

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA APLICADA

JANUÁRIO KORDIAK

APLICAÇÃO DE PROGRAMAS COMPUTACIONAIS DO MÉTODO DE HÜCKEL
SIMPLES PARA O ENSINO DAS LIGAÇÕES QUÍMICAS

PONTA GROSSA

2017

JANUÁRIO KORDIAK

APLICAÇÃO DE PROGRAMAS COMPUTACIONAIS DO MÉTODO DE HÜCKEL PARA
ANÁLISE DAS LIGAÇÕES QUÍMICAS.

Dissertação apresentada para obtenção do título
de Mestre em Química Aplicada no Programa de
Pós-Graduação em Química Aplicada da
Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Ricardo de Lázaro

PONTA GROSSA

2017

Ficha Catalográfica
Elaborada pelo Setor de Tratamento da Informação BICEN/UEPG

K84 Kordiak, Januário
 Aplicação de programas computacionais
 do método de Hückel para análise das
 ligações químicas./ Januário Kordiak.
 Ponta Grossa, 2017.
 62f.

 Dissertação (Mestrado em Química
 Aplicada - Área de Concentração: Química),
 Universidade Estadual de Ponta Grossa.
 Orientador: Prof. Dr. Sérgio Ricardo de
 Lázaro.

 1.Ligação química. 2.Química
 computacional. 3.Matrizes de Hückel.
 I.Lázaro, Sérgio Ricardo de. II.
 Universidade Estadual de Ponta Grossa.
 Mestrado em Química Aplicada. III. T.

CDD: 541.224

TERMO DE APROVAÇÃO

JANUÁRIO KORDIAK

“APLICAÇÃO DE PROGRAMAS COMPUTACIONAIS DO MÉTODO DE HÜCKEL SIMPLES PARA ENSINO DAS LIGAÇÕES QUÍMICAS”

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Química Aplicada da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.

Orientador:



Prof Dr Sérgio Ricardo de Lázaro
UEPG/PR



Prof Dr Alexandre Camilo Júnior
UEPG/PR



Profa Dra Leila Inês Follmann Freire
UEPG/PR

Ponta Grossa, 25 de agosto de 2017

Dedico

Aos meus Pais Amélia e José Kordiak,

Aos meus familiares e Amigos,

A minha namora e sempre companheira, Cinthia E. Domingues.

Ao meu sobrinho Maicon Vinicius (in memoriam).

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, a Nossa Senhora Aparecida e a Gloriosa Irmã Ambrosia, pela força nas dificuldades, pelo amparo na angústia e pelas alegrias da vida.

À minha família por todo o apoio em toda essa jornada, dentre os quais meus pais Amélia e José Kordiak e aos pais de minha namorada, Leocádia e Edson Domingues, pelo acolhimento e apoio.

À minha namorada Cinthia pelo apoio, incentivo e companheirismo em todas as etapas deste trabalho.

Ao meu orientador Prof. Dr. Sérgio Ricardo de Lázaro, pessoa de inspiração e exemplo de companheirismo, por toda confiança, amizade, incentivo e oportunidade para realizar este mestrado.

Aos meus companheiros de laboratório, Renan Augusto Pontes Ribeiro, Luís Henrique da Silveira Lacerda, Ageo Meier de Andrade, Leonardo Konopaski Andreani (Pokoio), Thiago de Castro Rozada, pelo companheirismo durante todo esse tempo e pelas discussões sempre enriquecedoras.

Aos Colégios Estaduais Barão de Capanema e Padre Cristóforo Myskiv, ambos na cidade de Prudentópolis, Paraná, por possibilitarem a aplicação do projeto.

À CAPES pelo financiamento de bolsa de estudos.

À todos que direta ou indiretamente contribuíram para realização deste trabalho.

RESUMO

O ensino de ligações químicas é uma das fases mais importantes no processo de ensino-aprendizagem da Química. Todavia, existe uma grande necessidade de introduzir aos educandos do Ensino Médio a conexão entre a ligação química e a sua natureza quântica. Para alcançar esse objetivo utilizou-se o método de Hückel, um método simples desenvolvido em pesquisas em Química Teórica, antes do início da química computacional. Como metodologia avaliativa o método foi contraposto com as concepções prévias e posteriores dos educandos e, separadamente, com as concepções de educandos ensinados pelo método tradicional, ou seja, quadro, giz e livro. Foi observado que o uso de conceitos atuais, principalmente com o uso do computador, melhorou as argumentações por parte dos educandos ao definirem as ligações químicas, indicando que as aplicações da química quântica aliada a programas computacionais contribuem para resultados expressivos no processo de ensino-aprendizagem da Química.

Palavras-chave: Ligação química, química computacional, matrizes de Hückel

ABSTRACT

The nature of chemical bond is essential to understand chemistry concepts, mainly, at initial process in high school. From quantum mechanics concepts was possible describe the chemical bond basing in electronic density, which around the nucleus between two atoms. Hückel method was the first method presented to solve the Schrodinger Equation in approximate level and it reached good qualitative results for aromatic compounds indicating the feasibility of the computational chemistry. However, the Hückel method based on matrix is in accordance with molecular geometry proposed; then, the resolution of such method is possible for students in high level. From this idea, we presented the Hückel method as fundamental to understand the chemical bond for students in the first and second years of high school and we applied questions to evaluate the chemical bond knowledge before/after the Hückel method. We observed that there was increase and reinforce of the chemical bond concept for students.

Keywords: chemical bond, computational chemistry, Hückel

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Resultado do questionário 1 aplicado aos educandos do 1º ano do E. M. (a) Afirmaram ter conhecimento sobre a ligação química. (b) Afirmaram não ter conhecimento sobre a ligação química.	34
Figura 2. Resultado sobre as perguntas do questionário 2 aplicado aos educandos do 1º ano do E. M. (a) Afirmaram ter conhecimento sobre a ligação química. (b) Afirmaram não ter conhecimento sobre a ligação química.	37
Figura 3. Resultado sobre o percentual de 75% do questionário 2 aplicado aos educandos do 2º ano do E. M. (a) Afirmaram não ter conhecimento e não tentaram descrever a ligação química. (b) Afirmaram não ter conhecimento e tentaram descrever a ligação química.	37
Figura 4. Kit molecular utilizado na aplicação da proposta	41
Figura 5. Percentual de educandos, por turma, que utilizou de linguagem científica ao expressar suas respostas em relação a questão 04 da avaliação bimestral.	46
Figura 6. Tela inicial do software Huckel 3.1.....	53
Figura 7. Painel de seleção dos elementos a serem utilizados nos cálculos pelo software Huckel 3.1.....	54
Figura 8. Escolha das ligações entre os átomos da molécula a ser calculada	54
Figura 9. Comando para a construção da matriz	55
Figura 10. Comando direto para o início dos cálculos de níveis de energia e distribuição de cargas π	55
Figura 11. Comando para acesso dos resultados calculados. a) demonstração do Hamiltoniano diagonalizado, b) autovalores, c) diagrama de níveis de energia, d) auto vetores, e) diagrama dos orbitais moleculares.	56
Figura 12. Níveis de energia para o ciclopenta-1,3-dieno e para o penta-1,3-dieno	56
Figura 13: Distribuição das cargas π nos átomos.....	57
Figura 14: Apresentação da estrutura planar para o ciclopenta-1,3-dieno.....	57
Figura 15: Níveis de energia para o penta-1,3-dieno.....	58
Figura 16: Distribuição das cargas π nos átomos.....	58
Figura 17: Representação da estrutura planar para o penta-1,3-dieno.....	58
Figura 18: Tela inicial do software wxMaxima.....	59
Figura 19: Introdução de matriz no software wxMaxima.....	60
Figura 20: Comando para determinação do tamanho da matriz.....	60
Figura 21: Exemplo de matriz para o penta-1,3-dieno montada no software wxMaxima.....	61
Figura 22: Comando para o cálculo do determinante da matriz gerada.....	61
Figura 23: Comando para o cálculo das raízes do polinômio.....	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Questionários aplicados aos educandos dos 1º e 2º anos	28
Tabela 2. Questionário 03 (final) aplicado aos educandos do 1º ano	30
Tabela 3. Avaliação bimestral aplicada aos educandos do 1º ano	30
Tabela 4. Amostra das concepções apresentadas pelos educandos do 1º ano a respeito do questionário 1	35
Tabela 5. Respostas apresentadas pelos educandos do 2º ano para a pergunta 01: 1) Um dos conteúdos estudados no 1º ano do ensino médio são as ligações químicas. O que você lembra sobre ligações químicas (se possível cite exemplos, conceitos e quaisquer informações	38
Tabela 6. Concepções posteriores à apresentação da metodologia aplicada com o programa Hückel 3.1 apresentadas pelos educandos do 1º ano do E.M. realizada em avaliação bimestral	43
Tabela 7. Questionário final (questionário 3) aplicados aos educandos do 1º ano	45
Tabela 8. Concepções apresentadas pelos educandos do 1º ano na questão 04 da avaliação bimestral aplicada.....	46

SUMÁRIO

1 JUSTIFICATIVA	11
2 INTRODUÇÃO	13
2.1 A LIGAÇÃO QUÍMICA: ALICERCE DO CONHECIMENTO QUÍMICO	14
2.2 A FILOSOFIA DA QUÍMICA E A LUTA CONTRA O REDUCIONISMO	17
2.3 A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA	19
2.4 O MÉTODO SIMPLES DE HÜCKEL	21
2.5 OS SOFTWARES <i>HUCKEL 3.1</i> E <i>WXMAXIMA</i>	23
2.5.1 Software Hückel 3.1	24
2.5.2 Software wxMaxima	24
3 OBJETIVOS	26
3.1 OBJETIVOS GERAIS	26
3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	26
4 MATERIAIS E MÉTODOS	27
4.1 APLICAÇÃO DA TEORIA DE HÜCKEL E TESTE DOS SOFTWARES <i>HUCKEL 3.1</i> E <i>WXMAXIMA</i> PARA AVALIAÇÃO DE SEU USO NO ENSINO MÉDIO	27
4.2 PRIMEIRA ETAPA: APLICAÇÃO DOS QUESTIONÁRIOS.	27
4.3 SEGUNDA ETAPA: APLICAÇÃO DA PROPOSTA DE ENSINO.	28
4.4 TERCEIRA ETAPA: APLICAÇÃO DO QUESTIONÁRIO FINAL E AVALIAÇÕES BIMESTRAIS COM A CONSEQUENTE ANÁLISE DE RESULTADOS.	30
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	32
5.1 ANÁLISE DOS QUESTIONÁRIOS INICIAIS	33
5.1.1 Educandos do 1º ano do Ensino Médio	33
5.1.2 Educandos do 2º ano do Ensino Médio	36
5.2 APLICAÇÃO DA PROPOSTA DE ENSINO	39
5.2.1 Primeira etapa: introdução aos modelos atômicos	39
5.2.2 Segunda etapa: primeiras representações de moléculas	40
5.2.2.1 Aplicação do Método Simples de Hückel	42
5.3 ANÁLISE DAS CONCEPÇÕES POSTERIORES DOS EDUCANDOS DO 1º ANO E AVALIAÇÕES	42
5.3.1 Questionário final aplicado aos educandos	43
5.3.2 Análise de conteúdo das respostas expressas no questionário final e no decorrer das atividades	43
5.3.3 Análise das avaliações aplicadas aos educandos do 1º ano	44
5.3.3.1 Avaliações dos educandos participantes do projeto e avaliações dos educandos de turmas distintas ao projeto	45
6 CONCLUSÃO	49
7 REFERÊNCIAS	50
8 ANEXOS	53

8.1 MATERIAL SUPLEMENTAR PARA UTILIZAÇÃO DOS PROGRAMAS	53
8.1.1 Material suplementar para o programa <i>Huckel 3.1</i>	53
8.1.2 Exemplos de cálculos através do programa <i>Huckel 3.1</i> para as moléculas do ciclopenta-1,3-dieno e penta-1,3-dieno	56

1 JUSTIFICATIVA

A busca por métodos de ensino/aprendizagem com melhores resultados vem crescendo cada vez mais em todas as áreas do ensino. Transformações na sociedade, na tecnologia e na ciência têm sido muito perceptíveis e com esta situação é necessário aproximar as novas teorias com o cotidiano de educandos e pessoas externas ao meio acadêmico.

Uma dessas novas transformações foi o advento da Química Quântica e sua contribuição para interpretar a Ligação Química. Todavia, existe pouca apresentação dessa nova contribuição no ensino da Ligação Química, principalmente, aplicada no Ensino Médio (E.M.). A falta de textos mais apropriados, mesmo que em livros mais atuais, mostra a ausência da atualização do conteúdo da Ligação Química.

A situação expressada pela análise realizada por Ramos e Silva (2012) e pelo apresentado por Beber e Maldaner (2010), é baseada na crítica aos livros didáticos do E.M. em relação à abordagem do conteúdo de modelos atômicos e ligações químicas, respectivamente. Os autores comentam sobre a denominada insuficiência conceitual e a não utilização dos modelos e teorias científicas mais avançadas e aceitas atualmente, principalmente, provenientes da Mecânica Quântica. Este fato é direcionado de forma oposta ao proposto nos documentos norteadores da educação brasileira, nos quais se propõe a utilização de conteúdos atualizados (RAMOS e SILVA, 2012).

A interpretação mais atual para a ligação química está baseada na Teoria do Orbital Molecular (TOM), na qual a combinação linear entre Orbitais Atômicos (CLOA) para gerar os denominados Orbitais Moleculares (OM). Estes OM são densidades eletrônicas distribuídas em termos de probabilidade e possuem características de onda para representar os elétrons na molécula. Esta ideia a respeito da natureza da ligação química é extremamente funcional e está bem comprovada em toda as esferas científicas.

O uso do computador se apresenta como uma das ferramentas de pesquisa e construção de conhecimento mais bem sucedidas dos últimos tempos. Todas as áreas da ciência têm se beneficiado deste equipamento para buscar informações, construir o conhecimento e divulgar a ciência. Portanto, é relativamente natural que pessoas com acesso ao computador tendem a ter mais dúvidas ou serem mais questionadoras. A orientação para as informações obtidas de modo fácil e rápido tem que ser muito bem realizada para que não ocorra prejuízo do processo de ensino-aprendizagem, principalmente por causa da qualidade duvidosa das fontes de

informações, muitas vezes confusas ou incorretas. Outro ponto é a falta de acesso ou da qualidade de acesso à informação.

Existem também as bibliotecas escolares no para acesso à informação; entretanto, em sua grande maioria elas disponibilizam um grande acervo voltado as obras literárias, e assim, para as disciplinas de exatas, constata-se o oferecimento dos mesmos livros já distribuídos aos educandos.

O autor fez um levantamento em bibliotecas de cinco colégios, sendo três no município de Prudentópolis, um em Guamiranga e outro em Ponta Grossa, todos no estado do Paraná. Em apenas dois colégios foram encontrados livros de Química diferentes dos distribuídos anualmente aos educandos (RUSSEL, 1994).

2 INTRODUÇÃO

Os conceitos químicos tornam-se muitas vezes uma realidade vaga para os educandos pelo uso intenso da imaginação, bem como, de exemplos orais que não fazem parte de seu cotidiano, conseqüentemente, os educandos começam a conceituar Química como uma disciplina simplesmente voltada a memorizar conceitos sem utilidade no cotidiano das pessoas.

Chassot (2010) comenta que entender a ciência nos facilita, também, contribuir para controlar e prever as transformações que ocorrem na natureza. Assim, teremos condições de fazer com que estas transformações sejam propostas para conduzir a uma melhor qualidade de vida, possibilitando aos educandos realizarem análises mais críticas em relação as informações que lhes são repassadas e de suas atividades diárias, como por exemplo na alimentação.

O adolescente entra na sala de aula com conhecimentos empíricos já constituídos: não se trata, portanto, de adquirir uma cultura experimental, mas sim de mudar de cultura experimental, de derrubar os obstáculos já sedimentados pela vida cotidiana (BACHELARD 1996). Os professores devem aliar-se aos conhecimentos empíricos trazidos pelos educandos, trabalhando em prol do crescimento do universo conceitual destes, fazendo com que compreendam seus conceitos já formados, tendo livre arbítrio para corrigi-los e questioná-los.

Neste contexto Bachelard (1996) articula que,

O espírito científico proíbe que tenhamos uma opinião sobre questões que não compreendemos, sobre questões que não sabemos formular com clareza. Em primeiro lugar, é preciso saber formular problemas. E, digam o que disserem na vida científica os problemas não se formulam de modo espontâneo. É justamente esse sentido do problema que caracteriza o verdadeiro espírito científico. Para o espírito científico, todo conhecimento é resposta a uma pergunta. Se não há pergunta, não pode haver conhecimento científico. Nada é evidente. Nada é gratuito. Tudo é construído.

De modo geral, o ensino da Química se utiliza de modelos classificados como representacionais, experimentais ou de simulação, com o objetivo de apresentar o conteúdo de forma mais clara e acessível ao entendimento dos educandos. De acordo com Chassot (2010), construímos modelos na busca da facilidade para nossas interações com os entes modelados. É através de modelos, nas mais diferentes situações, que podemos fazer interferências e previsões de propriedades.

Um grande problema encontrado é a fragmentação no Ensino de Química (EQ), onde os educandos acreditam que os conteúdos são independentes e não relacionados, gerando a ideia de não utilidade para os próximos conteúdos, isto é, constroem a ideia de conceitos isolados, dificultando o processo de ensino/aprendizagem da Química como um todo.

Maldaner (2006) como cita Beber e Maldaner (2010) descreve que, compreende-se

como é difícil reverter à ideia vigente que enfatiza os conteúdos organizados em sequência linear segundo uma lógica de quem conhece a matéria e não daquele que precisa aprendê-la. Como exemplo se pode tomar a discussão de como um aluno poderá compreender de forma satisfatória o conceito de substância simples, sem ao menos entender as propriedades atômicas, ou por que o ensino e discussão dos estados físicos da água não geram novas interpretações quando são abordadas no 1º ano do E.M. ao se trabalhar as propriedades das substâncias. O que acaba ocorrendo é simplesmente a repetição do que acontece no ensino fundamental, apenas a exigência de se memorizar quais nomes são utilizados em cada passagem de estado físico.

A necessidade de inserção do educando no mundo científico no ensino médio cresce cada vez mais por causa do desenvolvimento da tecnologia, do aumento da globalização e das grandes inovações; enfim, o educando precisa finalizar o ensino médio o melhor preparado possível para se adaptar ao mundo profissional que o aguarda. Esse objetivo é possível a partir da atualização do conteúdo a ser repassado e na abertura de possibilidades de modificar o pensamento dos educandos de forma que este seja um cidadão crítico e atuante na sociedade. Assim, cabe a nós educadores a maior parte da tarefa em buscar melhores meios para efetivar essas perspectivas.

Neste contexto Driver *et al.*, (1999) apresenta que as salas de aula são lugares onde as pessoas estão ativamente engajadas umas com as outras na tentativa de compreender e interpretar fenômenos por si mesmas, e onde a interação social em grupos é vista como algo que fortalece o estímulo de perspectivas diferentes sobre as quais os indivíduos possam refletir.

2.1 A LIGAÇÃO QUÍMICA: ALICERCE DO CONHECIMENTO QUÍMICO

Conhecendo o resultado de pesquisas no ensino de Química é possível organizar melhor o ensino, de modo que ele não gere ou reforce a construção de concepções “errôneas” por nossos educandos, mas, pelo contrário, promova a evolução destas em direção às ideias quimicamente aceitas (SCHNETZLER E ARAGÃO, 1995).

Dentre os vários conteúdos da grade curricular do E.M. necessários para a formação do saber científico dos educandos, foi escolhido o conteúdo de ligações químicas pelo fato de ser trabalhado de maneira meramente abstrata e descontextualizada. Esta abordagem é consequência de uma aplicação muito superficial dos conceitos mais profundos sobre ligações químicas, não se utilizando dos conceitos quânticos inerentes a este conteúdo. Para avaliação

deste panorama, apresentamos alguns trechos de textos de autores quanto ao enfoque dado para este conteúdo.

De acordo com Atkins e Jones (2006, p. 55),

A existência de compostos é o ponto central da ciência da Química e, por isso, este assunto é o mais fundamental dessa ciência. Além disso, ao ver como as ligações se formam, podemos entender como os químicos projetam novos materiais. Sangue artificial, novos fármacos, produtos químicos para a agricultura e os polímeros usados para fazer artefatos, como discos compactos, telefones celulares e fibras sintéticas, tornaram-se possíveis porque os químicos entendem como os átomos se ligam para formar moléculas.

Beber e Maldaner (2010) consideram esse conteúdo central ou estruturante para a metodologia de ensino-aprendizagem sobre a química, pois a partir de pouco mais de noventa elementos formaram-se milhões de compostos diferentes que constituem todos os materiais conhecidos.

Toma (1997, p. 131) como citam Beber e Maldaner (2010) apresenta a afirmação de que,

o meio material ao nosso redor, com suas formas, propriedades e valores, reflete a enorme variedade de maneiras como os átomos se ligam para formar compostos. Por isso, as ligações químicas representam um assunto de fundamental importância, e seu conhecimento é essencial para um melhor entendimento das transformações que ocorrem em nosso mundo. Algumas substâncias, como as que compõem os alimentos e combustíveis, fornecem energia mediante a quebra e a formação de ligações químicas; outras interagem dando origem a novos compostos ou facilitam a dissolução de resíduos em um meio fluido (solventes, detergentes). Desse modo, a dinâmica das ligações químicas acaba regendo a nossa vida.

Refletindo e assimilando a importância das informações e pensamentos expressados por estes autores, sabemos da real importância que deve ser atribuída a este conteúdo. Sendo assim, será que este conteúdo é efetivamente tratado de modo a propiciar ao nosso educando as condições necessárias para sua inserção no mundo científico? Afinal, novamente como expressam Beber e Maldaner (2010),

Acredita-se que o pensamento científico não pode fazer parte apenas da vida dos sujeitos que têm o conhecimento das Ciências da Natureza e suas Tecnologias como inerente a suas profissões. Afinal, compreensões e tomadas de decisão em uma sociedade marcada por inovações tecnológicas e científicas requerem aprendizagens que possibilitem ir além de um discurso moralista vazio de conhecimentos.

Os mesmos autores nos apresentam, além de outras visões, uma investigação dos conceitos retratados por livros do ensino superior e do ensino médio sobre as ligações químicas. Se faz importante ressaltar a opinião destes autores que indicam ter encontrado a explicação mais adequada para este tema em artigos publicados em revistas eletrônicas, posteriormente em livros didáticos do ensino superior e por último em livros do ensino médio.

Os principais problemas apresentados pelos autores quanto aos livros para o ensino médio, partem da simplificação e superficialidade exagerada dos conceitos abordados, além de conceitos errôneos que não discutem com intensidade as reais interações que ocorrem entre os átomos em uma ligação química, sendo estas explicadas na maioria das vezes tendo como conceito principal a “Regra do Octeto”.

Em conformidade com Milaré (2007) por se tratar de modelos abstratos, que não são facilmente formados através de experiências sensorialistas, as ligações químicas assim como muitos outros modelos científicos possuem grande potencial na formação de concepções alternativas. Portanto, como proporcionar aos educandos um aprendizado de fato consistente em relação a este tema?

O uso da mecânica quântica, base da química computacional, pode fornecer possibilidades de compreensão mais aprofundadas do conteúdo de ligações químicas. Como traz Toma (1997),

O modelo de Lewis é bastante útil na descrição qualitativa das ligações químicas. Porém, quando se quer discutir questões energéticas, geometrias ou aspectos de natureza espectroscópica torna-se necessário lançar mão de teorias quânticas que enfocam a ligação química em termos da combinação de orbitais. Esse tipo de abordagem exige o ensino do modelo quântico para o átomo, e considera que quando dois átomos se ligam, o compartilhamento eletrônico se dá pela combinação dos orbitais que estão interagindo.

Portanto, com tantos equívocos justamente na iniciação do conhecimento científico pelos educandos, a sequência do seu aprendizado, a qualidade das informações absorvidas e o impacto sobre o desenvolvimento científico estará comprometida.

Mortimer e Miranda (1995) sugerem que uma das formas de lidar com essas dificuldades e promover uma evolução na concepção do ensino-aprendizagem é discutir as explicações sobre a ligação química. Neste âmbito Fernandes e Marcondes (2006) dizem que tomando ciência das principais concepções dos educandos sobre ligações químicas, o professor pode ficar atento e diagnosticar os conceitos desenvolvidos pelos seus educandos e planejar suas ações pedagógicas de forma a tentar superá-los.

Outro ponto bastante importante se dá quanto ao empenho do próprio professor em melhorar a qualidade das informações a serem utilizadas no processo de ensino-aprendizagem, principalmente quando utilizar um material que não apresente um nível que propicie o melhor subsídio para a iniciação científica de seus educandos.

Beber e Maldaner (2010) reforçam que é cada vez mais comum o rumo da ciência e da tecnologia serem regidos por pessoas sem o conhecimento necessário para isso, destacando

a importância de um ensino que ao menos possibilite aos educandos poderem no futuro ter o mínimo de aporte do conhecimento científico, para quando das tomadas de decisões este conhecimento influencie no resultado.

Afinal os professores, auxiliares na construção do conhecimento dos educandos, necessitam estar sempre em aperfeiçoamento tendo a capacidade de melhorar o conhecimento conquistado ou que por muitas vezes foi simplesmente repassado.

Mesmo em busca de novos métodos para melhorar a aprendizagem, se deve dar atenção para alguns obstáculos epistemológicos, pois de acordo com Bachelard (1996) como cita Milaré (2007), o animismo consistiu em obstáculos nas Ciências Físicas no século XVIII, quando o corpo humano e os fenômenos vitais eram supervalorizados, fazendo com que a vida transcendesse ao domínio que lhe era próprio. No caso das ligações químicas, o uso do animismo é verificado em colocações como a de que os átomos *querem, desejam ou possuem necessidade* de doar ou receber elétrons.

2.2 A FILOSOFIA DA QUÍMICA E A LUTA CONTRA O REDUCIONISMO

Durante muitos séculos a história da Química foi sufocada pelo sucesso da física, não apenas como ciência, mas também como disciplina escolar. Labarca, Bejarano, Eichler (2013), descrevem a mecânica quântica como grande impactante na relação entre a Química e a Física, onde o êxito desta teoria levou físicos e filósofos das ciências a aceitar que a química poderia ser completamente reduzida a Física. Ainda segundo os autores, se essa afirmação for válida, qualquer problema filosófico da Química pode ser explicado no âmbito da Filosofia da Física.

Na tentativa de conseguir a independência da Química como disciplina também filosófica, a qual deve discutir a construção das informações e do conhecimento da sociedade perante a essa ciência, teve o surgimento da Filosofia da Química, mas, o processo de formação para esta disciplina não foi rápido nem ao menos expressivo no início, não que o seja em tempos atuais, sendo que, até as primeiras décadas do século passado eram poucas as publicações nesta área, tendo uma maior notoriedade entre os anos de 1949 e 1986 (LABARCA, BEJARANO, EICHLER, 2013).

Até em dias atuais frequentemente se ouvem relatos de problemas inerentes da Química, os quais necessitam de grande argumentação e discussão, que são erroneamente descritos por explicações das Ciências Físicas sem ao menos tratar da natureza deste problema.

Além disso, até mesmo professores de Química por motivos diversos, tais como: insuficiente formação acadêmica, confusão de conceitos, etc., acabam apresentando conceitos de forma errônea, sendo que um dos melhores exemplos para retratar esta situação está em torno dos orbitais moleculares (ferramentas matemáticas para expressar a possibilidade da presença de elétrons em determinadas regiões de um átomo) que são, na grande maioria das vezes, abordados como sistemas possíveis de serem palpáveis, já existentes em um átomo independente ou não da presença de um elétron (LABARCA, BEJARANO, EICHLER, 2013)

De maneira semelhante temos outro problema, e esse muito mais perceptível e frequente nas salas de aula, que é a simplificação exagerada dos conceitos e teorias da Química por professores na tentativa de evitar um grande problema para esta ciência que é a negação de grande parte dos educandos frente a essa disciplina. Outro fator que influencia a simplificação é a grade curricular, onde o professor não possui tempo hábil para trabalhar todo o conteúdo proposto.

No contexto dos conceitos da Química, Ribeiro (2008) apresenta alguns pontos que mostram as situações que levam professores a realizarem esse reducionismo conceitual em sala de aula,

Existe uma múltipla barreira no ensino de Química: Educandos com limitado poder de processamento (1) necessitam usar entidades teóricas abstratas (2) em um nível fora de suas experiências diretas (3) para explicar fenômenos em outro nível de descrição, (4) quando eles têm limitada compreensão do papel dos modelos (5) e da natureza da explicação (6). Isto ocorre principalmente devido ao: uso da linguagem cotidiana dentro de um contexto científico; simplificações de conceitos; uso de definições e de modelos múltiplos; memorização simples de conceitos e algoritmos; sobreposição de conceitos similares; dotar os objetos de características humanas; conhecimento inadequado de pré-requisitos; incapacidade de visualizar a natureza submicroscópica da matéria. Assim, educandos atribuem propriedades macroscópicas a entes microscópicos, têm pouca compreensão de modelos, leis, teorias e suas explicações são em grande maioria concepções alternativas; variedade de conceitos fundamentais e circularidade destes, grande confusão de modelos e baixa sistematização teórica/conceitual da Química.

De forma semelhante, Milaré (2007) baseada nos obstáculos ontológicos de Furió e Furió (2000), nos apresenta que o mundo microscópico é visto pelos estudantes com as mesmas características do mundo macroscópico originando diversas dificuldades no processo de ensino-aprendizagem em Química. Beber e Maldaner (2010) nos apresentam que,

A linguagem assume uma posição de destaque nas interações intersubjetivas intencionais, tão desejadas para o ambiente escolar, porque a aprendizagem é um processo que se encontra em constante construção e reconstrução e ocorre por meio das interações entre os sujeitos, sendo proporcionalmente intensificada conforme as assimetrias de conhecimentos.

A relação com o cotidiano, sem perder de vista os conceitos e conteúdo que permitam o pensamento químico, pode ser pensada pela significação dos conceitos de uma ciência em vários contextos diferentes para que o significado possa evoluir e atingir novos níveis e se consolidar.

Esta forma de proceder permite formar o pensamento sobre uma situação sob o ponto de vista de uma ciência, superando a prática de exigir respostas únicas, diretas e fora de qualquer contexto (MALDANER, 2006 como cita BEBER E MALDANER, 2010).

2.3 A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA

Em meados do ano de 1980 iniciaram-se algumas experiências de informatização das escolas de ensino básico no Brasil, visando a implementação e ao uso de laboratórios de informática educativa nessas escolas (EICHLER e DEL PINO, 2000). Na atualidade, a grande maioria das escolas tem um laboratório de informática, mesmo que em muitos casos a conexão com a internet seja falha ou não funcione.

Ribeiro e Greca (2003) nos apresentam que,

De 1989 para cá, o avanço da tecnologia teve um ritmo surpreendentemente mais acelerado, ocupando espaços cada vez maiores em nossa vida cotidiana, não se podendo hoje conceber muitas de nossas rotinas e hábitos sem a atual tecnologia. Assim, não poderia a tecnologia passar despercebida por um setor bastante relevante a nossa sociedade: a Educação.

A finalidade desses laboratórios é auxiliar educandos e professores em atividades escolares, tais como: pesquisas, elaboração de textos, utilização de softwares e/ou programas educacionais, entre outros, visando contribuir no processo de ensino-aprendizagem.

Contudo, o uso desses laboratórios deve ser bem programado, pois sua finalidade é ser mais um instrumento que sirva como ferramenta didática, a qual vem no auxílio para o processo educacional, não sendo este a solução única para se atingir os objetivos esperados neste processo (EICHLER e DEL PINO, 2000).

Apesar de no Brasil a informatização das escolas básicas ser um movimento com menos de quarenta anos, este processo não está tão distante do início da utilização de softwares educacionais e de simulação até mesmo nas universidades (pretende-se retratar aqui o contexto dos softwares educacionais e de simulação, não focando o uso de computadores para cálculos matemáticos e outras necessidades).

Raupp, Serrano, Martins, (2008) nos referem que,

No início da década de 70, na University of Lancaster, Inglaterra, um curso de Química Quântica foi cuidadosamente organizado pelo químico B. Duke a fim de

recuperar a motivação perdida devido às tentativas frustradas de cientistas da computação que, ao introduzir técnicas computacionais no ensino de química, não utilizavam assuntos relevantes para a Química. [...] No seu experimento Duke utilizou um programa para calcular as propriedades de compostos aromáticos pelo Método dos orbitais moleculares.

Ainda abordando o início destes softwares para simulação e educação, após o uso de microcomputadores como ferramenta de ensino para a Teoria do Orbital Molecular no laboratório de Química da Universidade de Cambridge, Reino Unido, em 1988, Freitas (1998) como citam Raupp, Serrano, Martins (2008), nos apresentam que,

a Real Academia de Ciências da Suécia outorgou o Prêmio Nobel de Química de 1998 aos pesquisadores: Walter Kohn (Universidade da Califórnia, Santa Barbara, Califórnia, EUA), por sua contribuição ao desenvolvimento da Teoria do Funcional de Densidade e John A. Pople (Universidade North western, Evanston, Illinois, EUA), por sua contribuição ao desenvolvimento de métodos computacionais em química quântica. Com esses desenvolvimentos que foram iniciados a partir da década de 1960, a química reafirma-se como uma ciência exata, computável.

Em relação ao contexto da utilização em sala de aula de softwares na educação em química, existe uma grande dificuldade para encontrar publicações em revistas científicas impressas, virtuais e periódicos; todavia, são encontrados softwares criados, mas sem a discussão de sua aplicação prática.

A seguir, serão relatados dois casos em que os autores discutem o modo de aplicação e os resultados obtidos. Infelizmente, a aplicação destas metodologias não ocorreu na educação básica e sim em cursos superiores e técnicos. Balen e Netz (2005) relatam a influência do uso de ferramentas de modelagem e de simulação computacional na aprendizagem e compreensão dos conceitos, e, na capacidade de articulação entre os níveis de representação macroscópico, microscópico e simbólico no contexto dos modelos de gases ideais e reais.

Os autores desenvolveram a modelagem utilizando o software *Modellus*, aplicada mediante o uso de um guia construído dentro da estratégia Predizer – Observar – Explicar (P.O.E.). A atividade foi efetuada em turmas de estudantes dos cursos universitários das áreas de Ciências e Tecnologia. Aplicaram-se três instrumentos de coleta de dados: i) pré-teste; ii) tutorial; iii) pós-teste.

A análise dos instrumentos de coleta de dados foi realizada de forma qualitativa e quantitativa. Os autores relatam que a metodologia proporcionou evolução conceitual apresentando melhores resultados nos níveis simbólico e macroscópico.

Raupp, Serrano e Martins (2008) utilizaram ferramentas computacionais com estudantes de 4ª série do Curso Técnico de Química da Fundação Escola Técnica Liberato Salzano Vieira da Cunha, da cidade de Novo Hamburgo-RS, no ano de 2007. Um dos temas abordados foi o estudo e representações de isômeros geométricos. Este tópico foi selecionado

devido à dificuldade de aprendizagem encontrada pelos estudantes de química orgânica básica quando é requerida a manipulação e a percepção espacial destas representações. O experimento foi realizado em três etapas: i) pré-teste, ii) sessões de instrução com software de simulação *ChemSketch* e iii) pós teste.

Os autores observaram que os educandos, ao representarem as espécies moleculares, evidenciaram diferenciar as posições espaciais dos grupamentos moleculares que caracterizam estrutura cis e trans, além de adquirirem, via interação tanto com um parceiro (instrutor) mais capaz e um instrumento, ou apenas com o programa computacional como um “instrutor mais capaz”, competência representacional.

2.4 O MÉTODO SIMPLES DE HÜCKEL

No presente trabalho utilizamos o Modelo de Orbitais Moleculares desenvolvido por Hückel, conhecido como Método Simples de Hückel ou Hückel Molecular Orbital (HMO); este método é classificado como semi-empírico. A classificação desse método como semi-empírico se deve ao fato de utilizar de várias aproximações e da utilização de parâmetros obtidos experimentalmente. Em meados de 1930, Hückel, ao estudar compostos aromáticos, introduziu uma das primeiras aproximações para a teoria dos orbitais moleculares, ao restringir o sistema eletrônico analisado apenas aos elétrons π .

Duas das características mais importantes são as de assumir que nas análises se possam separar os elétrons σ (sigma) e π (pi), e que não há sobreposição de orbitais em átomos não adjacentes, ou seja, átomos não vizinhos na cadeia analisada. Portanto, a energia de interação neste caso deve ser considerada como zero (HOUSE, 2003).

Os HMO's são representações simples e qualitativas da densidade eletrônica para representar a ligação química, baseado, principalmente, sobre a deslocalização de elétrons na ligação química. Para maior aplicação deste método, o formalismo será apresentado de modo simplificado.

O HMO apresenta-se como uma das possibilidades para a resolução da equação secular originada da aplicação de Schrödinger sobre moléculas. A equação de Schrödinger é uma equação diferencial do segundo grau e sua resolução envolve a avaliação de um grande número de interações. Nos métodos quânticos semi-empíricos a negligência de um grande número dessas integrais foi a solução adotada para economizar tempo de máquina e também reduzir a quantidade de memória necessária nos cálculos.

Um grande esforço foi dedicado na busca de métodos para a introdução de parâmetros empíricos ou previamente calculados na resolução da equação de Schrödinger, que permitissem a eliminação do cálculo de algumas dessas integrais. Em princípio, podem parecer bastante drásticas estas considerações, mas certamente são fundamentais para a simplificação esperada com o método e a maior facilidade em se chegar aos resultados com os cálculos propostos, os quais serão descritos mais adiante.

Portanto, em uma aproximação de Hückel apenas as ligações π são consideradas. Geralmente se supõe que as ligações σ são entendidas em termos da teoria do orbital molecular comum. As ligações σ formam a estrutura geral da molécula, e as ligações π são distribuídas sobre os átomos de carbono disponíveis.

Se estamos pressupondo que as ligações π são independentes das ligações σ , podemos considerar que os orbitais moleculares π são combinações lineares de apenas orbitais 2p dos vários átomos de carbono (GALVÃO, 1985).

Para representação das ligações π pelo método HMO, utilizamos a Equação Secular, a qual é obtida pela Equação de Schrödinger e a Combinação Linear de Orbitais Atômicos (CLOA). Assim, o determinante secular é escrito como:

$$| H_{ij} - ES_{ij} | = 0$$

Sendo $H_{ii} = \alpha$, e esse valor pode ser substituído pela primeira energia de ionização. Aplicando a equação secular à uma molécula hipotética AB, homo nuclear, construímos o determinante secular como a seguir:

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - E & H_{AB} - S_{AB}E \\ H_{BA} - S_{BA}E & H_{BB} - E \end{vmatrix} = 0$$

No método HMO algumas considerações são de extrema importância para a simplificação dos cálculos a serem executados, tais como:

- i) $S_{ij} = \delta_{ij}$
- ii) $H_{ii} = \alpha$
- iii) $H_{ij} = \beta$

Onde, δ é o delta de Kronecker e assume dois possíveis valores, $\delta = 1$, se $i=j$ ou $\delta = 0$; se $i \neq j$. O parâmetro α , já explicado anteriormente, assume o mesmo valor quando os átomos são iguais. O termo β é apresentado como o que expressa o recobrimento da ligação entre os átomos analisados, assim sendo uma integral de ressonância, representando a interação entre os orbitais atômicos dos átomos.

Quando em átomos vizinhos, considera-se a sobreposição dos orbitais atômicos. Assim, o valor de β pode ser considerado como sendo 1 eV, o qual é o valor médio para a

ligação. Para átomos não vizinhos a sobreposição dos orbitais atômicos é desprezada e o valor β é considerado como 0 (zero) (HOUSE, 2003).

Ao aplicar as considerações feitas por Hückel a matriz toma a forma:

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta \\ \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

Realizando a transformação, $x = \alpha - E/\beta$, tem-se:

$$\begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

De fato, após todas as aproximações possíveis, tem-se uma matriz muito mais simples de ser resolvida, até mesmo manualmente. Observa-se que surge na matriz uma diagonal que permite encontrar o valor da energia dos orbitais atômicos, onde o parâmetro α , já explicado anteriormente, assume o mesmo valor quando os átomos são iguais.

2.5 OS SOFTWARES *HUCKEL 3.1* E *WXMAXIMA*

Atualmente o uso de softwares em sala de aula tem crescido muito, tanto pelo acesso a dispositivos com essas funcionalidades quanto a possibilidade da melhora do processo de ensino/aprendizagem. Assim, o teste de softwares educacionais relacionados a teoria é necessário, sendo que alguns softwares de fácil disponibilidade podem auxiliar muito no ensino de ligações químicas.

O software tem a vantagem de não quebrar ou ser independente da compra de reagentes, neste caso em específico auxilia muito a aprendizagem de um conceito considerado abstrato. Porém, a maior dificuldade está centrada na impossibilidade de experimentos mais avançados. Todavia, a TOM viabiliza a aprendizagem das ligações químicas porque é uma teoria consolidada e aplicada por meio de um software. Portanto, softwares *Huckel 3.1* e *wxMaxima* apresentam um bom conjunto de ferramentas para o desenvolvimento do conceito de ligações químicas, sendo compatíveis com a TOM.

A análise dos softwares e a seleção de alguns deles teve como objetivo a busca e criação de um referencial na elaboração de materiais que venham auxiliar na melhora do processo ensino/aprendizagem para ligações químicas.

2.5.1 Software Hückel 3.1

Baseado na Teoria dos Orbitais Moleculares de Hückel, este software foi desenvolvido para cálculos dos níveis de energias dos orbitais moleculares de compostos orgânicos, isto é, dos níveis de energia para ligações químicas em ligações π , ou, mais comum, duplas ligações.

Uma das dificuldades iniciais é que as informações prestadas neste software estão em língua inglesa, o que pode dificultar o trabalho do operador perante as informações em relação ao software e até mesmo na sua utilização quando dos comandos de cálculos e suas interpretações, caso o mesmo não tenha noções básicas deste idioma.

Outro fator negativo é a impossibilidade de se trabalhar moléculas com mais de cinco átomos, estando o sistema restrito aos elementos carbono, flúor, nitrogênio e oxigênio, tendo a possibilidade da representação de simples e duplas ligações entre os átomos destes elementos, mas não sendo possíveis as ligações triplas.

Outro ponto percebido é que mesmo não constando informações que relacionem se há um período de validade para a licença emitida para utilização do software, com o passar de aproximadamente três meses o mesmo deixa de funcionar corretamente, não apresentando os valores dos níveis de energia dos orbitais moleculares da molécula montada pelo operador.

Mesmo apresentado os empecilhos citados, o trabalho pode ser desenvolvido sem maiores dificuldades. Quando se trata do número de átomos na molécula, a finalidade é fornecer ao educando um mecanismo que possibilite compreender e discutir as propriedades cernes na ligação química, portanto, esses objetivos podem ser atingidos com o cálculo e estudo de moléculas menores.

Quanto a validade da licença de utilização, outros softwares podem ser aplicados em sistemas online ou através de download. Como principal exemplo está o HULIS (<http://www.hulis.free.fr/>). Para o software *Hückel 3.1* usado na proposta de ensino se utilizou do endereço: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>, no qual pode ser feito o download do mesmo.

2.5.2 Software wxMaxima

Este software é de licença livre e é um programa utilizado inclusive para solução de equações algébricas utilizado para resolver diversas operações matemáticas. Uma de suas operações matemáticas é a operação com matrizes, as quais são de grande importância na aplicação dos Orbitais Moleculares de Hückel.

O Método Simples de Hückel é baseado na construção de matrizes as quais fornecerão as energias dos orbitais moleculares da molécula. Moléculas com uma grande quantidade de átomos tornam o grau do polinômio mais elevado, dificultando o cálculo passo a passo. Neste ponto, o software *wxMaxima* serve de ferramenta para a montagem das matrizes e o cálculo das raízes do polinômio gerado.

Como foi descrito no software *Huckel 3.1*, o mesmo fornece as energias para os orbitais moleculares da molécula de forma direta, sem a necessidade de montagem da matriz por parte do operador do sistema; contudo, o objetivo não é construir uma ferramenta educacional de resultados diretos aos educandos, mas, a discussão pelos mesmos das interações existentes na molécula a partir da ligação química.

A construção das matrizes por parte do educando, completará o processo de ensino/aprendizagem da TOM por meio da CLOA. A interpretação por parte do estudante sobre a influência de um determinado átomo sobre os níveis de energia da molécula, ampliarão o conceito sobre a ligação química. Assim, além de montar a estrutura desta molécula, o estudante ainda terá de identificar quais átomos farão a junção de seus orbitais atômicos para construir o orbital molecular correspondente. O download deste software pode ser realizado no site oficial deste programa, em: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>.

Um grande auxílio para utilização deste software é que o mesmo traz as linhas de comando em vários idiomas, sendo necessário apenas selecionar o pretendido no momento da instalação. Outro ponto favorável é a existência do manual em língua portuguesa para este software, o qual pode ter seu download realizado no seguinte endereço: <http://andrejv.github.io/wxmaxima/>.

Existem outros endereços para download, tanto do software quanto do manual, mas ambos são mais trabalhosos, necessitando de mais etapas até a conclusão do processo, trazendo o manual menos organizado em relação aos encontrados nos endereços acima citados e os downloads do software geralmente baixam outros aplicativos desnecessários.

3 OBJETIVOS

3.1 OBJETIVOS GERAIS

- ✓ Trabalhar a inserção de conceitos e teorias mais atuais no ensino das ligações químicas no ensino médio, principalmente conceitos da Mecânica Quântica.

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ✓ Elaborar um material impresso e/ou disponível em meios de divulgação em mídia on-line, retratando um roteiro destinado professores e alunos, que vise orientar quanto aos procedimentos a serem adotados para o uso dos softwares *Hückel 3.1* e *wxMaxima*
- ✓ Testar o software *Hückel 3.1* direcionado à Teoria do Orbital Molecular de Hückel e o Software *wxMaxima* como ferramenta de trabalho para as matrizes do método.
- ✓ Verificar possíveis dificuldades advindas na utilização destes softwares, tanto com a linguagem quanto com a sequência de comandos a ser executada, auxiliando na elaboração do material de apoio.
- ✓ Verificar a eficiência nos resultados com a utilização do Método de Hückel conjuntamente com os softwares.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 APLICAÇÃO DA TEORIA DE HÜCKEL E TESTE DOS SOFTWARES *HUCKEL 3.1* E *WXMAXIMA* PARA AVALIAÇÃO DE SEU USO NO ENSINO MÉDIO

Após escolher o tema da pesquisa, realizados os estudos iniciais, se iniciou o desenvolvimento do projeto. Os estudos teóricos, elaboração de material, dentre outros pontos, devem estar correlacionados com o local de aplicação da proposta. Tendo em vista a utilização dos softwares educacionais, a estrutura do colégio deve comportar essa necessidade. Assim sendo, antes mesmo do início da aplicação em sala de aula, o laboratório de informática foi o primeiro a ser analisado.

Como mencionado anteriormente, o método aplicado é plausível de utilização mesmo sem o auxílio dos computadores, mas devido a situações já citadas, tais como: insuficiência no conhecimento matemático prévio pelos educandos, necessidade de inserção de tecnologias no ensino para se adaptar ao cotidiano do educando, etc., o uso destes se torna indispensável para o desenvolvimento mais efetivo desta atividade.

Raupp, Serrano e Martins (2008) salientam que o uso de ferramentas tecnológicas, quando devidamente aplicadas, além de motivar a aprendizagem, colaboram com a adaptação do educando em uma sociedade cada vez mais tecnológica.

A aplicação da proposta em campo de estudo se deu sequencialmente através de três etapas; sendo a aplicação de questionários iniciais e análise de conteúdo das respostas através deles obtidas; aplicação da proposta de ensino em sala de aula, com o uso dos materiais preparados e dos programas computacionais; e, por final, avaliação dos resultados através de novo questionário aplicado e das avaliações bimestrais realizadas com os educandos.

4.2 PRIMEIRA ETAPA: APLICAÇÃO DOS QUESTIONÁRIOS.

Após verificação da estrutura do colégio em que foi aplicado o projeto, outra situação era obter informações que pudessem auxiliar na preparação dos materiais a serem utilizados e, até mesmo de como planejar o desenvolvimento das atividades, embora essa última parte possa eventualmente sofrer alterações, tendo em vista que se tratam de pessoas, as quais nem sempre compartilham da mesma forma de pensar ou da mesma facilidade para aprender.

Assim sendo, realizou-se uma pesquisa através de questionários para levantar as concepções dos educandos envolvendo o conteúdo de ligações químicas. Esta se deu em um

colégio estadual na cidade de Prudentópolis (PR), envolvendo aproximadamente 200 educandos do 1º ano do ensino médio e 120 do 2º ano.

O primeiro questionário foi aplicado aos educandos do 1º ano, tendo por objetivo verificar suas concepções prévias sobre o tema. O segundo, aplicado aos educandos do 2º ano, visou obter dados referentes ao nível de conhecimento desses em relação ao tema e à metodologia utilizada pelo professor no ano anterior.

TABELA 1. QUESTIONÁRIOS APLICADOS AOS EDUCANDOS DOS 1º E 2º ANOS

Turma	Questões
1º Ano	1) Você sabe ou já ouviu falar em ligações químicas?
	2) Caso sua resposta tenha sido “sim”, explique o que você entende sobre ligações químicas.
	3) Caso sua resposta a primeira pergunta tenha sido “não”, o que você imagina que sejam as ligações químicas (do que abordam; como ocorrem; etc).
2º Ano	1) Um dos conteúdos estudados no 1º ano do ensino médio são as ligações químicas. O que você lembra sobre ligações químicas (se possível, cite exemplos)?
	2) Durante as aulas que abordaram este conteúdo, qual foi a forma de apresentação utilizada pelo professor (Ex.: experimentos, vídeos, slides, pesquisa em internet, programas computacionais, metodologia tradicional (apenas quadro, giz e livros), etc)?

Fonte: O Autor.

Para as perguntas sobre Ligações Químicas, justamente por possibilitarem respostas dos mais diferentes pontos de vista, uma análise de conteúdo foi aplicada visando a busca de melhores interpretações ante essas respostas. Moraes (1999) nos apresenta uma metodologia de análise que se faz bastante interessante ao contexto da pesquisa realizada, visto de que se trata de um grupo de educandos em que suas opiniões podem se aproximar ou mesmo se distanciar ao tratar de um mesmo assunto.

Os resultados desta análise de conteúdo na sua forma mais completa, tanto dos primeiros questionários quanto do questionário final, serão discutidos com maior intensidade no decorrer dos resultados e discussões, mas de antemão podemos antecipar correlações nas respostas dos educandos, principalmente quanto da utilização do senso comum ao expressarem suas concepções.

4.3 SEGUNDA ETAPA: APLICAÇÃO DA PROPOSTA DE ENSINO.

Em sequência se deu a realização das aulas com a utilização de textos abordando os temas de modelo atômico quântico e ligações químicas, estas com base na teoria dos Orbitais

Moleculares de Hückel, bem como da utilização de programa computacional que representa e fornece a interação de energia em uma ligação química, com base nesta mesma teoria.

Para a elaboração dos textos base utilizou-se de artigos científicos e livros voltados ao ensino superior, visando à preparação de um material menos superficial que o encontrado em livros do ensino médio (BEBER, MALDANER, 2010). Até mesmo pelo fato de os livros didáticos da disciplina, que constam a disposição dos educandos no colégio em que foi aplicado a atividade de ensino, apresentarem o conteúdo de Ligações Químicas de forma bastante superficial, com uma apresentação que não leva o educando a pensar o conteúdo, apenas memoriza-lo.

Reforça-se essa opinião pelo apresentado por Lopes (1997), ao analisar o trabalho de Krasilchik (1989), Garcia (1989), Chevallard e Johsua (1982) e Lopes (1992), em que o autor nos traz alguns problemas sobre o processo de mediação didática, especialmente voltados a Química.

Os princípios da Mecânica Quântica passam a ser discutido no ensino brasileiro a partir da década de 50, [...]. A apropriação de conceitos como orbital ou de princípios como o de Heisenberg, feita por livros didáticos, banalizou-os de tal modo que assumiram significados completamente dispares em relação aos originais. [...] Ensinamos apenas o resultado, não o processo histórico da construção do conceito, portanto, retiramo-lo do conjunto de problemas e questões que o originam.

Desta forma, com a preparação do material didático e não com a utilização de um material pronto, tentamos evitar ao máximo as simplificações desnecessárias do material didático. De fato, a adequação da linguagem científica para os educandos é de extrema importância, mas sem deixar de discutir pontos que exijam destes um maior esforço para seu aprendizado.

O programa computacional base utilizado foi *Hückel 3.1* (desenvolvido por: Gerrit-Jan. Vinculado ao sítio <http://members.aol.com/gjlinker>). Este foi desenvolvido para cálculos das energias dos níveis de ligação (ligante, não ligante e antiligante), densidades eletrônicas e as ordens de ligação de forma direta, ou seja, não apresentar a metodologia do cálculo.

Utilizou-se também outro programa computacional: o *wxMaxima* (wxMaxima 13.04.2 (C) 2004 - 2013 Andrej Vodopivec), um sistema de álgebra computacional utilizado para as mais diversas operações matemáticas, sendo uma de suas propriedades a operação com matrizes polinomiais, justamente o apresentado pelo Método de Hückel.

Cabe ressaltar que enquanto o primeiro apresenta resultados diretos, no segundo é necessário operacionalizar passo a passo, desde a construção da matriz referente a molécula,

até se obter os valores de suas raízes. Só então, calcula-se as energias através das equações do método de Hückel.

4.4 TERCEIRA ETAPA: APLICAÇÃO DO QUESTIONÁRIO FINAL E AVALIAÇÕES BIMESTRAIS COM A CONSEQUENTE ANÁLISE DE RESULTADOS.

A avaliação do resultado do projeto foi através de um questionário aplicado novamente aos educandos do 1º ano, visando levantar informações a respeito do conhecimento construído por estes, bem como analisar a linguagem escrita na definição da ligação química e de quais conceitos ou argumentações os educandos utilizaram.

TABELA 2. QUESTIONÁRIO 03 (FINAL) APLICADO AOS EDUCANDOS DO 1º ANO

- 1) Descreva o conceito de ligação química, apresentando sua concepção sobre o tema (não há a obrigatoriedade da descrição ser em linguagem científica, podendo responder com suas próprias palavras).
- 2) Apresente sua opinião sobre a metodologia utilizada para o estudo do conteúdo (relação entre os cálculos manuais e computacionais).
- 3) Apresente sugestões de atividades, acréscimo ou retirada, que em sua opinião seriam importantes para esta atividade (Ex.: maior ou menor tempo de estudo, número de moléculas calculadas, etc.).

Fonte: O Autor.

Outra forma de análise foi perante as avaliações aplicadas durante o bimestre em que o projeto foi desenvolvido. Uma prova cobrando a discussão de conceitos em torno das ligações químicas foi aplicada a esses educandos. Para fim de comparação, as questões desta prova foram as mesmas aplicadas por outras duas professoras do mesmo colégio, as quais utilizaram da metodologia dita como tradicional de ensino: quadro, giz e livros didáticos distribuídos aos educandos.

TABELA 3. AVALIAÇÃO BIMESTRAL APLICADA AOS EDUCANDOS DO 1º ANO

Turma	Questões
1º Ano	1) Apresente os conceitos, de forma simplificada, referentes aos modelos atômicos de Dalton, Thomson, Rutherford e Rutherford-Bohr.
	2) Em relação as propriedades e partículas desses modelos atômicos, apresente conceitos em relação aos elétrons (Exceto no modelo de Dalton).
	3) A partir dos modelos atômicos estudados, relacione a teoria de algum desses modelos com a Ligação Química. Fique à vontade para expressar quaisquer opiniões e interpretações, se necessário utilizando de exemplos.

4) Nessa questão você deve discutir, de forma bastante ampla, o conceito de ligação química. Não necessariamente você precisa relacionar com algum modelo atômico.
--

Fonte: O Autor.

De maneira alguma se pretende realizar críticas a esta metodologia dita como tradicional, mas por apresentarmos uma proposta diferente à utilizamos como base de comparação. De fato, nem todos os conteúdos são possíveis de serem trabalhados de forma diferenciada trazendo a inovação tecnológica ou atividades experimentais, a utilização de debates, seminários, etc., mas, com certa frequência ou não, algumas atividades assim podem ser feitas.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os questionários iniciais para o 1º e 2º ano foram de imensa importância para o desenvolvimento do projeto. Ao iniciar uma nova atividade é importante que o professor descubra quais as concepções de seus educandos perante o tema de estudo, e assim, venha a auxiliá-los no reforço ou reconstrução dessas concepções.

Da mesma forma, saber como os educandos que já tiveram contato com o conteúdo a ser trabalhado descrevem o mesmo, pode auxiliar o professor a estar melhor preparado para lidar com situações que necessitem de maior atenção, como por exemplo o uso quase que exclusivo do senso comum ao apresentar suas concepções.

Mortimer (1996) apresenta que a aproximação entre as ideias científicas e as ideias das crianças vem se apresentando como umas das boas estratégias de ensino. De fato, percebe-se por suas exposições que se os problemas e conflitos apresentados, bem como se os métodos de ensino propostos, levarem em consideração o senso comum dos educandos, o resultado pode vir a ser muito mais satisfatório.

A partir deste ponto apresentamos alguns dados que vêm representar o conteúdo evidenciado através dos questionários, aproveitando o apresentado por Moraes (1999) em que se processa a análise de resultado dos questionários do seguinte modo.

- 1- Preparação das informações; que consiste na identificação das amostras de informações a serem analisadas. Pode ocorrer de que nem todas as amostras, ou seja, os questionários respondidos estejam de acordo com o propósito da pesquisa. Os questionários devem ser pertinentes a pesquisa, trazendo informações que realmente possam ser utilizadas para análise.
- 2- Unitarização; releitura de todo o material que foi separado após a preparação das informações. Esta pode ser por palavras chave já encontradas na etapa inicial, como por exemplo “coisas”, “substâncias”, palavras que foram rotineiramente utilizadas pelos educandos ao responderem os questionários. Por conseguinte, a separação dessas unidades chave.
- 3- Categorização; agrupamento dos dados que tem pontos em comum. Neste caso é possível reduzir as ramificações de análise, como por exemplo no significado das palavras “coisa” e “substância” que no contexto das respostas estavam relacionadas ao mesmo tema.

- 4- Descrição; representação dos dados previamente obtidos através da categorização. Essa ainda não é a representação final, apenas uma demonstração do que será analisado a partir de então.
- 5- Interpretação; um dos pontos de maior importância na análise de dados. Não basta apenas descrever, é necessário a interpretação dos dados descritos. Neste caso é exaltada a importância do mediador da pesquisa, pois é através da vivência com a situação que o mesmo poderá ter a completa possibilidade de interpretar as respostas emitidas de acordo com o contexto nas quais foram produzidas.

Cabe salientar que as descrições apresentadas pelos educandos serão destacadas na íntegra, não sendo corrigidos erros de escrita. Excepcionalmente, estas poderão vir acompanhadas por comentários dos próprios autores após a interpretação do contexto na qual foram escritas ou ditas.

Espera-se inserir o leitor no ambiente encontrado pelos autores em sala de aula, colocando-os cada vez mais a dentro do cotidiano escolar em que foi aplicado o projeto de pesquisa. Visto as diferenças de clientela escolar, as quais ocorrem até dentro do mesmo colégio, a reprodução na íntegra das respostas dos educandos pode levar a uma melhor compreensão dos resultados da atividade.

5.1 ANÁLISE DOS QUESTIONÁRIOS INICIAIS

5.1.1 Educandos do 1º ano do Ensino Médio

A partir das respostas obtidas dos educandos do 1º ano do E. M. sobre o questionário 1 (Figura 1) foi constatado que 20,0% dos educandos afirmaram ter conhecimento prévio sobre o conceito de ligação química (a); enquanto que, 80,0% dos educandos afirmaram não ter conhecimento prévio sobre o conceito de ligação química (b).

Esse resultado sugere que a aprendizagem de um conceito abstrato como a ligação química pode estar relacionado ao ambiente ensino-aprendizagem dentro da sala de aula; ao acesso ao conhecimento por meio digital ou não; ou ao estímulo da família por meio de livros ou discussões. Outro ponto, para os educandos do 1º ano do E. M. não existe preparação sobre conteúdos mais profundos da Química ao final do ensino fundamental.

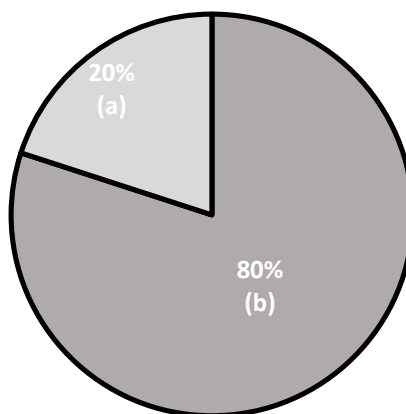


Figura 1. Resultado da questão 01 do primeiro questionário aplicado aos educandos do 1º ano do E. M. (a) Afirmaram ter conhecimento sobre a ligação química. (b) Afirmaram não ter conhecimento sobre a ligação química.

Uma amostra das respostas escritas pelos educandos do 1º ano do E. M. sobre a questão 01 do primeiro questionário está representada na Tabela 04. Observa-se que alguns educandos relacionam o conceito de ligação química com um conceito macroscópico de quantidade de matéria, isto é, a ligação química teria uma conexão com o conceito de mistura (educandos “B1”, “D1” e “E1”).

Todavia, os educandos “A1” e “C1” comentaram a respeito da representação de “juntar coisas” como forma de representar a união entre partes para formar uma entidade mais complexa. Os educandos apresentaram uma interpretação relacionada ao conceito de união de quantidades macroscópicas como substâncias que sofrem modificações.

O educando “F1” mostrou uma visão totalmente abstrata sobre o conceito comentando sobre a associação com explosões e surgimento de coisas, mostrando como a visão de mistura de coisas macroscópicas e passíveis de toque tem predominado na visão do educando. Tais relatos tendem a mostrar como a primeira informação a respeito da ligação química é uma visão macroscópica da matéria.

Esse fato é comum devido à forma de abordagem pedagógica, isto é, a abordagem está relacionada a uma aprendizagem por similaridade entre o conceito microscópico e uma atribuição na visão macroscópica, ocasionando interpretações conceituais que não são corrigidas posteriormente. Bachelard (2005, p. 23) apresenta uma situação de surpresa, que afirma não entender como professores não conseguem entender como seus educandos não entendem seus conteúdos.

Precisamos entender que não devemos trabalhar apenas na repetição do conteúdo e exercícios para buscar a efetivação da aprendizagem, mas, que também devemos propor e incentivar a novas formas de estudo, principalmente frente ao microscópico.

TABELA 4. AMOSTRA DAS CONCEPÇÕES APRESENTADAS PELOS EDUCANDOS DO 1º ANO A RESPEITO DO QUESTIONÁRIO 1

EDUCANDO	RESPOSTA
“A1”	<i>“Ligação química deve ser juntar uma coisa com outra, tipo grudar (...)”</i>
“B1”	<i>“Quando você que faz um material você tem que misturar os produtos. Quando você mistura você liga.”</i>
“C1”	<i>“A ligação química é uma reação química, onde se juntam as substancia.”</i>
“D1”	<i>“Deve ser um tipo de mistura, uma experiência química.”</i>
“E1”	<i>“pode ser que seja a junção de coisas, tipo de substâncias diferentes”</i>
“F1”	<i>“deve ser aquelas coisas louca que aparecem nos desenhos, que explodem tudo. Você mistura um com o outro e surgem as coisas.”</i>

Fonte: O Autor.

As palavras “coisas”, “mistura”, “substâncias” são expressadas em grande parte das respostas dos educandos. Nota-se, segundo o contexto nas quais foram escritas, que elas são referidas ao conceito do “átomo”, o qual ainda não havia sido trabalhado com esses educandos.

Mortimer, Chagas e Alvarenga (1998, p. 8) em um estudo sobre linguagem científica versus linguagem comum, nos retratam que

A linguagem científica tem características próprias que a distinguem da linguagem comum. Essas características não foram inventadas em algum momento determinado. Ao contrário, foram sendo estabelecidas ao longo do desenvolvimento científico, como forma de registrar e ampliar o conhecimento. Essas características, muitas vezes, tornam a linguagem científica estranha e difícil para os educandos. Reconhecer essas diferenças implica em admitir que a aprendizagem da ciência é inseparável da aprendizagem da linguagem científica.

A partir dessa análise, se faz ainda mais importante o papel do professor como mediador na construção do conhecimento pelos educandos, devendo este estar atento a linguagem dos sujeitos de ensino, sendo ágil nas intervenções que se fizerem necessárias assim que a linguagem comum levar a interpretações errôneas. Assim, não caracterizar-se-á a linguagem comum como “sempre errada”, mas como aquela que poderá ser modificada com o melhor aprendizado do conteúdo de estudo.

A forma reducionista de apresentação da ligação química é muito tradicional nos métodos de ensino sobre estrutura molecular, o princípio de que a ligação química é simplesmente uma união entre átomos, à primeira vista, o conceito está simples e satisfatoriamente resolvido; todavia, esta facilidade não apresenta ao educando as diferenças

entre as propriedades das moléculas e os átomos separados, ou seja, a ligação química não é simplesmente ou somente uma união entre átomos. A ligação química é um conceito totalmente novo e independente, sendo base para todo o conhecimento químico e, atribui propriedades únicas e importantes para as moléculas, não tendo nenhuma relação com o sistema atômico.

Uma visão macroscópica da matéria é repassada ao final do ensino fundamental de modo a introduzir o conceito de que uma substância aparentemente homogênea possui uma estrutura microscópica mais complexa; todavia, é importante que o conceito de transformação da matéria macroscópica tenha uma interpretação/apresentação microscópica.

Novamente sobre as linguagens, também não se deve considerar que apenas o fato dos educandos utilizarem a linguagem científica seja, unicamente, um demonstrativo de aprendizagem. É preciso ficar atento a memorização de conceitos por estes e, conseqüentemente, apenas a reprodução dos mesmos. Todavia, a introdução da linguagem científica dentro de uma discussão mais aprofundada, pode ser de fato um indicativo de que a eficácia da metodologia de ensino tenha atingido os objetivos propostos.

5.1.2 Educandos do 2º ano do Ensino Médio

A Figura 2 mostra o percentual de respostas dos educandos do 2º ano do E. M. sobre o questionário 2. O questionário foi construído para avaliar a experiência preliminar do educando em relação ao conceito da ligação química. Os resultados mostram que 25,0% dos educandos responderam ter conhecimento sobre esse conceito; enquanto que, 75,0% responderam não ter conhecimento sobre o conceito.

A partir de tais respostas observa-se que esses educandos apresentam um nível de conhecimento insuficiente na abordagem do tema, por exemplo, os educandos não descrevem de modo mais completo o conceito de ligação química em relação ao avaliado pelo questionário 1 aplicado aos educandos do 1º ano; eles citam a classificação da ligação química em iônica, covalente e metálica sem um conhecimento a respeito de como o elétron é compartilhado ou se existem semelhanças entre as ligações químicas, como por exemplo, a densidade eletrônica.

Esse resultado também mostra uma diferença de 5,0% nas respostas afirmativas sobre a ligação química do 1º ao 2º ano do E. M.

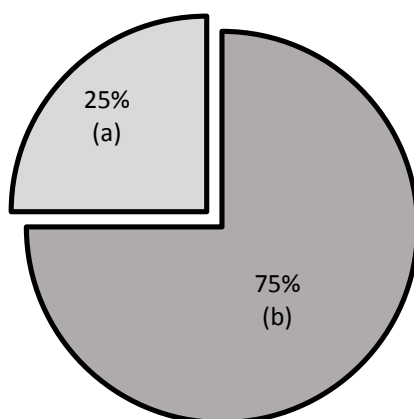


Figura 2. Resultado sobre a questão 01 do questionário 2 aplicado aos educandos do 1º ano do E. M. (a) Afirmaram ter conhecimento sobre a ligação química. (b) Afirmaram não ter conhecimento sobre a ligação química.

A Figura 3 apresenta os resultados da análise realizada somente sobre o percentual de 75% do questionário 2 (Figura 2). Nota-se que o percentual de educandos do 2º ano do E.M. que responderam não ter conhecimento e não conseguiram descrever a ligação química foi de 66,0 %; enquanto que, a quantidade de educandos que afirmaram não ter conhecimento, mas, tentaram descrever sobre ligações químicas foi de 44,0 %.

É relevante salientar que essa análise mostra como o grau de descrição ou abstração a respeito da ligação química é importante. Os educandos que não conseguiram descrever a ligação química mostram uma dificuldade em conservar o conceito ao longo do tempo, sendo importante um aumento no incentivo do uso dos termos mais técnicos para evitar dúvidas ou pouca fixação do conceito.

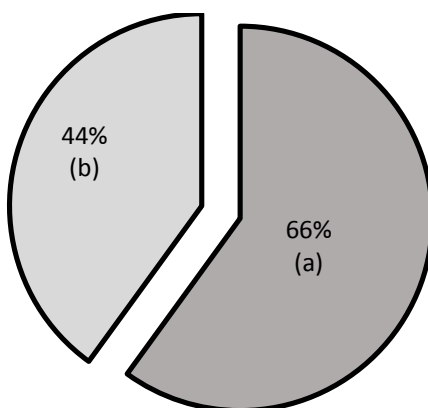


Figura 3. Resultado sobre o percentual de 75% do questionário 2 aplicado aos educandos do 2º ano do E. M. (a) Afirmaram não ter conhecimento e não tentaram descrever a ligação química. (b) Afirmaram não ter conhecimento e tentaram descrever a ligação química.

A mesma análise de conteúdo aplicada ao questionário dos educandos do 1º ano foi também aplicada ao do 2º ano (MORAES, 1999). Contrapondo as perguntas 01, 02 e 03 do questionário inicial do 1º ano com a pergunta 01 do questionário do 2º ano, quando analisamos as concepções desses educandos, sem fazer a separação do 1º e 2º ano, encontramos respostas bastante semelhantes.

As respostas organizadas na Tabela 05 mostram algumas concepções apresentadas pelos educandos do 2º ano do E.M. sobre o tema ligações químicas; pergunta 01 do questionário 2. É importante uma análise crítica dessas concepções porque é verificado a consistência das representações macroscópicas pelos educandos, não descrevendo os conceitos mais atuais e técnicos do tema da ligação química.

TABELA 5. RESPOSTAS APRESENTADAS PELOS EDUCANDOS DO 2º ANO PARA A PERGUNTA 01: 1) UM DOS CONTEÚDOS ESTUDADOS NO 1º ANO DO ENSINO MÉDIO SÃO AS LIGAÇÕES QUÍMICAS. O QUE VOCÊ LEMBRA SOBRE LIGAÇÕES QUÍMICAS (SE POSSÍVEL CITE EXEMPLOS, CONCEITOS E QUAISQUER INFORMAÇÕES

EDUCANDO	RESPOSTA
EDUCANDO “A2”	“liga uma substância a outra para formar outra”
EDUCANDO “B2”	“onde as partículas se unem”
EDUCANDO “C2”	“você junta as coisinhas.”
EDUCANDO “D2”	“lembro que são quando as bolinhas são ligadas, tipo juntadas.”
EDUCANDO “E2”	“quando você pega e junta produtos formando outros produtos”
EDUCANDO “F2”	“ligações químicas são ligações que são feitas para formar algum tipo de substância química”

Fonte: O autor

Fernandes e Marcondes (2006) nos trazem que o tema ligação química por ser abstrato, longe das experiências dos educandos, tem grande potencial para gerar concepções equivocadas por parte dos estudantes.

Até mesmo o grupo de educandos que respondeu saber sobre ligações químicas ao tentarem descrevê-las não foram além de citar os tipos de ligação; iônica, covalente e metálica. Em nenhuma das explicações, até mesmo dos educandos que afirmaram saber sobre o tema, se encontraram argumentações que envolvessem conceitos mais aprofundados, relatando por exemplo o abaixamento da energia pela ligação química, ou até mesmo o comportamento ondulatório do elétron na ligação. Essas concepções mostram que o conteúdo não foi trabalhado abordando conceitos quânticos, reforçando o que foi discutido anteriormente; o uso de metodologia simplificada para o ensino deste tema.

5.2 APLICAÇÃO DA PROPOSTA DE ENSINO

5.2.1 Primeira etapa: introdução aos modelos atômicos

De posse dessas informações se iniciou a aplicação da proposta com os educandos do 1º ano, fazendo uma síntese integradora com os modelos atômicos, bem como a distribuição eletrônica em camadas. Utilizou-se quatro horas/aula com cinquenta minutos cada nesta etapa.

Este ponto inicial teve como objetivo saber quais eram as concepções dos educandos em relação aos átomos e suas diferentes propriedades, tais como: níveis e subníveis de energia, orbitais atômicos, distribuição e propriedades do elétron, dualidade onda partícula, entre outras.

Como já citado anteriormente, a elaboração do material didático teve como base livros voltados ao ensino superior e artigos científicos, com esses conteúdos adaptados a linguagem dos educandos. Assim também se formulou o material de acordo com o objetivo da proposta de ensino, a qual não pretende diretamente trazer a esses educandos toda a bagagem de discussões utilizadas no ensino superior, nem tampouco o nível de estudo a estes aplicado.

Mesmo assim a necessidade de discussão do conteúdo deve estar presente no ambiente escolar do ensino médio, para não transformarmos nossos educandos em meros espectadores do ensino e sim em agentes atuantes na construção do mesmo. Em consenso com Mortimer (1995), o mais importante que o atomismo elementar é a construção da própria noção de modelo, que será de muita utilidade no estudo de modelos atômicos mais avançados e de outros modelos, como o de ligações químicas.

Neste contexto Milaré (2007) expressa que

As ligações químicas, no entanto, não fazem parte de reflexões comuns do dia-a-dia. Seus modelos são desenvolvidos a partir dos modelos atômicos. O atomismo, por sua vez, pode compreender diversas ideias, desde aquelas caracterizadas pela noção de que a matéria é contínua ou até pelas teorias da Química contemporânea. Deste modo, as concepções alternativas sobre este tema relacionam-se com as ideias sobre o átomo.

Durante essas aulas iniciais, ao tratar dos modelos atômicos, os educandos tiveram de lançar suas concepções sobre o que seria um “átomo”. A partir de então se trabalhou os modelos de Dalton, Thomson, Rutherford e, por final, o modelo Rutherford-Bohr, enfatizando os níveis e subníveis de energia e o comportamento ondulatório proposto por De Broglie (ATKINS, JONES, 2006). Desta forma, visamos mostrar aos educandos que o átomo não foi descoberto e sim que a sua teoria foi construída (MELO, NETO, 2012).

Pode parecer um tanto avançado para o ensino médio a discussão de conceitos como os de níveis de energia e do comportamento ondulatório do elétron. Entretanto esses são

conceitos aplicados em vestibulares e exames anuais das principais universidades públicas da região, e, com a inserção destes conceitos nas discussões e estudos por parte dos educandos, além de objetivarmos um melhor entendimento quanto ao conteúdo estamos também, direta ou indiretamente, preparando estes educandos para um possível melhor desempenho nessas avaliações.

Acerca dos modelos atômicos e das dificuldades no ensino e aprendizagem destes, Melo e Neto (2012) nos trazem que

Especificamente no ensino de química, não há uma preocupação com a discussão de como os modelos científicos são construídos e sua importância na compreensão da construção do conhecimento. No máximo, percebe-se uma abordagem equivocada quando da apresentação de modelos atômicos. No entanto, tal discussão é fundamental, pois a química está baseada em modelos, não somente os atômicos, mas também os moleculares, os de reações, os matemáticos e essa ideia não é contemplada pelo professor, pela maioria dos livros didáticos e, conseqüentemente, pelo educando.

Isso reforça ainda mais a necessidade de discussão fundamentada por completo no que se trata de modelos atômicos, afinal é a partir de conceitos proveniente dos mesmos que as aulas sobre ligações químicas podem ser melhor baseadas. De nada adiantaria ensinarmos o modelo de átomo como se fosse uma esfera e posteriormente discutir a ligação química baseada em energia, ou até mesmo na contagem de elétrons, como é rotineiramente ensinado.

5.2.2 Segunda etapa: primeiras representações de moléculas

Em seguida com a utilização de um kit de modelo molecular se representou a cela unitária do O_2 , C_2H_2 , CO , N_2 , além da discussão sobre como ocorre a formação destas e de diversas outras substâncias num contexto geral na concepção dos próprios educandos. As moléculas descritas acima também foram utilizadas nos cálculos manuais e computacionais na sequência da proposta utilizando dos programas citados.

Ao exemplificar essas substâncias com exemplos do cotidiano, se indagou os educandos sobre a forma como essas poderiam ser formadas a partir dos átomos, do qual os modelos foram estudados na etapa passada. Introduzia-se assim na atividade de ensino proposta o conceito de ligações químicas. Como já haviam sido discutidas as questões de níveis de energia, energias de ionização e afinidade eletrônica na etapa anterior, ao representar as moléculas com o kit de modelagem molecular se teve a possibilidade de apresentar aos educandos umas das formas de representação das ligações químicas.

Por parte, essa representação já é avançada ao nível de conhecimento desses educandos, tendo em vista que os mesmos necessitam interpretar o que significa cada esfera e

o porquê de existir uma, duas ou três conexões entre essas esferas. Mas, assim se espera difundir justamente esse tipo de indagação para os educandos, lançando a curiosidade em descobrir a função de cada peça na montagem representacional de uma molécula.



Figura 4. Kit molecular utilizado na aplicação da proposta

Fonte: O autor.

Durante essa etapa de discussão, algumas concepções referentes as ligações químicas ganharam grande aceitação pelos demais educandos, como a dita pelo educando C1 “*é um jeito de fazer ligações de produtos diferentes que se transformam em outros produtos*” e pelo Educando D1 “*ligação ocorre entre substancias que são misturadas e quando misturadas são ligadas*”. No decorrer serão apresentadas as concepções destes mesmos educandos após a aplicação da proposta.

Após essa discussão, introduziu-se os conceitos de ligação química pela teoria dos orbitais moleculares, mais especificamente pelo Método de Hückel (descrito no item 2.4). Vale ressaltar que foram apresentadas as equações do método já deduzidas e com suas devidas aproximações, adequando a linguagem e o material utilizado ao nível de compreensão dos educandos, uma vez que as essas deduções exigem um nível de conhecimento matemático elevado por parte dos educandos, o que não é a realidade neste caso. Para tanto, utilizou-se da equação $x = \alpha - E/\beta$.

Trabalhou-se manualmente as moléculas apresentadas no tópico 2.4.1, além dos cálculos através dos programas computacionais. No decorrer da atividade houve a necessidade do ensino de matrizes polinomiais aos educandos, visto que esse conteúdo é trabalhado apenas

no 2º ano do ensino médio. Assim sendo, sem o ensino deste conteúdo, a sequência da atividade com o Método Simples de Hückel não seria possível.

Ressalta-se que o conteúdo referente a matriz não foi trabalhado na forma aprofundada, sendo visadas as matrizes 2x2 e 3x3, sendo que as demais matrizes de tamanhos maiores, apesar da maior complexidade de resolução, partem do mesmo princípio de interpretação quanto ao método. Outras quatro 4 horas/aula foram utilizadas nesta etapa.

5.2.2.1 Aplicação do Método Simples de Hückel

Apesar de ter sido utilizado o Método Simples de Hückel e deste método ter sido formulado para tratar compostos orgânicos com duplas ligações, um dos intuitos da proposta foi discutir os níveis de energia em uma ligação química, com tratamento do elétron com comportamento de onda durante a ligação. Além disso, pôde-se discutir as densidades eletrônicas, as energias de ressonância para as diversas moléculas testadas e também a ordem de ligação nas moléculas; essas tendo por base os dados apresentados pelo programa *Huckel 3.1*.

Seguindo a aplicação da proposta, solicitou-se aos educandos que calculassem, utilizando ambos os programas computacionais, os valores dos níveis de energia para cinco moléculas pré-selecionadas e que interpretassem os valores obtidos para verificar quais seriam as mais estáveis. As moléculas selecionadas foram O₂, C₂H₂, CO, N₂ e C₃H₆.

Aproveitando o entusiasmo expressado pelos educandos com o uso dos programas computacionais, pediu-se para que eles citassem substâncias comuns ao seu cotidiano e, aproveitando que os computadores tinham acesso à internet, que eles pesquisassem a fórmula das cinco mais citadas e realizassem os cálculos para estas. Nesta etapa também se utilizou de quatro 4 horas/aula.

5.3 ANÁLISE DAS CONCEPÇÕES POSTERIORES DOS EDUCANDOS DO 1º ANO E AVALIAÇÕES

As concepções posteriores que virão a ser apresentadas partem do questionário final aplicado aos educandos e de trechos dos relatos dos próprios durante o desenvolvimento da atividade. Esses relatos foram transcritos, sempre que possível, durante a atividade, já que a direção do colégio orientou a não utilizar de aparelhos para gravar a conversa dos educandos.

5.3.1 Questionário final aplicado aos educandos

Nota-se na primeira pergunta (Tabela 02), que não foi exigido a linguagem científica na descrição do conceito de ligação química pelos educandos, dando assim maior liberdade para que estes pudessem descrevê-la. Uma das finalidades dessa “liberdade” foi justamente verificar se a linguagem científica passou a fazer parte do vocabulário dos educandos, se apresentando como uma das possíveis evidências da funcionalidade da proposta.

Anderson e Renstron (1986) com citam Rosa e Schnetzler (1998) nos apresentam que a maioria dos educandos, mesmo após terem aula de transformações químicas, não empregam conceitos de átomos e moléculas em seus raciocínios. Assim, com a liberdade de escolha da linguagem escrita, se esta será informal ou formal (propriamente científica), se espera obter resultados mais fiéis sobre a eficácia do projeto de ensino proposto, já que a linguagem científica foi amplamente trabalhada nos textos entregues aos educandos e na linguagem utilizada pelo professor; sempre que possível.

5.3.2 Análise de conteúdo das respostas expressas no questionário final e no decorrer das atividades

Após análise de conteúdo das respostas do questionário e dos relatos dos educandos (MORAES, 1999), destacam-se algumas concepções:

TABELA 6. CONCEPÇÕES POSTERIORES À APRESENTAÇÃO DA METODOLOGIA APLICADA COM O PROGRAMA HÜCKEL 3.1 APRESENTADAS PELOS EDUCANDOS DO 1º ANO DO E.M. REALIZADA EM AVALIAÇÃO BIMESTRAL

EDUCANDO	RESPOSTAS
“C1”	<i>“[...] a ligação química é o resultado de energia da união de todos os átomos de uma substância [...]. quanto menos partículas no anti ligante, mais forte a ligação.”</i>
“D1”	<i>“[...] se o elétron fosse uma partícula o que seguraria eles na ligação química se eles fazem a ligação química? Como onda é mais fácil imaginar.”</i>
“E1”	<i>“a interação dos elétrons de dois átomos, os que ficam mais longe do núcleo, cria uma nova região onde não é possível definir qual é qual, apenas descobrir mais perto de quem eles estão [...]”</i>
“F1”	<i>“é estranho ver numa substância grande que quando tem duas ligações entre os átomos ela se espalha por toda molécula [...], ela altera a ressonância, sem tem uma é um valor, se tem duas é outro valor.”</i>

Fonte: O Autor.

Nestas concepções, de acordo com o decorrer da aula, se verifica que o educando “E1” relaciona o elétron na ligação química com o Princípio da Incerteza de Heisenberg que foi citado no material escrito distribuído a eles e com a explicação oral. Para o educando “F1”, sua

explicação relaciona-se com os cálculos que o mesmo realizou para a estrutura do 2-hexeno e do hexa-1,3-dieno, onde o mesmo relatou ter visto estas estruturas quando pesquisou a fórmula estrutural da gasolina (mesmo não sendo a fórmula da gasolina).

Pela análise destas concepções e pelo que apresentam Beber e Maldaner (2010),

A linguagem assume uma posição de destaque nas interações intersubjetivas intencionais, tão desejadas para o ambiente escolar, porque a aprendizagem é um processo que se encontra em constante construção e reconstrução e ocorre por meio das interações entre os sujeitos, sendo proporcionalmente intensificada conforme as assimetrias de conhecimentos.

Inserir conceitos científicos e teorias mais avançadas, mas que ainda não estejam presentes no material didático fornecido ao professor, deixa a tarefa de preparar a aula mais trabalhosa. Mesmo com essa dificuldade, após a aplicação deste projeto teve-se a certeza de que o resultado final compensa o esforço dedicado. Afinal, é também papel do professor zelar por repassar aos estudantes os conteúdos atualizados, sendo que nem sempre os livros didáticos distribuídos as escolas acompanham estas evoluções, não apenas científicas, mas num contexto geral (BEBER e MALDANER, 2010).

5.3.3 Análise das avaliações aplicadas aos educandos do 1º ano

As avaliações bimestrais também foram analisadas, levando em considerações as questões que cobravam os conceitos referentes às ligações químicas. Tais análises são vistas como necessárias, tendo em vista que a grande maioria dos educandos realizará exames nas universidades estaduais próximas a sua cidade; tais como: Universidade Estadual de Ponta Grossa e Unicentro, em Ponta Grossa e Guarapuava, respectivamente.

Desta forma, não se visa apenas o ensino de um conteúdo isoladamente mas a sua aplicação em demais conteúdos inerentes ao mesmo. Como apresentado no decorrer da proposta, ao se trabalhar o ensino das Ligações Químicas foi necessário o trabalho com os modelos atômicos e matrizes, ambos muito cobrados nas avaliações realizadas por essas universidades.

Assim sendo, em conjunto com duas professoras de Química do mesmo colégio em que foi aplicado a proposta de ensino, se elaborou uma avaliação cobrando conceitos e interpretações referentes aos modelos atômicos e ligações químicas. A elaboração em conjunto com as professoras foi justamente para definirmos parâmetros que poderiam ser utilizados em ambas as turmas. De fato, não se poderia questionar um educando não participante do projeto

com questões referentes ao Método de Hückel, tampouco um educando participante do projeto com questões envolvendo a “regra do octeto”, a qual não foi exemplificada durante a atividade.

TABELA 7. QUESTIONÁRIO FINAL (QUESTIONÁRIO 3) APLICADOS AOS EDUCANDOS DO 1º ANO

Questões
1) Apresente os conceitos, de forma simplificada, referentes aos modelos atômicos de Dalton, Thomson, Rutherford e Rutherford-Bohr.
2) Em relação as propriedades e partículas desses modelos atômicos, apresente conceitos em relação aos elétrons (Exceto no modelo de Dalton).
3) A partir dos modelos atômicos estudados, relacione a teoria de algum desses modelos com a Ligação Química. Fique à vontade para expressar quaisquer opiniões e interpretações, se necessário utilizando de exemplos.
4) Nessa questão você deve discutir, de forma bastante ampla, o conceito de ligação química. Não necessariamente você precisa relacionar com algum modelo atômico.

Fonte: O Autor.

Nota-se nas questões supra descritas que em nenhuma delas ocorre a necessidade dos educandos apresentarem conceitos específicos de Ligações Químicas; como iônica, covalente e metálica. Isso se deu pelo fato de que nas turmas em que foi aplicado o projeto de ensino, a definição desses conceitos havia ocorrido apenas uma semana antes da aplicação da atividade, enquanto nas demais turmas avaliadas, esses conceitos já estavam sendo discutidos quatro semanas antes.

Tentou-se a possibilidade de adiar a aplicação dessas avaliações com a finalidade de serem trabalhados esses conceitos nas turmas do projeto, mas não houve a concordância das demais professoras, tendo em vista que havia a necessidade do encerramento das atividades avaliativas para o fechamento das notas bimestrais. Por esse motivo os conceitos cobrados para as ligações químicas foram para sua forma geral, sem especificar um tipo específico de ligação.

5.3.3.1 Avaliações dos educandos participantes do projeto e avaliações dos educandos de turmas distintas ao projeto

Apresentar-se-á um comparativo entre as descrições apresentadas entre os educandos que expuseram concepções mais próximas ao esperado pelos professores, sendo que cada professor ficou responsável por selecionar as concepções nas turmas em que leciona. As

descrições serão apresentadas sem a correção de erros. As concepções apresentadas na tabela a seguir são em torno da questão 4.

TABELA 8. CONCEPÇÕES APRESENTADAS PELOS EDUCANDOS DO 1º ANO NA QUESTÃO 04 DA AVALIAÇÃO BIMESTRAL APLICADA

EDUCANDOS PARTICIPANTES DA PROPOSTA (TP)	EDUCANDOS NÃO PARTICIPANTES. Professor 01 (P1)	EDUCANDOS NÃO PARTICIPANTES. Professor 02 (P2)
<i>“ligação química nos permite entender a formação de coisas, e esta relacionada com a junção de elétrons que na verdade são ondas [...] Quando os átomos se unem a energia cai”</i>	<i>“a ligação química é quando os átomos interagem com outros átomos, aí para se estabilizar eles compartilham elétrons até ficarem com 8 na ultima camada”</i>	<i>“Uma ligação química é quando os átomos se juntam através de suas partículas. Ou doam ou recebem elétrons. Tem também os átomos que compartilham.”</i>
<i>“[...] nos mostra a interação dos átomos através dos elétrons. Quanto mais elétrons tiverem entre os átomos menor é a distância entre eles. Mas os elétrons não ficam só entre os dois.”</i>	<i>“A ligação química obedece a regra dos oito e também a lista da eletronegatividade. Quem tá na lista faz ligação iônica com quem não está. Se os dois estiverem a ligação será covalente.”</i>	<i>“Nem todos os átomos são estáveis. Tem os gases nobres que não precisam fazer ligações. Os demais necessitam se estabilizar trocando ou compartilhando elétrons”</i>

Fonte: O autor.

Na análise de conteúdo (MORAES, 1999) se verificou a utilização da linguagem científica em ambas as turmas, porém em maior percentual nos educandos da turma participante do projeto.

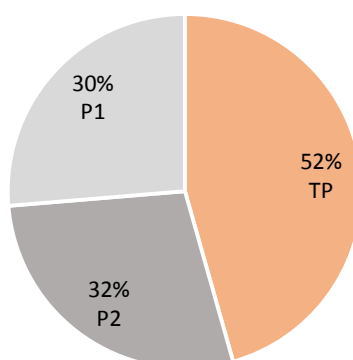


Figura 5. Percentual de educandos, por turma, que utilizou de linguagem científica ao expressar suas respostas em relação a questão 04 da avaliação bimestral. Professor 01 (P1), professor 02 (P2) e turma participante do projeto (TP).

Para esses dados se levou em conta a utilização dos conceitos científicos nas respostas, não necessariamente na integralidade da mesma, mas se os conceitos utilizados foram

fundamentais para a validade da resposta expressada. Mortimer, Chagas e Alvarenga (1998) nos apresentam que a linguagem cotidiana difere da científica justamente por essa última trazer expressões que retratam relações entre os fatos que são apresentados, enquanto na primeira são narrativas, muito mais próximas da fala informal.

Em alguns casos os educandos utilizaram palavras como “átomo”, “ligações químicas”, “energia”, “elétron”, mas de forma totalmente desconexa com o contexto expressado na resposta. Assim, essas não foram consideradas como pertencentes ao grupo que utilizou da linguagem científica.

Um dos exemplos desse tipo de resposta foi expressado pelo educando “J1-Turma não participante da atividade”: *“a ligação química é quando átomos se juntam pra formar outra substância, essa junção é a ligação química. Tem também os eletrôn que ajudam na ligação. Um produto formando outro”*.

Nota-se que apesar de as palavras “ligação química”, “átomo” e “elétron” aparecerem na resposta, elas não efetivam completamente essa resposta para as questões sobre ligações químicas. O elétron, principal responsável pelas ligações químicas, aparece, segundo o expressado pelo educando, como alguém que apenas auxilia para a realização da ligação. Além disso, o educando apresenta concepções bastante semelhantes as colhidas nos questionários iniciais, chamando átomos de “produtos” e/ou de “substâncias”.

De forma distinta, o educando “K1-TP” expressa que: *“a ligação química pode ser entendida como o resultado energético da união de átomos. Quando os elétrons se juntam, a distribuição dessa energia favorece a estabilidade do produto gerado. O número de elétrons interfere na energia”*.

Outro educando, “L1-Turma não participante da atividade”, expressou sua resposta da seguinte forma: *“a ligação química é quando átomos se unem por seus elétrons. Cada átomo participa com a quantidade necessária de elétrons para garantir sua estabilidade”*.

Nota-se que, diferentemente do educando “J1”, os educandos “K1” e “L1” de fato conseguem expressar suas concepções com a linguagem científica efetivando suas respostas. Apesar do educando “K1” não explicar qual foi a interferência na energia, e, do educando “L1” não explicar que estabilidade seria essa que ele relatou, é fácil a compreensão de que ambos estão falando sobre a estabilidade energética das moléculas formadas pelas ligações químicas.

Numa análise mais abrangente sobre as respostas, o educando “K1” cita as matrizes utilizadas na atividade de ensino e a interferência de cada átomo na formação de uma molécula,

enquanto o educando “L1” complementa sua resposta citando a “regra do octeto” ao falar da quantidade de elétrons na ligação química.

As informações desse último parágrafo reforçam ainda mais o proposto na avaliação bimestral, onde não se buscaria conceitos particulares sobre os modelos de ligações químicas, mas sim a conceituação geral.

6 CONCLUSÃO

O confrontamento das concepções prévias dos educandos do 1º ano com as concepções posteriores dos mesmos, indicou que a utilização conjunta dos conceitos oriundos da Mecânica Quântica e dos programas computacionais, contribuiu na construção do conhecimento destes em relação às ligações químicas e até mesmo perante as propriedades do elétron (concepção expressada pelo educando “D” em que o mesmo cita o comportamento dualístico do elétron).

Ao comparar o resultado do questionário final do 1º ano com o questionário dos educandos do 2º ano e as consequentes análises de conteúdo (MORAES, 1999), se verificam resultados mais satisfatórios após aplicação do projeto de ensino, em que os educandos participantes apresentaram resultados mais expressivos quanto ao uso da linguagem científica na descrição de suas concepções e na essência de suas respostas. Portanto, essas características podem dar uma indicação da funcionalidade de aplicação para a proposta de ensino.

Expressamos satisfação também em relação ao percentual de educandos que passaram a utilizar da linguagem científica ao expressarem suas concepções sobre modelos atômicos e, principalmente, ligação química, tendo uma porcentagem duas vezes maior em relação as turmas não participantes da proposta (análise da avaliação bimestral).

Demonstrou-se que a Química Quântica pode ser inserida em conteúdo do ensino médio e não apenas no ensino superior, sendo necessário apenas a adequação da linguagem utilizada pelo professor.

Quanto ao cálculo das matrizes, permitiu a construção do conhecimento em relação as interações dos orbitais atômicos de cada átomo para a formação dos orbitais moleculares, possibilitando a discussão da influência de um determinado átomo sobre outro na molécula.

Ao final, expressamos nossa satisfação com o resultado obtido, principalmente pela utilização de conceitos e interpretações mais aprofundadas por parte dos educandos ao descreverem a ligação química, utilizando, mesmo que de forma indireta, os conceitos provenientes da Mecânica Quântica para expressarem suas concepções.

7 REFERÊNCIAS

ARAUJO NETO, W. **Uma história para filosofia da química**. Disponível em: <<http://www.abq.org.br/rqi/2010/729/RQI-729-pagina18-Uma-Historia-para-a-Filosofia-da-Quimica.pdf>> Acesso em: 31 dez. 2014.

ATKINS, P. JONES, L. **Princípios de química: questionando a vida moderna**. 3ª ed. Bookman. Porto Alegre. 2006. Pág.55.

BACHELARD, G. **A formação do espírito científico: contribuição para uma psicanálise do conhecimento**. Contraponto Editora LTDA. 2005. Pág. 23.

BALEN, O. NETZ, P. A. Application of computer simulation and modelling to the study of gases. **Acta scientiae**. Canoas, v. 7, n. 2, p. 29-39, jul./dez., 2005.

BARBOSA, A. G. H. A estranha e contraditória relação entre os químicos e a química teórica. **Revista Virtual Química**, v. 1, n. 3, p. 212-226, 2009.

BEBER, L. B. C. MALDANER, O. A. Níveis de significação de conceitos e conteúdos escolares químicos no ensino médio: compreensões sobre ligações químicas. **Revista VIDYA**. Vol. 29, N. 2. Santa Maria, 2010. Pág. 97-114.

BUONFIGLIO, A. Uma didática história da química. **ComCiência**, Campinas, n.130, 2011.

CHASSOT, A. **Educação Consciência**. 2ª ed. Edunisc. Santa Cruz do Sul. 2010. Pág. 31. 161-166.

EICHLER, M. DEL PINO, J. C. Carbópolis, um software para educação química. **Revista Química Nova na escola**. n. 11, p. 114-117, 2000.

EICHLER, M. DEL PINO, J. C. Computadores em educação química: estrutura atômica e tabela periódica. **Química Nova**, v. 23, n. 6, p. 835-840, 2000.

FERNANDEZ, C. MARCONDES, M. E. R. Concepções dos estudantes sobre ligações químicas. **Revista Química nova na escola**. Nº 24. 2006. Pág. 20-24.

GALVÃO, D. S. **Estrutura eletrônica de polímeros conjugados**. 1985. 204 f. Dissertação (Instituto de Física) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1985.

HOUSE, J. E. **Fundamentals of Quantum Chemistry**. 2. ed. California: Academic Press, 2003. 291 p.

JENSEN, J. H. **Molecular modeling basics**. New York. CRC Press. 2010. 190 p.

LABARCA, M. BEJARANO, N. EICHLER, M. L. Química e filosofia: rumo a uma frutífera colaboração. **Química Nova**, v. 36, n. 8, p. 256-266, 2013.

LOPES, A. R. C. Conhecimento escolar em Química – Processo de mediação didática da Ciência. **Química Nova**, v. 20, n. 5, p. 563-568, 1997.

MACHADO, B. C. MACHADO, S. P. HERRERA, J. O. M. Orbital molecular: uma proposta para cursos de química geral. **Química nova**, v. 15, n. 3, p. 250-253, 1992.

MELO, M. R. NETO, E. G. L. Dificuldades de Ensino e Aprendizagem dos Modelos Atômicos em Química. **Revista Química Nova Na Escola**, v. 35, n. 2, p. 112-122, 2013.

MILARÉ, T. Ligações Iônica e Covalente: Relações entre as concepções dos estudantes e dos livros de Ciências. In: ENPEC, 6, 2007, Florianópolis. **Anais eletrônicos**. Belo Horizonte: FAE/UFMG, 2007. Disponível em: <http://www.s bq.org.br/eneq/xv/resumos/R0622-2.pdf>. Acesso em: 26 fevereiro 2016.

MORAES, R. Análise de conteúdo. **Revista Educação**, Porto Alegre, v. 22, n. 37, p. 7-32, 1999.

MORTIMER, E.F. Concepções Atomistas dos Estudantes. **Revista Química Nova na Escola**, n. 1, p. 23-26, 1995.

MORTIMER, E. F. Construtivismo, mudança conceitual e Ensino de Ciências: para onde vamos? **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 1, p. 20-39, 1996.

MORTIMER, E. F. Para além das fronteiras da química: relações entre filosofia, psicologia e ensino de química. **Química Nova**, v. 20, n. 2, 1997.

MORTIMER, E. F. CHAGAS, A. N. ALVARENGA, V. T. Linguagem científica VERSUS linguagem comum nas respostas escritas de vestibulandos. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 3, p. 7-19, 1998.

RAMOS, L. C. SILVA, J. L. P. B. Modelo quântico do átomo: uma análise do ensino das noções de *quantum* de uma grandeza e comportamento dual da energia e da matéria. In: Encontro Nacional de Ensino de Química (XVI ENEQ), 16, 2012, Salvador. **Anais eletrônicos**, Salvador: UFBA, 2012. Disponível em: <https://portalseer.ufba.br/index.php/anaiseneq2012/article/download/7400/5215>. Acesso em: 26 maio 2016.

RAUPP, D. SERRANO, A. MARTINS, T. L. C. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química. **Revista Liberato**. Novo Hamburgo, v. 9, n. 12, p. 13-22, jul./dez, 2008.

RIBEIRO, A. A. GRECA, I. M. Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma Revisão de literatura publicada. **Química Nova**. v. 26, n. 4, p. 542-549, 2003.

RIBEIRO, M. A. P. Filosofia e Química: Miscíveis - Quais as implicações da Filosofia da Química para o Ensino de Química? In: XIV Encontro Nacional de Ensino de Química (XIV ENEQ). Curitiba, 2008.

ROSA, M. I. F. P. S. SCHNETZLER, R. P. Sobre a importância do conceito transformação química no processo de aquisição do conhecimento químico. **Revista Química Nova na Escola**. n. 8, p. 31-35, 1998.

SILVA, D. M. F. Considerações Acerca de Fundamentos Filosóficos para a Química e o seu Ensino. In: IX Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, Águas de Lindóia, 2013. **Atas do IX Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências**. Águas de Lindóia: IX ENPEC, 2013.

TOMA, H. E. Ligação Química: Abordagem clássica ou quântica? **Revista Química Nova na Escola**. n.6, p. 8 – 12, Novembro, 1997.

WANG, C. BARROW, L. H. Exploring conceptual frameworks of models of atomic structures and periodic variations, chemical bonding, and molecular shape and polarity: a comparison of undergraduate general chemistry students with high and low levels of content knowledge. **Chem. Educ. Res. Pract.** v. 14, p. 130-146, 2013.

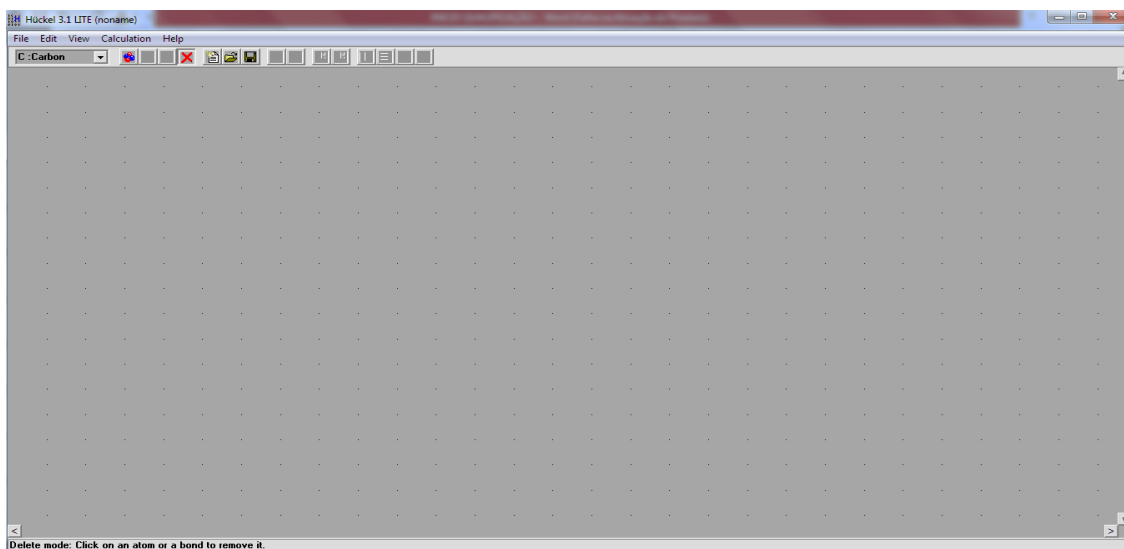
8 ANEXOS

8.1 MATERIAL SUPLEMENTAR PARA UTILIZAÇÃO DOS PROGRAMAS

8.1.1 Material suplementar para o programa *Huckel 3.1*

A seguir, retratar-se-á o que o operador encontrará e/ou terá de realizar quando necessitar fazer alguns cálculos por este programa. Inicialmente, apresenta-se a visão geral do programa:

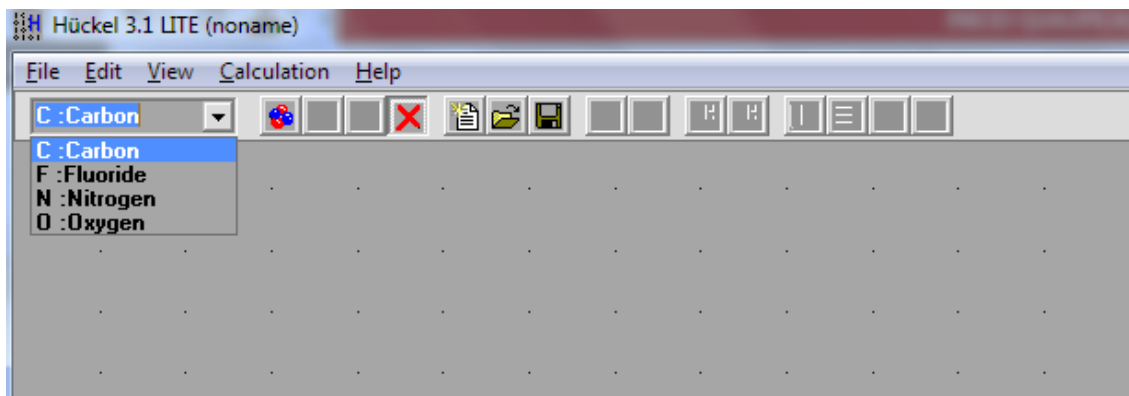
Figura 6. Tela inicial do software Huckel 3.1



Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Como descrito anteriormente, o painel de controle traz as operações possíveis, ambas em inglês. Arquivo (file); editar (edit); visualizar (view); cálculo (calculation) e ajuda (help) são os controles primários encontrados. Além disso, no canto superior esquerdo da tela principal, logo abaixo aos controles primários, é possível selecionar os elementos que formarão a estrutura desejada, como representado pela figura abaixo:

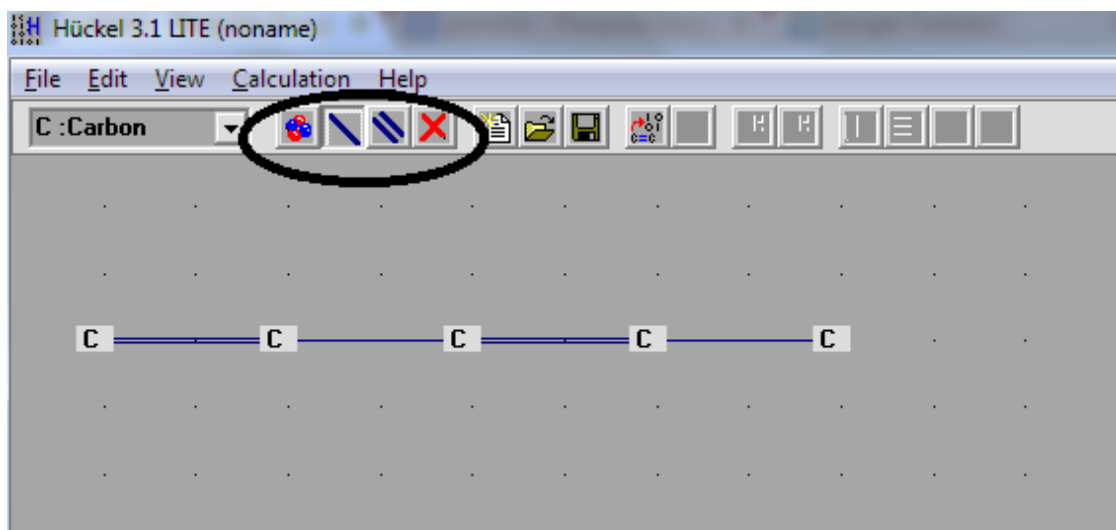
Figura 7. Painel de seleção dos elementos a serem utilizados nos cálculos pelo software Huckel 3.1



Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Na sequência é possível selecionar os átomos desejados e as ligações entre estes, de acordo com o representado na figura abaixo:

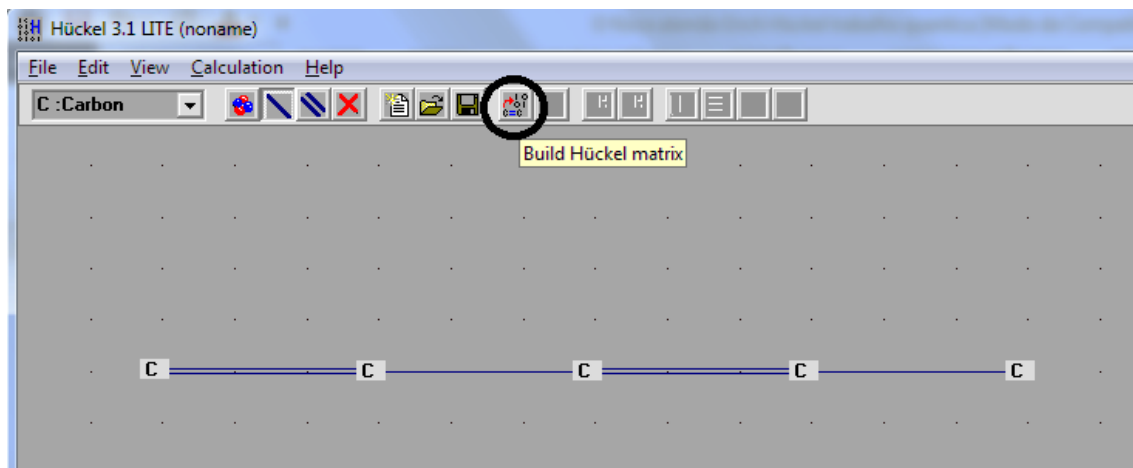
Figura 8. Escolha das ligações entre os átomos da molécula a ser calculada



Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Seleciona-se os elementos que compõem a molécula e o tipo de ligação entre estes átomos. Após, pode-se efetuar os cálculos acessando o comando “CALCULATION” ou indo direto ao comando “construir matriz de Hückel” como indicado na figura abaixo:

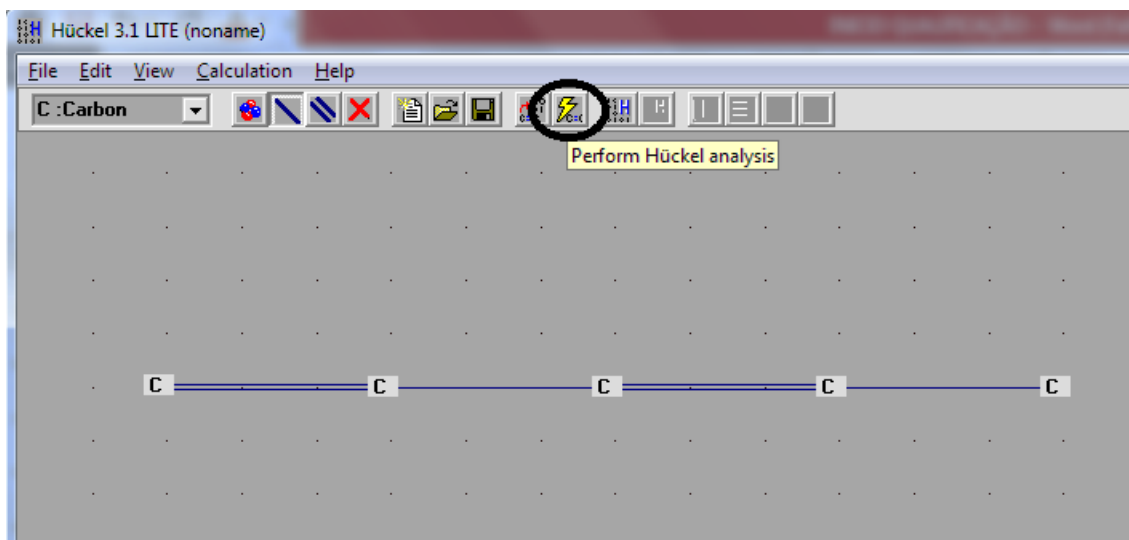
Figura 9. Comando para a construção da matriz



Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Em seguida, seleciona-se “CALCULATION” para poder realizar os cálculos e análises dos resultados expressos pela matriz de Hückel. Outra forma é pelo comando indicado na figura abaixo:

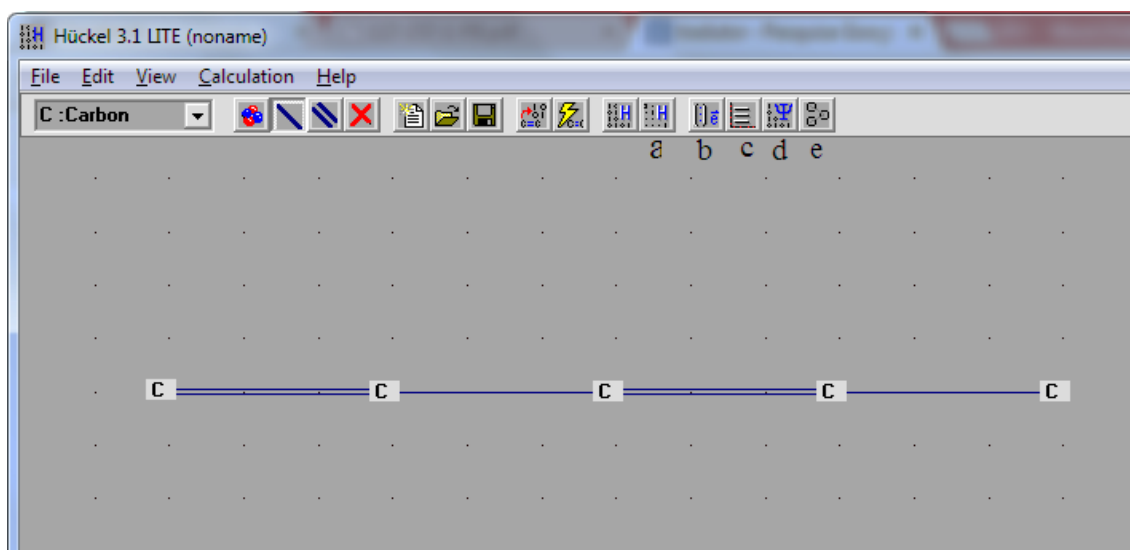
Figura 10. Comando direto para o início dos cálculos de níveis de energia e distribuição de cargas π



Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Para finalizar basta clicar nos comandos para verificar os resultados. Ambos os comandos estão destacados na figura abaixo:

Figura 11. Comando para acesso dos resultados calculados. a) demonstração do Hamiltoniano diagonalizado, b) autovalores, c) diagrama de níveis de energia, d) auto vetores, e) diagrama dos orbitais moleculares.

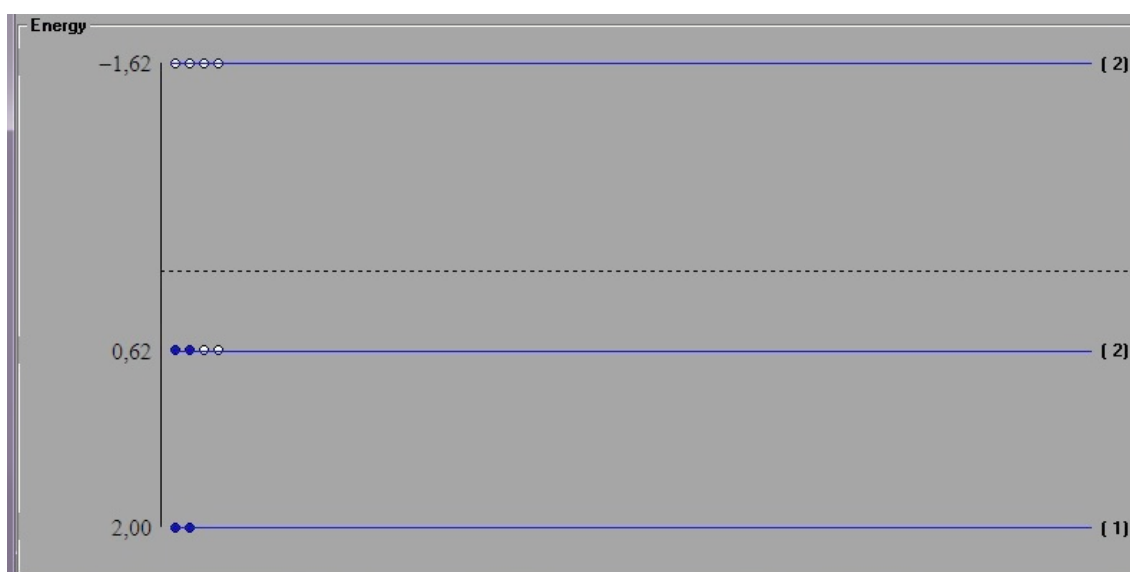


Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

8.1.2 Exemplos de cálculos através do programa *Huckel 3.1* para as moléculas do ciclopenta-1,3-dieno e penta-1,3-dieno

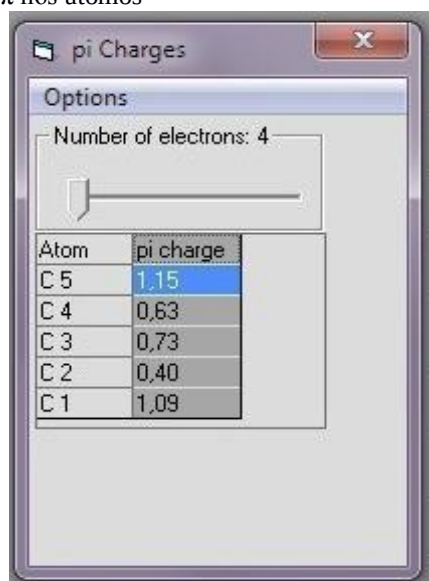
A seguir serão apresentados dois cálculos feitos a partir do programa *Huckel 3.1*; para o ciclopenta-1,3-dieno e para o penta-1,3-dieno (indicar e colocar primeiro as estruturas depois os resultados, juntar as estruturas na figura 1 e assim por diante)

Figura 12. Níveis de energia para o ciclopenta-1,3-dieno e para o penta-1,3-dieno



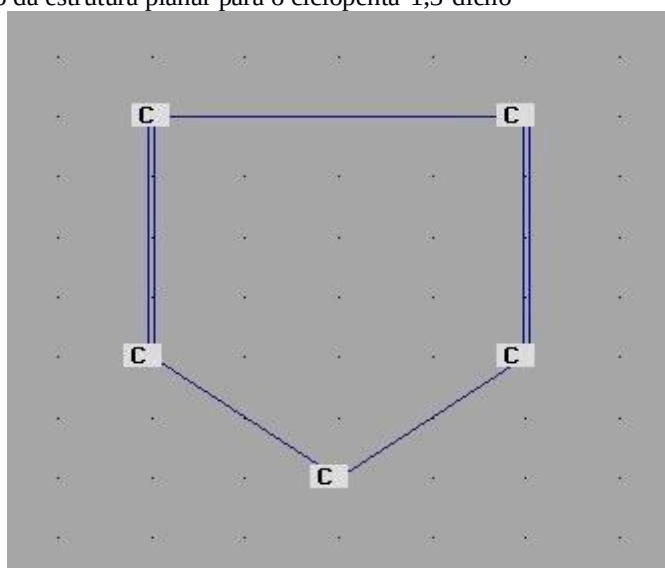
Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Figura 13: Distribuição das cargas π nos átomos



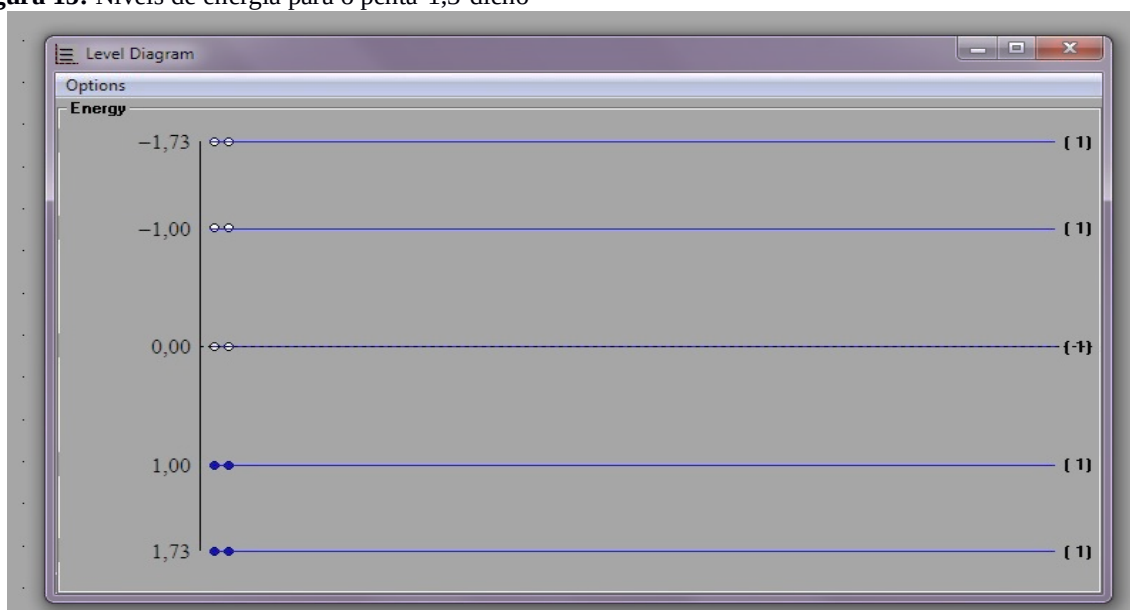
Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Figura 14: Apresentação da estrutura planar para o ciclopenta-1,3-dieno



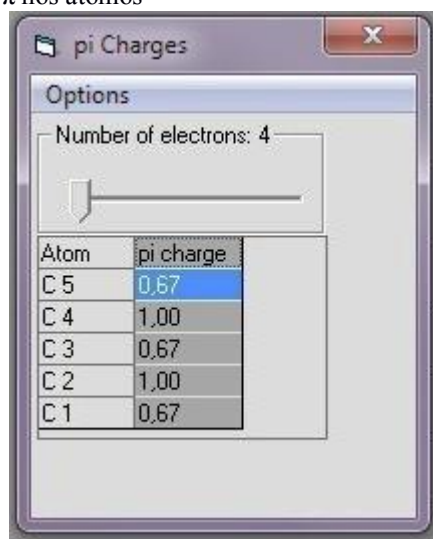
Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Figura 15: Níveis de energia para o penta-1,3-dieno



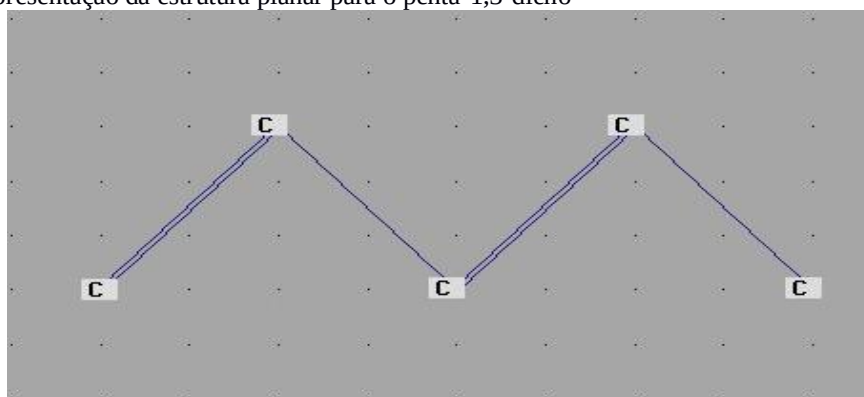
Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Figura 16: Distribuição das cargas π nos átomos



Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

Figura 17: Representação da estrutura planar para o penta-1,3-dieno

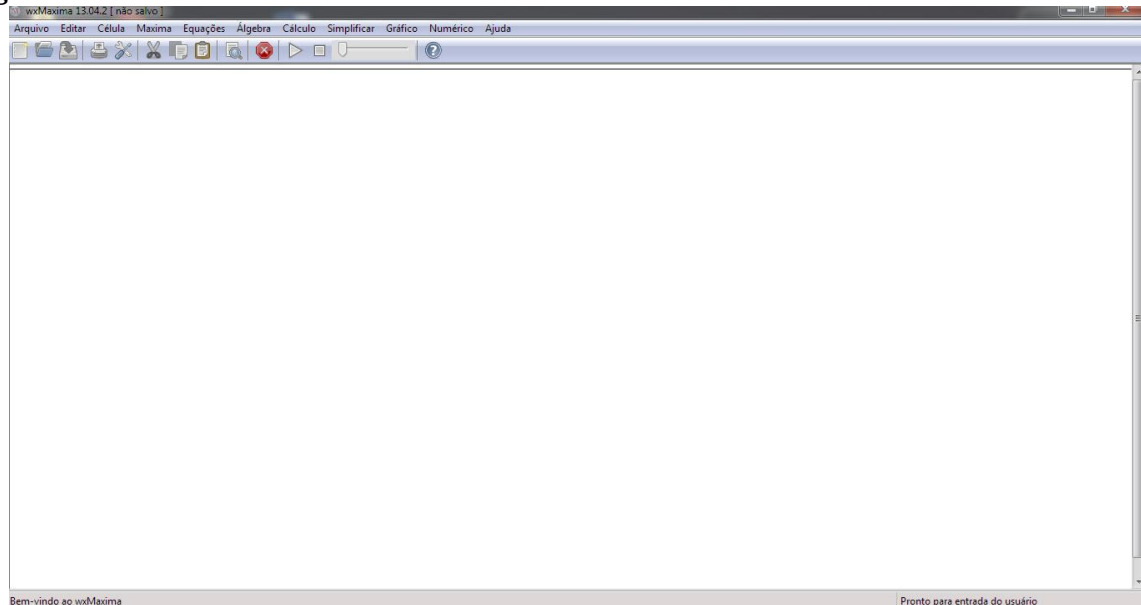


Fonte: <http://www.oraxcel.com/projects/huckel/>

8.1.3 Material suplementar para o *wxMaxima*

A tela principal do *wxMaxima* apresenta o seguinte formato:

Figura 18: Tela inicial do software *wxMaxima*

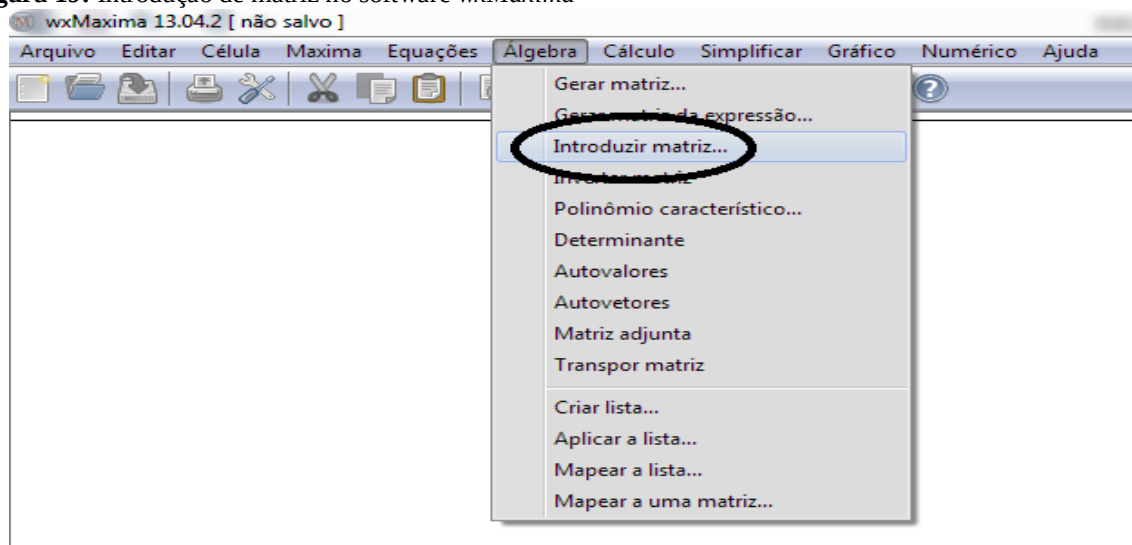


Fonte: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>

Apresentar-se-á na sequência os passos para montagem e operações com matrizes no *wxMaxima*, não sendo abordadas as outras operações possíveis com este software já que a operação com matrizes é o alvo pretendido e que é realizado por este.

O primeiro comando a ser realizado é acessar “Álgebra” e posteriormente “Introduzir matriz”. Lembrando que todas as operações podem ser realizadas pelas linhas de comando, cujo passo a passo está registrado no manual, mas alguns passos são mais fáceis e rápidos acessando através dos comandos na tela principal.

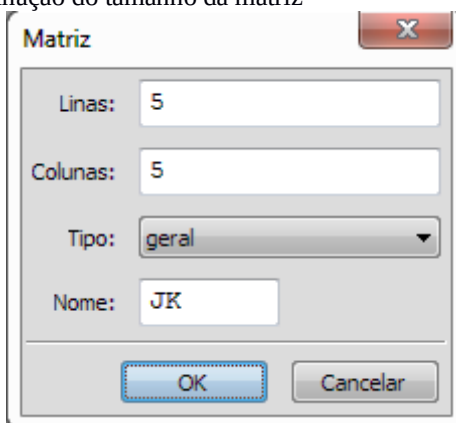
Figura 19: Introdução de matriz no software wxMaxima



Fonte: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>

Neste momento, aparecerá uma janela em que é possível selecionar o tamanho da matriz desejada, e também, onde é possível nomeá-la.

Figura 20: Comando para determinação do tamanho da matriz



Fonte: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>

Em seguida, aparecerá a janela em que é possível fornecer os valores para a matriz. No caso que será apresentado na figura a seguir, representar-se-á a matriz para o penta-1,3-dieno, já realizadas as aproximações propostas pelo Método Simples de Hückel.

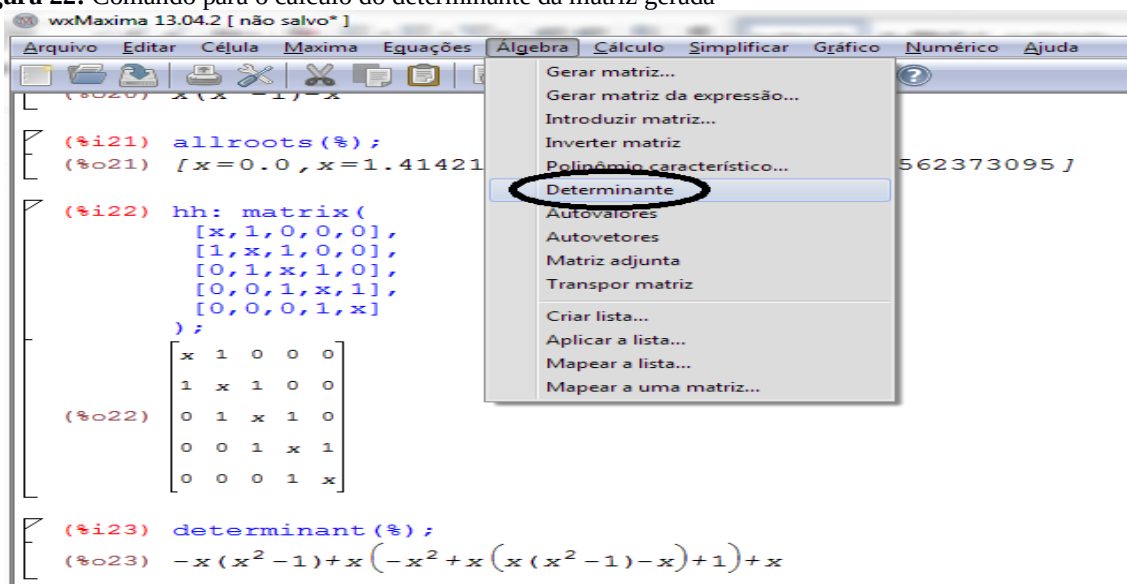
Figura 21: Exemplo de matriz para o penta-1,3-dieno montada no software wxMaxima

	1	2	3	4	5
1	x	1	0	0	0
2	1	x	1	0	0
3	0	1	x	1	0
4	0	0	1	x	1
5	0	0	0	1	x

Fonte: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>

Na sequência, aparecerá na tela principal a matriz montada. Neste momento é só acessar o comando “Álgebra” no painel de controle e clicar em “Determinante” para o programa apresentar o polinômio resultante da matriz, como demonstrado na figura abaixo:

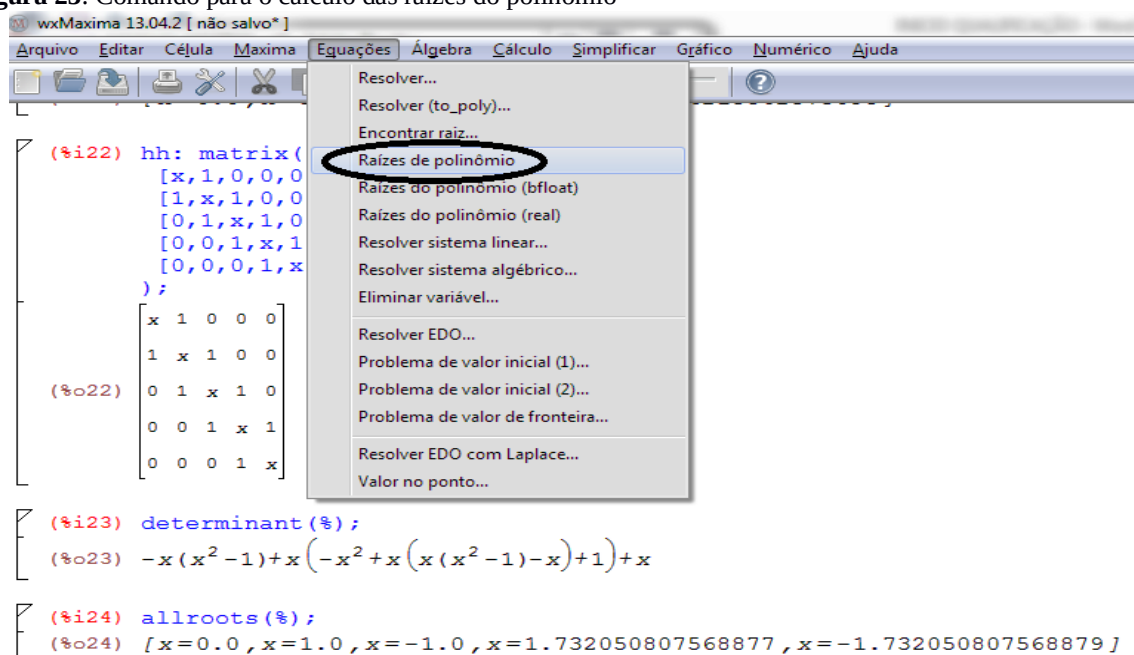
Figura 22: Comando para o cálculo do determinante da matriz gerada



Fonte: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>

Com o polinômio já expresso, é possível agora encontrar as raízes do mesmo. Para tanto, é só acessar “Equações” no painel de controle e posteriormente clicar em “Raízes de polinômio”.

Figura 23: Comando para o cálculo das raízes do polinômio



Fonte: <http://maxima.sourceforge.net/pt/download.html>

Com os valores das raízes já obtidos é possível calcular as energias dos níveis dos orbitais moleculares pelo Método Simples de Hückel, utilizando das equações já apresentadas em tópico específico para o método.