano já que nem todas as conformações eclipsadas possuem a mesma energia. É possível observar na Figura 7 que a conformação de menor energia é a combinação no qual os dois átomos de cloro estão distante  $180^\circ$  um do outro, conformação intitulada de anti. É necessário destacar que neste ponto existe a neutralização do momento de dipolo da estrutura. À medida que a rotação em torno da ligação entre os carbonos vai ocorrendo, um máximo de energia de 4,39 Kcal/mol é alcançado em  $120^\circ$ .

A rotação das ligações continua e um mínimo de energia de 1,88 KJ/mol é encontrado onde os átomos de cloro estão separados em  $60^\circ$ . Conforme o ângulo de diedro vai se aproximando de  $0^\circ$ , um ponto de máximo é alcançado com energia em torno de 8,79 Kcal/mol. Depois do  $0^\circ$ , a energia das combinações torna-se idêntica às outras conformações discutidas acima.



**Figura 7** Um gráfico do potencial de energia (kcal) versus a rotação (grau) das ligações do 1,2-dicloroetano. Fonte: próprio autor.

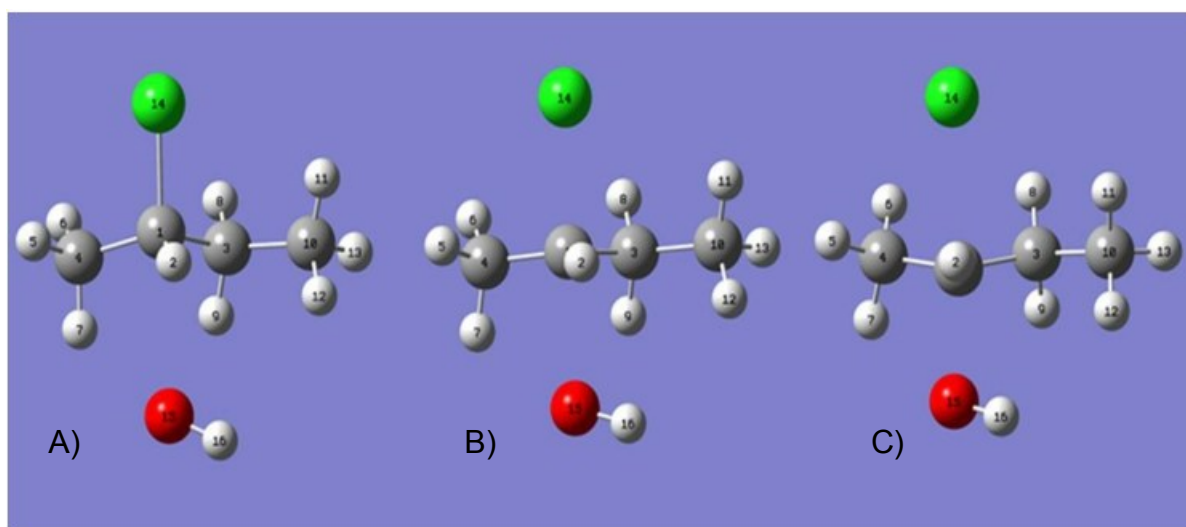
[



### 5.1.2 Reação de Substituição Nucleofílica com inversão de estereoquímica

A reação de substituição  $\text{CH}_3\text{CHClCH}_2\text{CH}_3 + \text{OH}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{CHOHCH}_2\text{CH}_3 + \text{Cl}^-$  foi estudada teoricamente através do método da DFT com o funcional B3LYP e com a função de base 6-31+G (d,p), na temperatura de 25 °C. As estruturas dos reagentes, produtos e estado de transição foram todas otimizadas. Para encontrar o estado de transição, utilizamos o método QST3 onde as coordenadas dos reagentes, estado de transição e produtos são necessárias como entrada. Dessa forma, o estado de transição foi caracterizado através da frequência imaginária encontrada.

Através da estrutura do estado de transição, foi possível executar um cálculo de Coordenação Intrínseca de Reação (IRC). Esse cálculo conecta a estrutura TS aos produtos e aos reagentes. As estruturas tridimensionais otimizadas envolvidas na reação estão apresentadas na Figura 8.



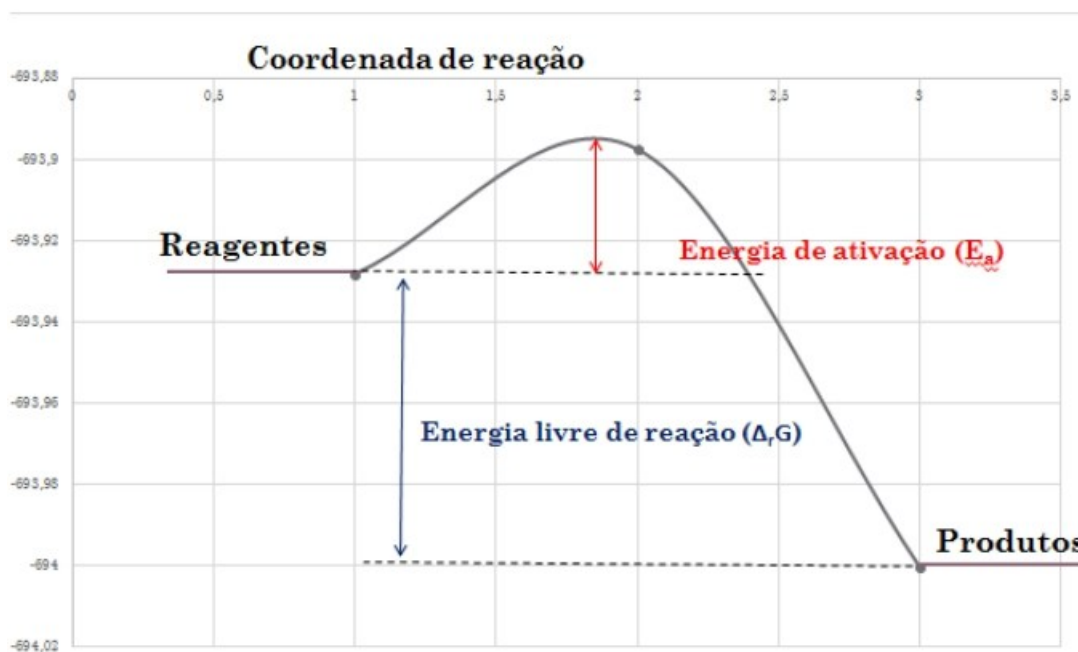
**Figura 8** Estrutura tridimensional dos (A) reagentes; (B) Estado de Transição (C) Produtos. Fonte: próprio autor.

A estereoquímica no átomo de carbono é invertida quando a ligação C-OH é formada e o íon cloreto deixa a molécula com o par de elétrons da ligação C-Cl. No reagente temos a isomeria do tipo S, S-2-clorobutano já o produto formado apresenta a isomeria R, R-2-butanol. Os dados referentes às energias livres de Gibbs das estruturas estão presentes na Tabela 2.

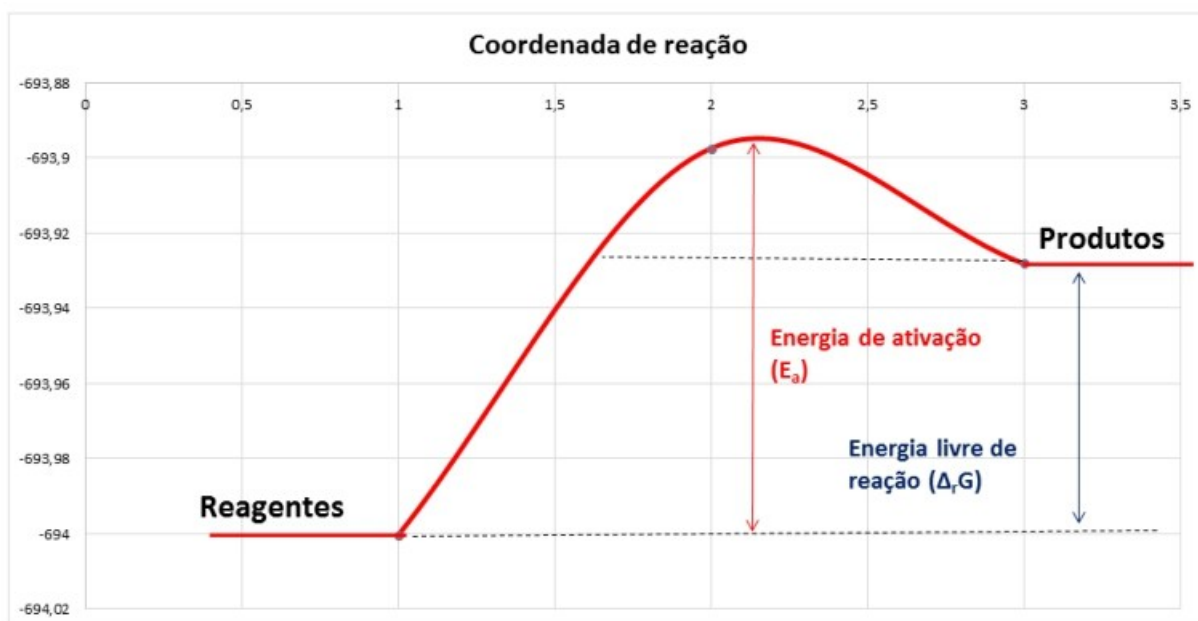
**Tabela 2** Energia livre de Gibbs das estruturas otimizadas. Fonte: Próprio autor

	$\Delta G$ (kcal/mol)
<b>Reagentes</b>	-435442,0122
<b>Produtos</b>	-435422,7535
<b>Estado de Transição</b>	-435487,2972
<b>Energia Livre de Reação (<math>\Delta_r G^\circ</math>)</b>	-45,285009
<b>Energia de Ativação (<math>E_a</math>)</b>	19,25869457

A figura 9 apresenta a curva de IRC obtida para a reação. Nela pode-se observar o  $\Delta_r G$  é -45,28 kcal/mol, ou seja, a reação é espontânea. Consequentemente, observa-se que o íon hidroxila é um bom nucleófilo.



**Figura 9** Gráfico de coordenada de reação com a energia livre de Gibbs negativa. Fonte: próprio autor.

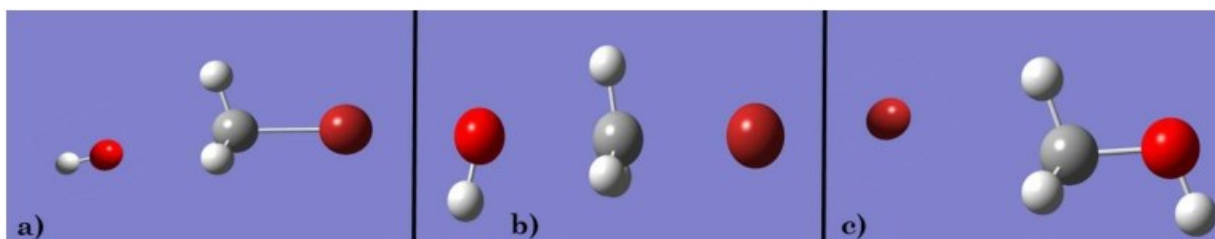


**Figura 10** Gráfico de coordenada de reação com a energia livre de Gibbs positiva.  
Fonte: próprio autor.

Se a reação se processa da maneira inversa  $\text{CH}_3\text{CHOHCH}_2\text{CH}_3 + \text{Cl}-\text{CH}_3\text{CHClCH}_2\text{CH}_3 + \text{OH}^-$ , observa-se na figura 10 que a curva de IRC apresenta um comportamento diferente da curva discutida anteriormente (Figura 9), uma vez que o  $\Delta_r G$  é  $+45,28 \text{ kcal/mol}$ , isto é, a reação não é espontânea. Assim, o íon cloreto não é um bom nucleófilo.

### 5.1.3 O grupo abandonador

Vários são os fatores que influenciam uma reação de substituição nucleofílica, um deles é a natureza do grupo abandonador. Dessa forma, a presente prática avaliou as energias livres de Gibbs de reação, bem como, as energias de ativação de cada reação. Os grupos abandonares (X) escolhidos para a reação estudada foram o Flúor, Cloro e o Bromo. A estrutura genérica da reação é apresentada na Figura 11. O estudo foi feito utilizando o método da DFT com o funcional B3LYP e com a função de base 6-31+G (d,p), o solvente e a temperatura reacional de  $25 \text{ }^\circ\text{C}$ .



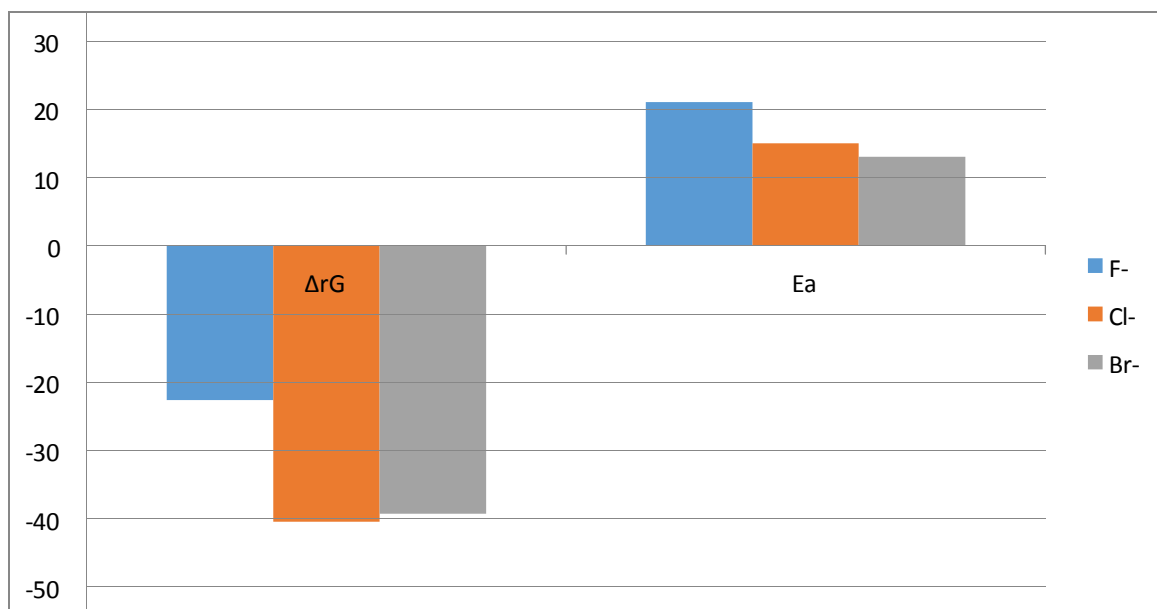
**Figura 11** Estrutura tridimensional dos (a) Reagentes; (b) Estado de Transição (c) Produtos. Fonte: próprio autor.

Para cada grupo abandonador foram realizados os cálculos de otimização de geometria, frequência e estado de transição. A busca pela estrutura de transição foi realizada através da metodologia QST2 onde as coordenadas para os reagentes e produtos são necessárias como entrada, e assim o estado de transição foi caracterizado. As informações das energias livres de Gibbs de reação e energia de ativação das reações encontram-se na Tabela 3.

**Tabela 3** Informações termodinâmicas da reação. Fonte: próprio autor.

Grupo de saída	$\Delta_r G$ (kcal/mol)	$E_a$ (kcal/mol)
F-	-22,61520812	21,05586316
Cl-	-40,49088608	15,00736175
Br-	-39,28733533	13,04202235

Através dos dados expostos na Tabela 3, observa-se que os melhores grupos de saída são aqueles que melhor estabilizam a carga negativa, quanto maior for a extensão de estabilização da carga, menor a energia do estado de transição e conseqüentemente a reação se processará mais rápido. No caso estudado, observa-se a presente ordem de espontaneidade da reação: Cl- < Br- < F-. Já a energia de ativação apresenta uma ordem diferente: Br- < Cl- < F-. Os dados da tabela 3 encontra-se na figura 12 em forma gráfica.

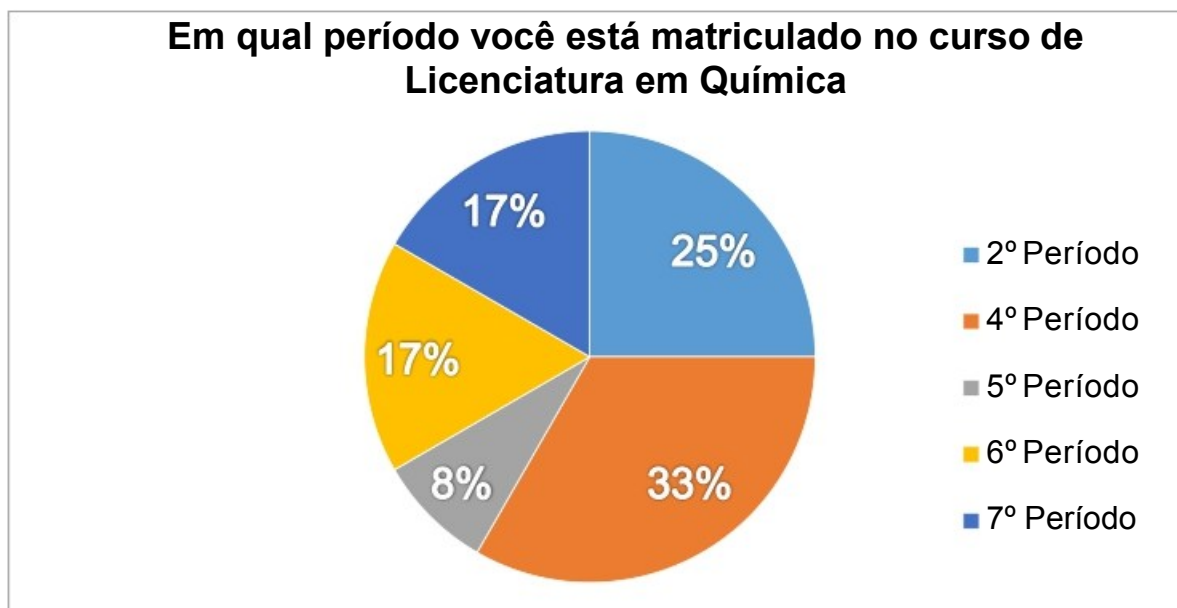


**Figura 12** Gráfico de energia livre de Gibbs e energia de ativação de cada grupo abandonador.  
Fonte: próprio autor.

## 5.2 Aplicação didática

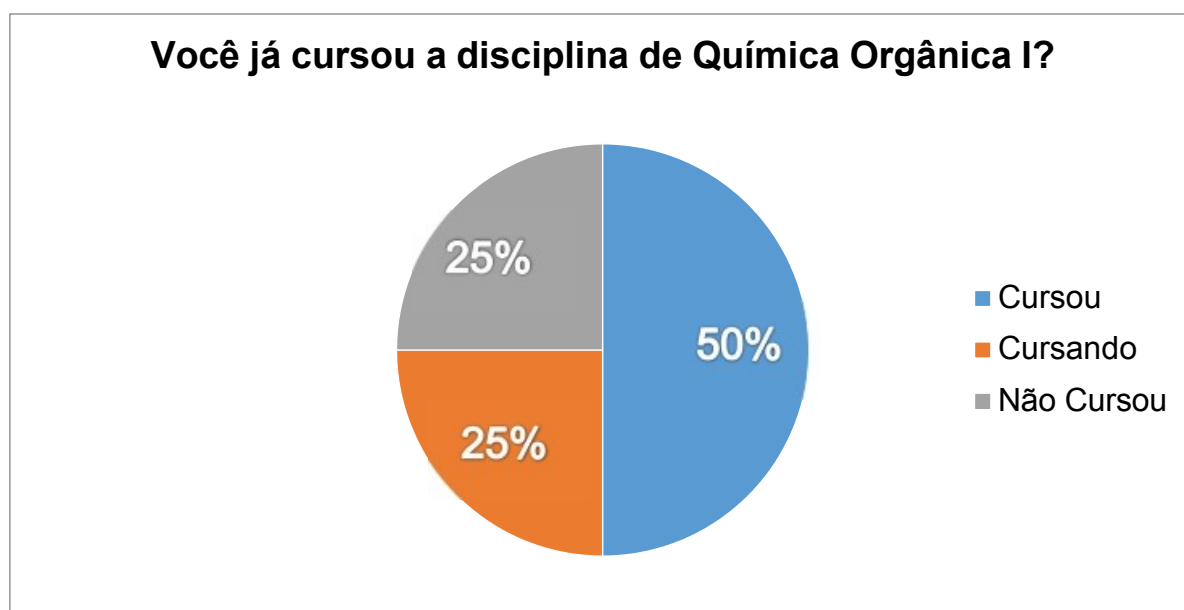
A oficina foi realizada com o objetivo de divulgar os conceitos e métodos da Química Computacional, bem como, investigar a potencialidade dela como recurso didático facilitador do processo de ensino-aprendizagem da disciplina de Química Orgânica I.

O questionário (APÊNDICE II) aplicado abrangia questões que objetivavam analisar o perfil dos discentes, as dificuldades encontradas na disciplina de Química Orgânica I, a utilização de recursos computacionais, assim como, o potencial da Química Computacional como ferramenta didática. A primeira questão questionava: "Em qual período você está matriculado no curso de licenciatura em Química?" As respostas foram agrupadas na Figura 8.



**Figura 13** Respostas dos alunos da primeira questão do questionário. Fonte: próprio autor.

Mediante os dados expostos na Figura 8, observa-se que 33% estão matriculados no 4º período do curso de licenciatura em Química, em seguida de 25% no 2º período, 25% período já os 17% restantes estão no último semestre da graduação. A segunda questão perguntava: “Você já cursou a disciplina de Química Orgânica I?” Mediante os resultados obtidos neste questionamento apenas 25% ainda não cursaram a disciplina, os dados são expostos na Figura 2.



**Figura 14** Respostas dos alunos da segunda questão do questionário. Fonte: próprio autor.

A terceira questão no questionário era: "Você sentiu alguma dificuldade na disciplina? Caso afirmativo, justifique sua resposta." Em decorrência das respostas obtidas, apenas 25% afirmaram não sentir dificuldades na disciplina, enquanto os 75% restante apresentaram algumas dificuldades ao longo da disciplina. Na maioria dos discursos a visualização em três dimensões foi o ponto de maior dificuldade. Para isso a seguir descrevemos alguns relatos dados por eles.

**Aluno [1]:** *"Sim, Senti muita dificuldade na visualização das moléculas (R e S)".*

**Aluno [2]:** *"Sim, pois foi o primeiro contato com os conceitos de química orgânica, onde muitos não eram diretamente relacionados as disciplinas estudadas anteriormente".*

**Aluno [3]:** *"Um pouco, senti uma certa dificuldade com a visualização de moléculas e com mecanismo de reação".*

Na Química bem como em outras áreas das ciências da natureza, existe uma grande dificuldade na compreensão dos fenômenos naturais que ocorrem a todo o momento, visto que é muito difícil e abstrato imaginar a constituição da matéria. 40 Conforme Ribeiro e Greca<sup>3</sup>:

"A grande dificuldade em oportunizar aos alunos o desenvolvimento da compreensão conceitual em Química reside no fato de que, apesar de encontrarmos, às vezes, estudos de fenômenos macroscópicos, a maior parte do universo dos fenômenos estudados nesta ciência aborda fenômenos que ocorrem a nível microscópico, o que dificulta bastante a aquisição da compreensão dos conceitos, uma vez que, neste nível, faltaria aos alunos o contato com informações sensoriais (p. 542)".

A quarta questão do QF indagava aos estudantes: "Em algum momento o professor da disciplina utilizou recursos computacionais em suas aulas? Se sim quais? (exceto slides)". Com base nos resultados, apenas um aluno afirmou que o professor utilizou de um aplicativo para visualização de estruturas de Químicas. Como mostra seu relato a seguir.

**Aluno [4]:** *"Sim, não me recordo o nome do aplicativo, mas serviu para a manipulação e visualização de moléculas".*

Conforme os estudos de Arroio e Honório 41:

“Imagens e o computador fornecem métodos e técnicas que ajudam os estudantes a ver o invisível e, nesse sentido, também é possível tornar visível dados e informações que estão muito distantes dos nossos sentidos. Os métodos computacionais não são apenas uma ferramenta para criar bonitas imagens a fim de se ter uma aula confortável”. (p. 22):

O uso dessas ferramentas auxilia o processo ensino-aprendizagem, tendo em vista, a fuga da rotina do quadro e giz. Segundo Prieto et al. 42o uso de slides, práticas, vídeos, entre outros artifícios, chamam atenção dos discentes pelo forte apelo visual que estes promovem. Dentre as finalidades o uso dos recursos acima mencionados deve auxiliar o professor na preparação e apresentação de suas aulas, favorecendo assim, a organização para a exposição do conteúdo. 43

O quinto questionamento perguntava aos discentes: “Quanto aos conhecimentos específicos de Química, você acha que as ferramentas computacionais favoreceram o processo de compreensão do conteúdo? Justifique”. Dentre 12 alunos participantes, todos acreditam que utilizar o computador em sala de aula pode facilitar a compreensão do conteúdo devido à visualização das moléculas no espaço. Com base nas respostas obtidas, destacou-se algumas respostas dadas pelos alunos.

**Aluno [1]:** *“Sim. A utilização da ferramenta computacional é de extrema importância, visto que a visualização de estruturas tridimensionais são um pouco difíceis de imaginar. Uma boa aplicação das ferramentas computacionais [...] seria nas aulas de isomeria”.*

**Aluno [2]:** *“Sim, é uma forma de adequar o conhecimento e aproxima-se da tecnologia”.*

**Aluno [3]:** *“Sim, além de apresentar visualmente reações e conformações por meio dessas ferramentas, é possível comprovar os conceitos e justificar a teoria”.*

**Aluno [4]:** *“Sim, poder visualizar as etapas de formação de um composto no computador, facilitou a compreensão do conteúdo”.*



Utilizar os recursos computacionais torna-se mais fácil para o discente construir seu próprio modelo mental acerca da geometria de cada uma das moléculas que está de acordo com o modelo atualmente aceito pela comunidade científica 41,44 Conforme Ferreira (et. al.) 44:

“O aluno não precisa possuir grandes habilidades visualizativas para compreender a representação, o que não acontece numa representação 2D, em que a transposição posterior para uma representação 3D depende de suas capacidades de visualização (p. 1662)”.

Ferreira (et. al.) 44 ainda afirma que:

“Se o aluno não conseguir transpor corretamente a representação, ele construirá um modelo mental defasado do cientificamente aceito, que se constituirá em obstáculo à sua aprendizagem. No caso particular de uma reação química, a compreensão da estereoquímica da reação e, conseqüentemente, do mecanismo, depende fortemente da percepção do arranjo espacial dos átomos de cada molécula e de suas interações(p. 1663)”.

O questionário foi finalizado indagando os discentes: “O que você acha da inclusão de experimentos computacionais na disciplina de Química Orgânica I? Justifique sua resposta.” Em decorrência dos resultados obtidos, 100% dos discentes afirmaram que incluir experimentos computacionais facilitaria o processo de compreensão e contextualização dos conteúdos, como também, observar como ocorrem vários fenômenos microscopicamente através do computador. A seguir foram elencadas algumas respostas fornecidas pelos participantes nessa questão:

**Aluno [1]:** *“Acredito que seja essencial para que torne a compreensão dos conceitos mais significativos”.*

**Aluno [2]:** *“Uma ótima iniciativa, pois alguns resultados podem ser obtidos antes das experiências”.*

**Aluno [3]:** *“Importante. [...] Mas não só com aplicação visual a inclusão de ferramentas computacionais também pode ajudar a compreender as energias envolvidas nas estruturas moleculares”.*

**Aluno [4]:** *“Acho ótimo. Ajudaria muito na compreensão dos mecanismos e visualização, o que as vezes faz no quadro (no plano) temos dificuldade de identificar. Principalmente porque sou aluna na disciplina atualmente e essa oficina me ajudou bastante.*”

Segundo Ramos e Serrano<sup>46</sup> “o uso de representações computacionais propicia internalização de conceitos e, com isso, a evolução conceitual dos estudantes”. A Química Computacional caracteriza-se numa poderosa ferramenta didática para melhorar o “*pensamento crítico e analítico dos estudantes*”.

## 6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O desenvolvimento da presente pesquisa possibilitou compreender os métodos de Química Computacional e sua aplicação em diversas áreas da Ciência. Além disso, permitiu investigar o potencial da Química Computacional como recurso didático facilitador do processo de ensino-aprendizagem da disciplina de Química Orgânica I.

Através dos relatos dos participantes da oficina, constatou-se que grande parte deles apresentou dificuldades no curso de Química Orgânica I. Essas dificuldades, em sua maioria, estavam relacionadas à visualização dos fenômenos químicos em escala microscópica. Na maioria dos casos, segundo os discentes, não foram usados recursos computacionais durante a disciplina.

As ferramentas computacionais aplicadas na oficina proveram aos alunos acesso a imagens adequadas que facilitaram a construção de modelos mentais corretos, assim ocorrendo uma aprendizagem mais significativa. Os recursos utilizados mostraram um potencial para aumentar não apenas o conhecimento químico dos discentes, mas também melhorar suas capacidades de visualização. Assim, através desta experiência notou-se um grande potencial da Química Computacional enquanto recurso didático.

O uso de práticas computacionais, nas quais os alunos participem ativamente da construção dos modelos moleculares, realização dos cálculos e análise dos resultados tem um potencial facilitador ainda mais amplo para o processo de ensino-aprendizagem. Nesse caso, os discentes teriam um contato direto com as ferramentas computacionais, melhorando a visualização dos fenômenos químicos e aprendendo a utilizar novos recursos, que poderão ser usados em outras disciplinas ou em outros momentos de sua vida acadêmica.

## 7. PERSPECTIVAS

Diante da escassez de trabalhos nesta linha de estudo, esperamos estender o trabalho realizado aqui em diversas vertentes, das quais citamos:

- Realizar um curso de formação complementar de Química Computacional para discentes e docentes do curso de licenciatura em Química do IFPB campus João Pessoa;
- Utilizar a metodologia da Unidade De Ensino Potencialmente Significativa (UEPS) junto com a Química Computacional na disciplina de Química Orgânica I.
- Elaborar um banco de dados com recursos didáticos para as disciplina de Química Orgânica.

## 8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MARIANO, Arquimedes et al. O ensino de reações orgânicas usando química computacional: I. reações de adição eletrofílica a alquenos. **Química Nova**, [s.l.], v. 31, n. 5, p.1243-1249, nov. 2008. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422008000500055>.
- [2] MACHADO, Adriano Silveira; ESCOLA, Química Nova na. Uso de Softwares Educacionais, Objetos de Aprendizagem e Simulações no Ensino de Química. **Química Nova na Escola**, São Paulo, v. 38, n. 2, p.104-111, 2016.
- [3] RIBEIRO, Angela A.; GRECA, Ileana M.. Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada. **Química Nova**, [s.l.], v. 26, n. 4, p.542-549, 2003.
- [4] SERRA, Glades Miquelina Debei. **Contribuições das TIC no ensino e aprendizagem de ciências: tendências e desafios**. 2009. 383 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós Graduação em Educação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.
- [5] GABINI, Wanderlei Sebastião; DINIZ, Renato Eugênio da Silva. Os professores de química e o uso do computador em sala de aula: discussão de um processo de formação continuada. **Ciência & Educação (bauru)**, [s.l.], v. 15, n. 2, p.343-358, 2009.
- [6] DENARI, Gabriela B.; SACIOTO, Thalita R.; CAVALHEIRO, Éder T. G.. Avaliação do uso de planilhas computacionais como uma ferramenta didática em Química Analítica Qualitativa. **Química Nova**, [s.l.], p.371-375, 2016.
- [7] MERÇON, Fábio et al. ANÁLISE, DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÃO DE RECURSOS DE INFORMÁTICA NO ENSINO DE QUÍMICA. In: Encontro Nacional De Pesquisa Em Educação Em Ciências, 2005, Bauru. **Anais do V Encontro Nacional De Pesquisa Em Educação Em Ciências**. Bauru: ABRAPEC, 2006. p. 1 - 12.
- [8] FIALHO, Neusa Nogueira; MATOS, Elizete Lucia Moreira. A arte de envolver o aluno na aprendizagem de ciências utilizando softwares educacionais. **Educar em Revista**, [s.l.], n. 2, p.121-136, 2010.

- [9] Eichler, Marcelo e Del Pino, José Claudio. Computadores em Educação Química: Estrutura Atômica e Tabela Periódica , *Química Nova*, v. 23, n. 6. p. 835-840, 2000.
- [10] HASE, W. L. Computational Chemistry. **Computing in Science & Engineering**, p. 12–13, 2003.
- [11] FONSECA, Tânia Aparecida de Oliveira. **Análise conformacional e estudo de interações intramoleculares em derivados do flavonol**. 2012. 80 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós- Graduação em Agroquímica, Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2012. Disponível em: <[http://repositorio.ufla.br/bitstream/1/812/1/DISSERTAÇÃO\\_Análise\\_e\\_conformacional\\_e\\_estudo\\_de\\_interações\\_intramoleculares\\_em\\_derivados\\_do\\_flavonol.pdf](http://repositorio.ufla.br/bitstream/1/812/1/DISSERTAÇÃO_Análise_e_conformacional_e_estudo_de_interações_intramoleculares_em_derivados_do_flavonol.pdf)>. Acesso em: 24 dez. 2016.
- [12] DEY, A.; JIANG, Y.; ORTIZ DE MONTELLANO, P.; et al. S K-edge XAS and DFT calculations on cytochrome P450: covalent and ionic contributions to the cysteine-Fe bond and their contribution to reactivity. **Journal of the American Chemical Society**, v. 131, n. 22, p. 7869–78, 2009. Disponível em: <<http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=2734335&tool=pmcentrez&rendertype=abstract>>.
- [13] HOLLAND, G. P.; MOU, Q.; YARGER, J. L. Determining hydrogen-bond interactions in spider silk with <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C HETCOR fast MAS solid-state NMR and DFT proton chemical shift calculations. **Chemical communications (Cambridge, England)**, v. 49, n. 59, p. 6680–2, 2013. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23774714>>. Acesso em: 24/12/2016.
- [14] MOHAMMADI, N.; GANESAN, A.; CHANTLER, C. T.; WANG, F. Differentiation of ferrocene D5d and D5h conformers using IV spectroscopy. **Journal of Organometallic Chemistry**, v. 713, p. 51–59, 2012. Elsevier B.V. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022328X12002082>>. Acesso em: 24/12/2016.
- [15] DROZD, G. T.; MELNICHUK, A.; DONAHUE, N. M. The HOOH UV spectrum: importance of the transition dipole moment and torsional motion from semiclassical calculations on an ab initio potential energy surface. **The Journal of**

- chemical physics**, v. 132, n. 8, p. 084304, 2010. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20192299>>. Acesso em: 24/12/2016.
- [16] BARREIRO, EJ; RODRIGUES C.R., ALBUQUERQUE M.G., SANT'ANNA C.M.R. e ALENCASTRO, R.B. Modelagem molecular: Uma ferramenta para o planejamento racional de fármacos em química medicinal. **Química Nova**, v. 20 n. 3, p.300-310, 1997.
- [17] MINO, L.; SPOTO, G.; BORDIGA, S.; ZECCHINA, A. Particles Morphology and Surface Properties As Investigated by HRTEM , FTIR , and Periodic DFT Calculations : From Pyrogenic TiO 2 ( P25 ) to Nanoanatase. , v. 2, 2012.
- [18] ATKINS, P.; PAULA, J. DE. **Elements of Physical Chemistry**. Fifth Edit ed. W. H. Freeman and Company, 2009.
- [19] ORTOLAN, Alexandre Osmar. **Apostila De Práticas De Química Computacional**. 2014. 88 f. TCC (Graduação) - Curso de Licenciatura em Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pato Branco, 2014.
- [20] ALMEIDA, Wagner B. de; SANTOS, Hélio F. dos. Modelos Teóricos para a compreensão da estrutura da Matéria. **Química Nova na Escola**, Sp, v. 4, n. 1, p.1-8, maio 2001. Semestral.
- [21] RAUPP, Daniele; SERRANO, Agostinho; MARTINS, Ales Leandro Costa. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química. **Revista Liberato**, Novo Hamburgo, v. 12, n. 9, p.13-22, 2008.
- [22] COELHO, Lilian Weitzel et al. Aplicação de mecânica molecular em química inorgânica. **Química Nova**, [s.l.], v. 22, n. 3, p.396-404, jun. 1999.
- [23] TRSIC, Milan; PINTO, Melissa F. Siqueira. **Química Quântica: Fundamentos e aplicações**. Barueri: Manole, 2009.
- [24] RODRIGUES, Carlos Rangel. Processos modernos de desenvolvimento de fármacos: Modelagem Molecular. **Química Nova na Escola**, São Paulo, v. 3, n. 1, p.43-49, 2001.
- [25] VERLI, Hugo. **Bioinformática: da Biologia à Flexibilidade Molecular**. São Paulo: Sbbq, 2014.
- [26] Ponder, J. W. Tinker – Software Tools for Molecular Design, 2004.
- [27] Van Der Spoel, D.; Lindahl, E.; Hess, B.; Groenhof, G.; Mark, A. E.; Berendsen, H. J. **J. Comput. Chem.** 2005, 26, 1701.

- [28] SANT'ANNA, Carlos M. R.. Métodos de modelagem molecular para estudo e planejamento de compostos bioativos: Uma introdução. **Revista Virtual de Química**, Rio de Janeiro, v. 1, n. 1, p.49-57, 2009.
- [29] LEAL, Régis Casimiro et al. A Química Quântica na compreensão de teorias de Química Orgânica. **Química Nova**, [s.l.], v. 33, n. 5, p.1211-1215, 2010. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0100-40422010000500037](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422010000500037)>. Acesso em: 30 dez. 2016.
- [30] ATKINS, P.; PAULA, J. DE. **Elements of Physical Chemistry**. Fifth Edit ed. W. H. Freeman and Company, 2009.
- [31] LEVINE, Ira N. **Físico Química**. 6. ed. São Paulo: Ltc, 2012. 450 p
- [32] Jensen, F., Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, New York, 2002.
- [33] PEREIRA, Arquimedes Mariano. **ESTUDO AB-INITIO E DFT DAS NITROSAMINAS**. 2008. 118 f. Dissertação (Mestrado) , Departamento de Química, Ufpb, João Pessoa, 2008.
- [34] MORGON, Nelson H.; CUSTÓDIO, Rogério. Teoria do Funcional da Densidade. **Química Nova**, São Paulo, v. 18, n. 1, p.44-55, jan. 1995.
- [35] ANJOS, Italo Curvelo dos. **AVALIAÇÃO ELETRÔNICA DE COMPOSTOS MESOIÔNICOS TOPOLÓGICA DA ESTRUTURA**. 2016. 132 f. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Departamento de Química, Ufpb, João Pessoa, 2016.
- [36] TOLDO, Josene Maria. **Estudo Teórico da reação de ciclo adição [3+2] 1,3-Dipolar para formação do anel isoxazolina utilizando teoria do funcional da densidade e modelos implícitos de solvente**. 2016. 175 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Química, Departamento de Química, Ufrgs, João Pessoa, 2013.
- [37] RAMOS, Bruno. **APLICAÇÕES DE MODELAGEM MOLECULAR EM ENGENHARIA QUÍMICA: INVESTIGAÇÃO DO MECANISMO DE DEGRADAÇÃO DO FENOL EM PROCESSOS OXIDATIVOS AVANÇADOS**. 2009. 170 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Escola Politécnica da Usp, Usp, São Paulo, 2009.
- [38] PLIEGO JUNIOR, Josefredo R.. Modelos contínuos do solvente: fundamentos. **Química Nova**, [s.l.], v. 29, n. 3, p.535-542, jun. 2006. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422006000300023>.



- [39] Carey F. e Sundberg R., *Advanced Organic Chemistry – Structure and Mechanism-Part A*, 4<sup>a</sup> ed., Plenum Press, New York, 2000.
- [40] ROQUE, Nídia Franca; SILVA, José Luis P. B.. A linguagem química e o ensino da química orgânica. **Química Nova**, [s.l.], v. 31, n. 4, p.921-923, 2008. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422008000400034>.
- [41] ARROIO, A; HONORIO, K.M. – Images and Computacional Methods in Molecular Modeling Education – **Problemas of Education in the 21<sup>a</sup> Century**. V.9, pg 17-23, 2008.
- [42] PRIETO, L. M.. Uso das Tecnologias Digitais em Atividades Didáticas nas Séries Iniciais. **Renote: revista novas tecnologias na educação**, Porto Alegre, v. 3, n. 1, p.1-11, maio 2005.
- [43] AGCA, R. K.. **The effects of navigation structures based upon learning styles on the success of the student in hypermedia environments**, unpublished master's thesis, Gazi University Institute of Education Sciences: Ankara, 2006.
- [44] FERREIRA, Celeste; ARROIO, Agnaldo; REZENDE, Daisy de Brito. Uso de modelagem molecular no estudo dos conceitos de nucleofilicidade e basicidade. **Química Nova**, [s.l.], v. 34, n. 9, p.1661-1665, set. 2011. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422011000900030>.
- [45] Adriana de Farias Ramos; SERRANO, Agostinho. UMA PROPOSTA PARA O ENSINO DE ESTEREOQUÍMICA CIS/TRANS A PARTIR DE UMA UNIDADE DE ENSINO POTENCIALMENTE SIGNIFICATIVA (UEPS) E DO USO DE MODELAGEM MOLECULAR. **Experiências em Ensino de Ciências**, São Paulo, v. 10, n. 3, p.94-106, maio 2015.

## 9. APÊNCIDE

## **9.1 APÊNDICE I: Roteiros das Práticas Computacionais**

### 9.1.1 PRÁTICA I – ANÁLISE CONFORMACIONAL DO ETANO

#### OBJETIVOS

- Realizar um cálculo para encontrar a conformação de menor energia do etano.

#### PARÂMETROS DE CÁLCULOS

SISTEMA	Molécula do Etano (CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub> )
Método de Cálculo	DFT
Função de Base	6-31g
Comandos	opt=modredundant  D X Y Z W S 36 10.000000 (na linha final do input)

#### PROCEDIMENTOS

- Construa a molécula do Etano no programa GaussView
- Especifique no ficheiro para fazer o cálculo da energia com o método de cálculo e com os comandos indicados no item anterior onde:
  - X: hidrogênio ligado ao carbono 1,
  - Y: carbono 1,
  - Z: carbono 2,
  - W: hidrogênio ligado ao carbono 2;
- Salve o arquivo;
- Execute o arquivo com o programa Gaussian;
- Salve os resultados.

## INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

- Faça uma tabela com os valores correspondente a cada ângulo ( $-180^\circ$ ,  $-120^\circ$ ,  $-60^\circ$ ,  $0^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$ ) de diedro;
- Salve uma imagem de cada conformação;
- Plote um gráfico através da tabela anterior;
- Calcule a barreira rotacional;
- Compare os valores encontrados com dados experimentais.

## 9.1.2 PRÁTICA II – ANÁLISE CONFORMACIONAL DO 1,2-DICLOROETANO

### OBJETIVOS

- Realizar um cálculo para encontrar a conformação de menor energia do 1,2-Dicloroetano.

### PARÂMETROS DE CÁLCULOS

SISTEMA	Molécula do 1,2-Dicloro-etano(CH <sub>3</sub> ClCH <sub>3</sub> Cl)
Método de Cálculo	DFT
Função de Base	6-31g(d)
Comandos	opt=modredundant  D X Y Z W S 36 10.000000 (na linha final do input)

### PROCEDIMENTOS

- Construa a molécula do 1,2-Dicloro-etano no programa GaussView
- Especifique no ficheiro para fazer o cálculo da energia com o método de cálculo e com os comandos indicados no item anterior onde:
  - X: cloro ligado ao carbono 1,
  - Y: carbono 1,
  - Z: carbono 2,
  - W: cloro ligado ao carbono 2;
- Salve o arquivo;
- Execute o arquivo com o programa Gaussian;
- Salve os resultados.

## INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

- Faça uma tabela com os valores correspondente a cada ângulo ( $-180^\circ$ ,  $-120^\circ$ ,  $-60^\circ$ ,  $0^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$ ~) de diedro;
- Salve uma imagem de cada conformação;
- Plote um gráfico através da tabela anterior;
- Calcule a barreira rotacional.

### 9.1.3 PRÁTICA III – MODELAGEM DE REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO NUCLEOFILICA COM INVERSÃO DE ESTEREOQUIMICA.

#### OBJETIVOS

- Modelar uma reação de substituição nucleofílica bimolecular;
- Observar a inversão de estereoquímica;
- Analisar a Energia Livre de Gibbs e a Energia de Ativação da reação.

#### PARÂMETROS DE CÁLCULOS

SISTEMA	Moléculas: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 2-Cloro-Butano + OH<sup>-</sup></li> <li>• (S)-Butan-2-ol + Cl<sup>-</sup></li> <li>• Estrutura de Transição</li> </ul>
Método de Cálculo	DFT
Função de Base	6-31g+(d,p)
Comandos	<ul style="list-style-type: none"> <li>• opt freq</li> <li>• SCRF=(solvente=dms0)</li> </ul>

#### PROCEDIMENTOS

- Construa as estruturas descritas na tabela no programa GaussView;
- No ficheiro inclua os comandos descritos na tabela;
- Realize um cálculo de otimização de geometria e frequência no Gaussian;
- Com as estruturas otimizadas, realize um cálculo de busca de estado de transição através da metodologia QST3;
- Caracterize o estado de transição encontrada através de um cálculo TS;
- Através da estrutura de transição realize um cálculo de Coordenada intrínseca de Reação (IRC);



- Salve os resultados.

## INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

- Faça uma tabela com os valores de energia livre de Gibbs padrão: reagentes, estado de transição e produto;
- Encontre os valores da variação de energia livre de Gibbs de reação e de Energia de Ativação;
- Plote um gráfico das energias encontradas;

### 9.1.4 PRÁTICA IV –GRUPO ABANDONADOR

#### OBJETIVOS

- Modelar uma reação de substituição nucleofílica bimolecular;
- Analisar a Energia Livre de Gibbs e a Energia de Ativação da reação;
- Comparar os valores para os diferentes grupos abandonadores.

#### PARÂMETROS DE CÁLCULOS

SISTEMA	Moléculas: <ul style="list-style-type: none"> <li>• CH<sub>3</sub>X (x= F, Cl, Br)</li> <li>• OH-, F-, Cl-, Br-</li> <li>• Estrutura de Transição</li> <li>• CH<sub>3</sub>OH</li> </ul>
Método de Cálculo	DFT
Função de Base	6-31g+(d,p)
Comandos	<ul style="list-style-type: none"> <li>• SCRF=(solvente=dms0)</li> <li>• opt freq</li> </ul>

#### PROCEDIMENTOS

- Construa as estruturas descritas na tabela no programa GaussView;
- No ficheiro inclua os comandos descritos na tabela;
- Realize um cálculo de otimização de geometria e frequência no Gaussian;
- Com as estruturas otimizadas, realize um cálculo de busca de estado de transição através da metodologia QST3;
- Caracterize o estado de transição encontrada através de um cálculo TS;
- Salve os resultados.

## INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

- Faça uma tabela com os valores de energia livre de Gibbs: reagentes, estado de transição e produto ;
- Encontre os valores da variação de energia livre de Gibbs de reação e de Energia de Ativação ;
- Plote um gráfico das energias encontradas;
- Compare os resultados de cada grupo abandonador e comente acerca da velocidade e espontaneidade da reação.

## **9.2 APENDICÊ II: Questionário**

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
COORDENAÇÃO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

MINISTRANTES: EMERSON MOREIRA E ITALO CURVELO

**OFICINA: QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA A QUÍMICA ORGÂNICA**

1) Em qual período você está matriculado no Curso de Licenciatura em Química?

---

2) Você já cursou ou está cursando a disciplina de Química Orgânica I?

---

3) Você sentiu alguma dificuldade na disciplina? Caso afirmativo, justifique sua resposta.

---

---

---

---

4) Em algum momento o professor da disciplina utilizou recursos computacionais em suas aulas? Se sim, quais? (Exceto slides)

---

---

5) Quanto aos conhecimentos específicos de Química, você acha que as ferramentas computacionais favoreceram o processo de compreensão do conteúdo? Justifique.

---

---

6) O que você acha da inclusão de experimentos computacionais na disciplina de Química Orgânica I? Justifique sua resposta.

---

---

---