

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA: O USO DO PROGRAMA AVOGADRO® COMO FERRAMENTA AUXILIAR NO ENSINO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS

Computer Simulation In Chemical Teaching: The Use Of The Avogadro® Program As Aid Tool In Chemical Teaching

José Renan da Silva [jose-renandasilva@hotmail.com]

Roberta Pereira Dias [roberta.pdias@ufpe.br]

Flávia Cristina Gomes Catunda de Vasconcelos [flaviacrisgomes@hotmail.com]

Centro Acadêmico do Agreste, Universidade Federal de Pernambuco

Av. Marielle Franco, s/n - Km 59 - Nova, Caruaru - PE, 55014-900

Recebido em: 29/11/2019

Aceito em: 08/07/2020

Resumo

Esse trabalho, realizado com estudantes do curso de Química Licenciatura da Universidade Federal de Pernambuco, no Centro Acadêmico do Agreste, teve como foco, a experimentação computacional no ensino de química. A pesquisa apresenta um cunho qualitativo e foi realizada com estudantes matriculados nas disciplinas de Físico-química I e Físico-química II. A proposta da pesquisa é relatar e analisar o uso do programa Avogadro®, como ferramenta tecnológica para o auxílio de professores no processo de ensino, em conteúdos de química, por meio da construção de estruturas moleculares, cujas propriedades dessas substâncias serão apresentadas pelo próprio programa, e interpretadas junto com o professor pesquisador. Nessa pesquisa, para obter resultados acerca da proposta, foi trabalhada uma oficina “Ligações Químicas: Explicando Fenômenos e Conceitos Através do Programa Avogadro®”, na qual, através do programa computacional foi abordado o conteúdo de Ligações Químicas na tentativa de corrigir *deficits* remanescentes de práticas docentes tradicionais. Para a coleta e análise de dados foi utilizado, como instrumento, questionários impressos e formulários on-line. Por fim, foi notório o avanço cognitivo dos estudantes ao utilizarem a ferramenta, visto que a análise dos dados apresentaram uma crescente nos resultados das últimas avaliações, se comparados com as avaliações iniciais. Tendo em vista os mesmos níveis de perguntas em todas as etapas da coleta de dados.

Palavras-chave: Experimentação; Ensino de Química; Química Computacional; Ligações Químicas.

Abstract

This work, conducted with undergraduate Chemistry students from the Federal University of Pernambuco, at the Agreste Academic Center, focused on computational experimentation in chemistry teaching. The research has a qualitative nature and was conducted with students enrolled in the disciplines of Physicochemical I and Physicochemical II. The purpose of this research is to report and analyze the use of the Avogadro® program, as a technological tool to assist teachers in the teaching process, in chemistry content, through the construction of molecular structures, whose properties of these substances will be presented by the program itself, and interpreted together with the research teacher. In this research, to obtain results about the proposal, a workshop “Chemical Bonding: Explaining Phenomena and Concepts Through the Avogadro® Program” was worked out, in which, through the computer program, the content of Chemical Bonding was addressed in an attempt to correct remaining deficits of traditional teaching practices. For data collection and analysis, it was used, as an instrument, printed questionnaires and online forms. Finally, it was noticeable the cognitive progress of students when using the tool, since the data analysis showed a growing in the results of the last evaluations, if compared to the initial evaluations. Given the same question levels at all stages of data collection.

Keywords: Experimentation; Chemistry teaching; Computational chemistry; Chemical bonds.

1 Introdução

Para muito estudantes, a aprendizagem dos conteúdos de Química é visto como algo complexo que apresenta um moderado nível de dificuldade para sua compreensão, independente do seu nível de instrução. Essa dificuldade se dá, principalmente, quando os estudantes precisam mentalizar condições em escalas atômicas ou ainda, relacionar modelos com os fenômenos macroscópicos. Um exemplo dessa dificuldade é imaginar ou construir um modelo mental, de átomos e moléculas e como elas interagem (MOREIRA, 1996).

Esse desenvolvimento mental apresenta maior resistência nos estudantes da geração Z, os quais nasceram no final da década de 90 até os dias atuais. Eles possuem como característica, aprender conteúdos diferentes e de forma rápida, tendendo a ter menos paciência para aprender ou tomar conhecimento de um determinado assunto através da leitura de livros (KYLE; BACON; PARK, *et al.*, 2011).

Considerando que a maioria dos professores de Química que se formam a partir dos anos 2000, são também desta geração, pode-se afirmar que é um desafio apresentar à esses a importância que a Química tem como ciência central em diferentes áreas, como por exemplo nas novas tecnologias e engenharias. Desta forma, se faz importante intervir com abordagens diferenciadas para que o graduando na Licenciatura em Química se torne um profissional da educação, com o mínimo de instrução necessária para que possa lecionar. A partir desta questão, foi notada a necessidade de buscar meios para que os futuros professores possam entender conceitos e teorias da Química associado com o uso da Química Computacional.

Um dos métodos computacionais mais utilizados para explorar a Química, são as simulações. Como a disciplina está relacionada a compreensão dos fenômenos a nível submicroscópico, o uso das simulações possibilita o desenvolvimento do raciocínio e aprendizado dos alunos (VASCONCELOS, 2015; MACHADO, 2016). Com isso, esse recurso têm a capacidade de

auxiliar professores que buscam a inserção de simulações interativas em suas aulas, bem como de possibilitar uma melhor compreensão dos fenômenos químicos [...] Permitem a exploração de diferentes conteúdos com informações conceituais e simulações experimentais, que podem ser utilizadas em diferentes níveis de ensino, com possibilidades de avanços durante o processo de ensino e aprendizagem desta ciência (VASCONCELOS, 2015, p.1).

Quando comparado o uso da experimentação em bancada, com predominância em cursos do ensino superior e na área da Química, com a experimentação computacional, é possível identificar pontos positivos em ambas as práticas. Entretanto, como o foco é a utilização de simuladores, é possível apresentar algumas propriedades que proporcionam um desenvolvimento concreto na vida acadêmica e profissional dos estudantes que têm contato direto com a experimentação computacional. Uma das principais qualidades de se trabalhar com a simulação está em o aluno ter maior liberdade, não se preocupar com o tempo, além da utilização, perda e contato direto com materiais trabalhados, tendo também um papel fundamental na representação de modelos e teorias, pois a função dele é de apresentar os resultados mais reais possíveis (RIBEIRO *et al.*, 2003).

O uso das tecnologias digitais para se trabalhar a Química, como qualquer outra área da educação, vêm evoluindo e ganhando, cada vez mais espaço na sociedade, escolas e universidades (MORENO; HEIDELMANN, 2017). Ultimamente, essas tecnologias se mostraram um ótimo

recurso didático para o avanço e correção de alguns problemas na educação, como em diversas áreas específicas da Química, no qual o “invisível” – empírico e abstrato – está sempre presente (RIBEIRO *et al.*, 2003; VIEIRA, 2004).

Logo, considerando que o uso das tecnologias digitais está presente na escola desde a década de 30, com o uso de recursos como vídeo, estas ferramentas auxiliam na formação de alunos e nas abordagens metodológicas no processo de ensino e aprendizagem da Química. Assim, a utilização de computadores no ensino, além de ser uma forma de implementação das Tecnologias de Informação e Comunicação (TIC), é um meio atrativo de o aluno aprender e ter autonomia na construção do seu conhecimento. Este aprendizado pode ser realizado a partir de diversos recursos, como jogos, utilização da internet para fins de pesquisas, softwares de ensino, uso de simulação, dentre outros. Sendo assim, as TIC, quando utilizadas por profissionais capacitados, viabiliza o processo de aprendizagem dos mais diversos assuntos (VIEIRA, 2004).

Neste trabalho, destaca-se as simulações que são softwares educacionais, como recursos oriundos das TIC, por serem responsáveis por promover informação e comunicação, além de serem amplamente utilizados nos processos de aprendizado escolar. Sendo usado como um objeto de aprendizagem, pois pode valorizar o ensino na educação pública, proporcionando ao aluno, de maneira prática e muitas vezes mais econômica, do que os materiais didáticos e paradidáticos convencionais (MACHADO, 2016; PACHECO; BARROS, 2013).

Levando em conta alguns dos pontos citados no parágrafo anterior, identifica-se alguns softwares que professores de Química podem trabalhar em suas aulas, como o Programa Avogadro[®], que se destaca por ser gratuito e apresentar uma interface simples e interativa. O Avogadro[®] é um avançado editor e visualizador de moléculas, projetado para uso em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e outras áreas relacionadas (HANWELL *et al.*, 2012).

Além disto, a ferramenta possui uma interface gráfica agradável que pode ser facilmente manipulada pelo usuário para visualizar as estruturas de moléculas de vários ângulos, em três dimensões. Os alunos podem se divertir criando suas próprias estruturas multicoloridas, promovendo a criatividade, possibilitando-os vincula-lá-las à propriedades. Essa ferramenta pode aproximar os alunos a melhor entenderem o comportamento das moléculas, revelando detalhes no nível microscópico e instigá-los à uma melhor compreensão das leis, propriedades, reações e outros fenômenos químicos. Dessa forma, esse programa fez surgir o interesse em realizar uma pesquisa sobre o seu uso como ferramenta metodológica auxiliar, para uma possível melhoria na formação de professores de química.

Para fins de pesquisa, foi escolhido o conteúdo de Ligações Químicas para fazer o uso do programa Avogadro[®], devido o assunto ser explorado em todos os níveis de ensino, representadas através da mecânica clássica. Isto é, através do modelo de ligação massa-mola ou simplesmente traço-bola. Porém, nem sempre essa representação proporciona informações úteis necessárias, visto que “nos casos em que uma fórmula de Lewis não é auto-evidente, um cálculo de orbital molecular pode ser utilizado para melhor orientação” (AUTSCHBACH, 2012, p.2). Segundo o mesmo autor, os orbitais são representações utilizadas para explicar fenômenos dentro de algumas áreas da química, como, por exemplo, na Química Quântica. Nela, eles servem como modelo para explicar a formação das ligações químicas, suas propriedades, e como ocorre a sobreposição dos orbitais atômicos para formar orbitais ligantes e antiligantes.

Levando em conta as características do programa e suas principais funções, foi percebido que abordar o conteúdo de Ligações Químicas seria apropriado para o ensino das diversas propriedades atômicas e moleculares, apresentadas na imagem 1 desse trabalho. Pensando nisso, o seu objetivo foi de compreender o grau de conhecimento teórico de alunos de um curso de

licenciatura em Química, sobre Ligações Químicas (LQ) e Teoria do Orbital Molecular (TOM) a partir do uso do software Avogadro[®].

2 Percurso metodológico

O referente trabalho é de natureza aplicada e exploratória, utilizando métodos experimentais e de caráter qualitativo. Para o uso do programa Avogadro[®], foi determinado o ensino do conteúdo de Ligações Químicas (LQ), com o foco em conceitos atuais, visando abordar a Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM), a partir de interpretações e ressignificação de métodos clássicos, como a Teoria da Ligação de Valência (TLV).

A pesquisa foi realizada com estudantes de Química Licenciatura da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), no Centro Acadêmico do Agreste (CAA), na cidade de Caruaru, PE. O critério de escolha dos alunos participantes foi baseado no nível de instrução que os mesmos deveriam apresentar a respeito de todos os conteúdos relacionados à Ligações Químicas. Ou seja, é esperado que os alunos das turmas de Físico-Química I (FQ I) e Físico-Química II (FQ II) tenham uma base adequada dos conteúdos, visto que eles passaram por 5 disciplinas de Química (Introdução à Química; Química Geral I; Química Geral II; Química Inorgânica I; Química Inorgânica II), as quais apresentam em suas ementas, relações entre todas as propriedades específicas dos conteúdos de LQ.

Para iniciar a coleta de dados e obter informações que possam ajudar no direcionamento de como e para qual caminho seguir, no *software* Avogadro[®], inicialmente foi aplicado um questionário com 33 estudantes das turmas de FQ I e FQII, sendo então um dos instrumentos de coleta de dados. O objetivo deste questionário, foi entender o grau de conhecimento teórico a respeito do conteúdo, bem como identificar quais participantes participariam da atividade experimental com o uso do programa computacional. Com isso, foram identificados 5 discentes interessados na participação da oficina, sendo esses, por ordem de relatório aplicado, os participantes de número 04, 10, 21, 22 e 32, os quais, 04 e 10 estavam matriculados na disciplina FQ I e os demais na FQ II. No quadro 1, identifica-se as perguntas realizadas aos estudantes.

- 1- Defina maneira sucinta o que é uma ligação química.
- 2- Como você classifica a ligação da molécula de HCl? Justifique.
- 3- Represente a formula estrutural da molécula de O_{2(g)}.
 - a. Se pudéssemos utilizar um microscópio, que alcançasse o nível atômico, o que veríamos entre os átomos de oxigênio?
- 4- Qual a diferença entre ligação iônica, covalente e metálica?
- 5- Atualmente qual teoria de consenso científico para se descrever Ligações Químicas?

Quadro 1 – Descrição dos enunciados presentes no questionário 01.

A atividade experimental com uso do software Avogadro[®] foi dividida em 3 etapas, conduzida durante três dias, sendo esta formalizada como oficina de “Ligações Químicas:

Explicando Fenômenos e Conceitos Através do Programa Avogadro[®]”. O primeiro encontro foi utilizado para a apresentação das atividades a serem realizadas e a abordagem das principais funções do programa. Para os estudantes que tiveram o primeiro contato com o *software*, foi o momento para se familiarizar com a ferramenta e conseguir participar das demais atividades.

No segundo e terceiro encontro, foram propostas atividades como: a estruturação de moléculas, através do Avogadro[®], para que os alunos pudessem identificar, tridimensionalmente, as estruturas e assim visualizar propriedades a cerca das mesmas, como pode ser visto na figura 1.

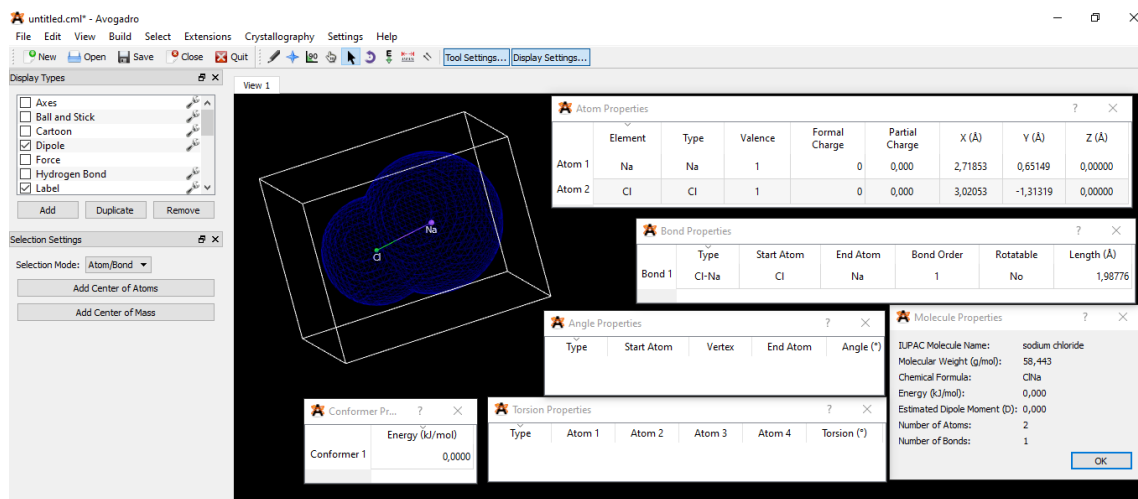


Figura 1 – Molécula de cloreto de sódio (NaCl) representada, tridimensionalmente, no programa Avogadro[®], com suas diversas propriedades descritas na lateral direita.

Conforme apresentado na figura 1, além dos participantes visualizarem a representação da molécula do Cloreto de Sódio (NaCl) em 3D, é possível identificar a região de maior densidade eletrônica desta estrutura, como também, através do comando “Views/ Properties”, identificar propriedades atômicas, moleculares, de ligação, ângulos, dentre outros. Desta forma, para saber quão útil a ferramenta têm se mostrado durante a oficina, foram respondidos formulários contendo as mesmas questões presentes no questionário aplicado inicialmente, para identificar se os discentes mantinham suas respostas ou se as reformulavam a partir do que foi visto na oficina. Essas reavaliações (formulário F1 e formulário F2), foram elaboradas utilizando a plataforma gratuita “Formulários Google” da Google[®].

Ao fim das atividades, foi aplicado um segundo questionário (Quadro 2), no mesmo nível do primeiro, com novas perguntas para que fosse possível identificar o rendimento dos participantes durante toda a trajetória (início, meio e fim) da oficina.

1. Defina, qual o tipo de ligação que está ocorrendo entre os átomos de oxigênio e o átomo de carbono, na molécula do dióxido de carbono (CO₂). Justifique!
2. Ainda utilizando a molécula de gás carbônico, como você desenharia essa molécula?
3. Descreva com suas palavras, o mais detalhado possível, o que está ocorrendo nas ligações do CO₂.
4. Levando em conta que o programa Avogadro[®] pode ser utilizado como ferramenta metodológica em sala de aula, você indicaria à algum professor – ou você quanto futuro docente – para fazer o uso desse software durante as aulas de Ligações Químicas? Justifique.

Quadro 2 – Descrição dos enunciados presentes no questionário 02.

A análise dos dados foi realizada por meio da Análise Textual Discursiva (ATD), a qual tem como ferramentas o uso de questionário e entrevistas. Além disso, os dados qualitativos são analisados através da análise de conteúdo (que será a utilizada nesta pesquisa) e o outro, a análise de discurso. Além dos tipos de análise citados, a ATD pode ser utilizada associada a outros métodos de análise, no decorrer da prática metodológica, se houver a necessidade. Segundo o autor, não prejudica ou desqualifica os métodos anteriormente utilizados, além de ser recomendada para pesquisas cujas análises são propostas na intenção de corrigir ou propor solução a partir da investigação realizada (MORAES, 2003).

Como critério teórico para avaliar os participantes e comparar as compreensões das suas respostas, nos diversos instrumentos utilizados, foi utilizado Shriver e Atkins (2008), como também Autschbach (2012) e Atkins e Jones (2012), os quais serviram como base para nivelar as respostas dos estudantes em “total domínio; domínio parcial; sem domínio; não foi respondida”. Como por exemplo, a definição do que seria uma ligação iônica, fosse apresentado como resposta a seguinte afirmação: “as ligações iônicas são realizadas entre íons de cargas opostas e entre elementos metálicos e ametálicos” se enquadraria como “total domínio”, pois nenhuma das informações apresentadas estão incorretas, apesar de estarem incompletas. Caso o estudante apresente da seguinte maneira: “as ligações iônicas são realizadas entre íons de cargas opostas, sendo um deles metálico e outro ametálico” se enquadraria em “domínio parcial” pois nem todas as moléculas iônicas são formadas por íons metálicos e ametálicos simultaneamente, pois a água, por exemplo, é uma molécula, mas quando na forma líquida, com outras moléculas ela pode ter sua estrutura representada na forma iônica. Já no caso de uma resposta do tipo: “as ligações iônicas são realizadas entre íons com cargas iguais” se enquadraria como “sem domínio” pois essa afirmativa está incorreta.

3. Resultados e Discussões

A primeira análise dos dados coletados, foi dos 33 questionários respondidos na primeira etapa da pesquisa, no qual contou com seis questões, mas uma foi desconsiderada na análise, devido ela ser referente ao interesse dos estudantes em participar da oficina. Na tabela 1, apresenta-se o desenvolvimento geral dos estudantes que responderam o primeiro questionário.

Tabela 1 – Domínio das questões, obtidos a partir da análise do questionário Q1 realizado com os 33 estudantes das disciplinas FQ I e FQII.

	Sem domínio	Domínio parcial	Total domínio	Não foi respondida
Questão 1	09	23	01	---
Questão 2	08	21	04	---
Questão 3	07	13	12	01
Questão 4	02	25	06	---
Questão 5	13	01	10	09

Fonte: Própria

Ao visualizar a tabela 1, é percebido que 80% das questões tiveram o conceito “domínio parcial” com maior predominância, se comparado aos outros 3 nivelamentos avaliativos. Dessa forma, é entendido que os 33 estudantes apresentam, de maneira geral, conhecimentos significativos a respeito do conteúdo de Ligações Químicas, mas com alguns erros conceituais em

suas afirmações (Figura 2).

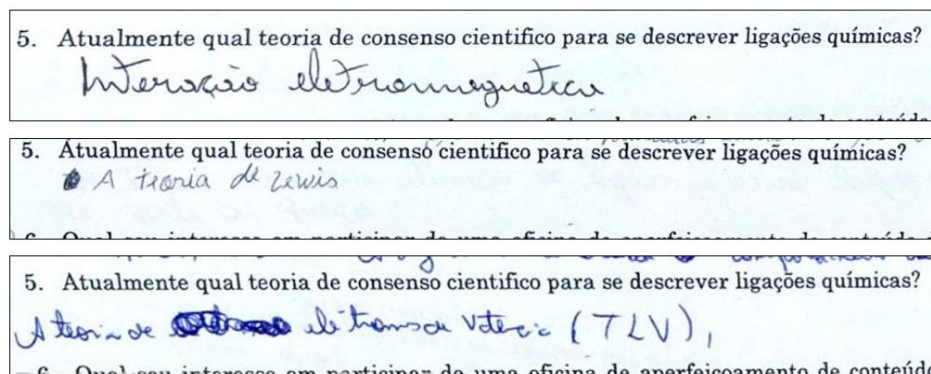


Figura 2 – Respostas dos participantes 02, 07 e 31, respectivamente, a respeito da quinta questão do Questionário Q1.

Ao analisar as respostas dos participantes na questão 5, é percebido que a do participante 02 foi “Interação eletromagnética”, a do participante 07 foi “A Teoria de Lewis”, e o participante 31 respondeu “A Teoria do Elétron de Valência (TLV)”. Baseado em Autschbach (2012) e Atkins e Jones (2012), os estudantes não apresentaram domínio do assunto, uma vez que a teoria mais atual de consenso científico, para se descrever ligações químicas, é a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Após esta primeira análise, uma nova foi realizada com os 5 participantes da oficina (participantes 04, 10, 21, 22 e 32) que explorava a atividade experimental computacional. Esses novos resultados foram utilizados como base comparativa para as futuras avaliações dos próximos dados coletados e identificar o possível avanço dos participantes. Essa avaliação contou com um processo de correção no qual o aluno poderia receber uma nota entre 0 e 10, a cada questão. Com 0, o discente ou não respondeu à questão ou errou por completo; 10 o mesmo apresentou total domínio e riqueza em detalhes na questão; entre 0,5 e 9,5 os alunos apresentam algum nível moderado de acerto, pra menos ou pra mais, mais uma vez tendo como base, Shriver e Atkins (2008), Autschbach (2012) e Atkins e Jones (2012). O gráfico 2 descreve com mais detalhe o desenvolvimento dos discentes participantes da pesquisa, no questionário Q1.

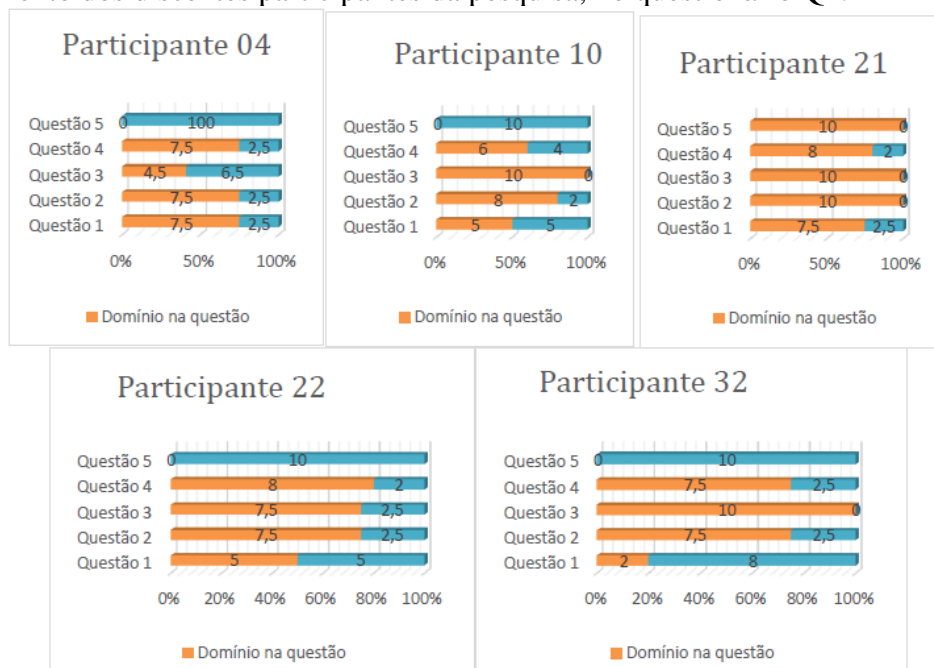


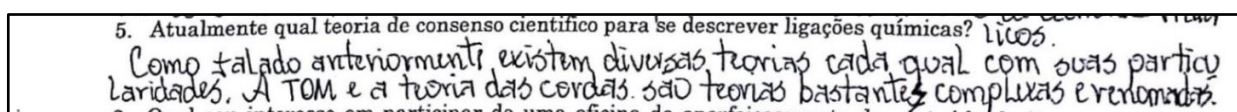
Gráfico 2 – Rendimento dos estudantes referente ao questionário Q1 para os 5 participantes da oficina

Após visualizar esses gráficos, identifica-se que os estudantes selecionados apresentam, a partir da análise do questionário Q1, perfis cognitivos distintos a respeito do tema tratado. Mediante estes dados, identifica-se a necessidade de se utilizar diferentes abordagens no ensino de química, como o uso de *software* de simulação, possibilitando uma formação com mais recursos que vão além da experimentação. Visto que, de modo geral, os professores da educação básica se restringem muito ao uso do livro didático e da experimentação de bancada de forma demonstrativa (SILVA, MACHADO, TUNES, 2010).

Partindo para os formulários, ao término da análise dos questionários Q1, foi realizada a primeira experiência, na oficina, com o programa Avogadro[®]. Vale ressaltar, que em nenhum momento foi questionada as respostas apresentadas inicialmente pelos participantes no questionário Q1, mesmo as que estavam erradas, pois, os formulários seriam utilizados para dar um *feedback*, na intenção de os estudantes autoavaliarem suas respostas e terem a liberdade de permanecer com elas ou as modificarem.

A atividade experimental ocorreu em dois encontros, nos quais foram apresentados aos participantes o programa a ser utilizado, suas funções e principais ferramentas no uso das representações das ligações químicas. Nesses encontros, eles tiveram a liberdade de criar moléculas e aprender de forma investigativa para utilizar a ferramenta. Após a familiarização do programa, todos foram instruídos, utilizando as moléculas criadas por eles, com o auxílio do pesquisador, a identificar as possíveis informações presentes no software que seriam pertinentes às ligações químicas, como a formação de dipolo, diferença de eletronegatividade, distância e ângulos de ligação, entre outros. Ao fim dos encontros, os participantes foram direcionados aos formulários on-line, sendo observados durante todo o tempo de *feedback* para evitar possíveis pesquisas na internet.

Sendo assim, foi percebido que os estudantes se auto corrigiam ou complementaram suas respostas anteriores, em todas as perguntas dos formulários, mesmo sem terem recebido correção das questões do questionário Q1, demonstrando mudanças na forma de pensar, sobre tais conceitos. Ao visualizar a figura 3 e 4, referente a reformulação da resposta inicial do participante 21 para o enunciado 5 do questionário Q1, é percebido o avanço cognitivo deste.



5. Atualmente qual teoria de consenso científico para se descrever ligações químicas? *líquos.*
Como falado anteriormente existem diversas teorias cada qual com suas particularidades. A TOM e a teoria das cordas são teorias bastante complexas e renomadas.

Figura 3 - Resposta do participante 21, sobre qual a teoria atual que se baseiam as ligações químicas, no questionário Q1.

Atualmente qual teoria de consenso científico para se descrever ligações químicas?

Existem diversas Teorias de ligações químicas capazes de explicar algumas coisas, mas muitas apresentam algumas limitações. Dentre estas, pode-se destacar a Teoria da ligação de Valência, Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons de Valência, Teoria do Orbital Molecular, Teoria das Cordas, Teoria do Campo Cristalino e Teoria do Campo Ligante. As duas últimas servem para explicar como os átomos do bloco d da tabela periódica se combinam mediante a formação de ligações coordenadas para formar compostos ou complexos de coordenação, sendo também muito importante. De acordo com o meu conhecimento e a leitura de alguns artigos a Teoria das Cordas, que utiliza uma combinação de diversos orbitais atômicos para formar diversos orbitais moleculares seguindo princípios de simetria molecular e química quântica, é a mais aceita atualmente pela comunidade científica.

Figura 4 – Feedback do participante 21, para a questão 5 do questionário Q1.

Ao analisar ambas as respostas do mesmo participante, é percebido o seu desenvolvimento na compreensão da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Na primeira resposta, é identificada uma informação correta, mas com definições superficiais. No formulário 2, o aluno descreve como se fundamenta a teoria a partir do que foi visto e levado a prática na pesquisa, apesar de defender seu posicionamento a respeito de uma outra teoria que julga ser a mais aceita pela comunidade científica. O mesmo é visto nas figuras 5 e 6, que demonstram as respostas do participante 04 para a questão 3.

3. Represente a fórmula estrutural da molécula de $O_2(g)$.



a. Se pudéssemos utilizar um microscópio que alcançasse o nível atômico, o que veríamos entre os átomos de oxigênio?

Duas ligações químicas

Figura 5 – Resposta do participante 04, para a questão 3 do questionário Q1.

Descreva a fórmula estrutural da molécula de $O_2(g)$

$O=O$

Relacionando à questão anterior, o que veríamos entre os átomos de oxigênio se pudéssemos utilizar um microscópio que alcançasse o nível atômico?

Veríamos uma grande nuvem de elétrons entre esses átomos.

Figura 6 – Feedback do participante 04, para a questão 3 do questionário Q1.

Logo, ao analisar as respostas das figuras 5 e 6, identifica-se o desenvolvimento na construção da resposta do participante 04, quanto a sua compreensão sobre as ligações químicas. Acredita-se que a mudança foi possível devido o uso do programa Avogadro[®], no qual os

participantes visualizaram as representações gráficas, que são os modelos utilizados pela comunidade científica. Utilizando, para esse fim, a TOM, que é a mais aceita atualmente, tendo como base os conhecimentos científicos atuais (AUTSCHBACH, 2012).

Conforme informado anteriormente, os estudantes fizeram *feedbacks* de todas as questões, mesmos para aquelas em que acreditavam estar corretas. Nesse caso, os mesmos apresentaram novas informações para complementar a resposta anterior, como visto na figura 7. Nas figuras 7 e 8, é possível identificar o avanço do participante 22, em duas das questões apresentadas no questionário Q1, após *feedback* no formulário F2.

2. Como você classifica a ligação da molécula de HCl? Justifique.

É uma ligação iônica devido a diferença de eletronegatividade entre o H e o Cl.

Como você classifica a ligação da molécula de HCl? Justifique.

É uma ligação de caráter iônico devido a diferença de eletronegatividade ser maior que 1,7 e haver dissociação de íons da molécula em meio aquoso, porém esta ligação também apresenta caráter covalente se analisada do ponto de vista de que é formada por dois ametais.

Figura 7 - Resposta do participante 22, para a pergunta 2 do questionário Q1 e em sequência o *feedback* da mesma questão no formulário F2.

a. Se pudessemos utilizar um microscópio que alcançasse o nível atômico, o que veríamos entre os átomos de oxigênio?

Seria possível enxergar cargas negativas havendo interação forte.

Relacionando à questão anterior, o que veríamos entre os átomos de oxigênio se pudessemos utilizar um microscópio que alcançasse o nível atômico?

Seria possível observar a sobreposição dos orbitais citada anteriormente, e a formação de um orbital molecular.

Figura 8 - Resposta do participante 22, para a pergunta “a” do enunciado 3 do questionário Q1 e em sequência o *feedback* da mesma questão no formulário F2.

É percebido que, ao analisar as respostas do participante 22, na figura 7, o estudante complementa a questão 2 do questionário Q1, acrescentando que, além da molécula do HCl apresentar um maior caráter iônico, ela também apresenta caráter covalente, estando de acordo com Shriver e Atkins (2008). Na figura 8, identifica-se uma maior apropriação do discente, após o *feedback* da pergunta “a” do enunciado 3, na qual o mesmo entende que as ligações químicas são formadas a partir de sobreposição de orbitais atômicos e formação de orbitais moleculares, conforme a teoria atual que rege as ligações químicas. Avanço semelhante aconteceu, também, com o participante 10, na segunda questão do questionário, após o *feedback*, como pode ser visto na figura 9.

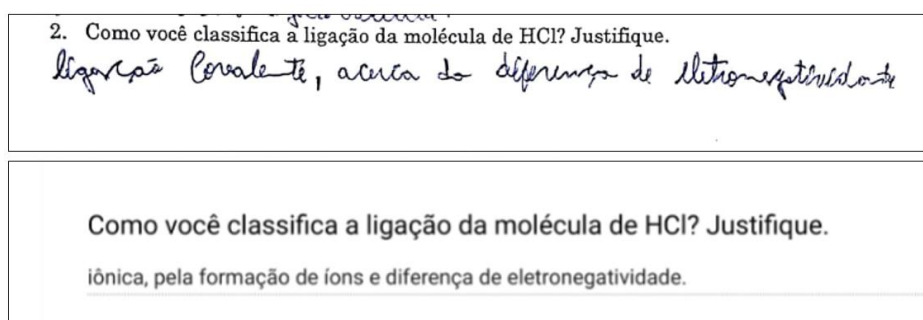


Figura 9 – Resposta do participante 10 para a questão 2 do questionário Q1 e em seguida o feedback da mesma questão.

Assim, nota-se que, por mais que o participante não tenha identificado que a molécula apresente caráter iônico e covalente, identifica-se um maior entendimento do assunto após o feedback. Antes da intervenção, justifica o fato de a molécula apresentar caráter covalente, devido a diferença de eletronegatividade entre os átomos de cloro e hidrogênio, presentes na molécula. Entretanto, se sabe que a diferença de eletronegatividade é uma característica que os átomos apresentam, principalmente, em ligações iônicas (SHRIVER; ATKINS, 2008).

Quanto ao questionário Q2, este contou com 4 perguntas, sendo 3 delas sobre o conteúdo de LQ e uma a respeito da opinião dos alunos sobre a utilização do programa como ferramenta metodológica no ensino de química. Os dados obtidos nas 3 primeiras questões foram avaliados de acordo com o nível da resposta, levando em considerações as fontes teóricas de informações, que foram: Shriver e Atkins (2008), Autschbach (2012) e Atkins e Jones (2012). A análise dos rendimentos de cada participante nessa avaliação está representada no gráfico 3.

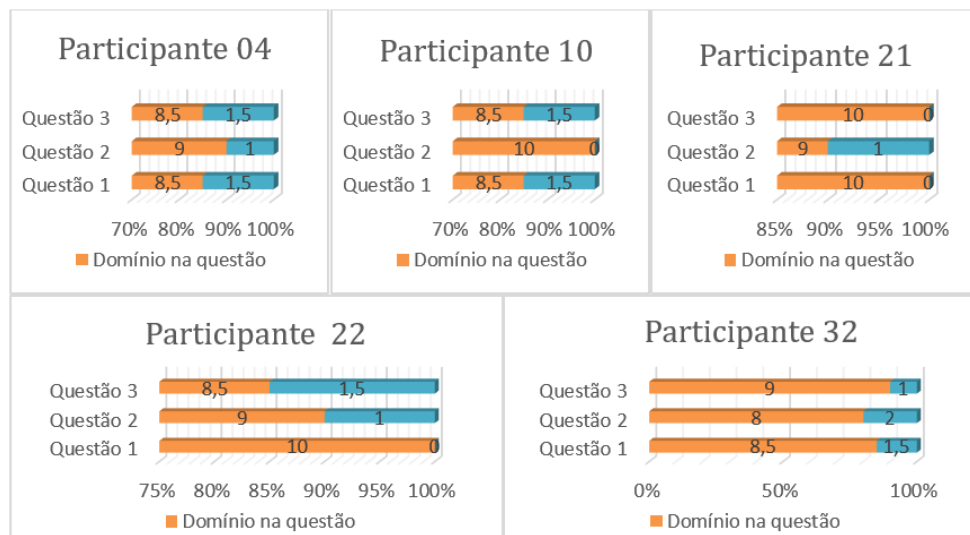


Gráfico 3 – Resultado da análise do questionário Q2

Da mesma forma que para o questionário Q1, foi realizada a análise do questionário Q2 e construído um gráfico para cada estudante a respeito do seu desenvolvimento na oficina (gráfico 3). É percebido que todos os participantes, na última avaliação, tiveram rendimento igual ou superior a 8,5, quando analisada a média das questões por questionário. Sendo, mais uma vez, percebido um avanço entre os sujeitos envolvidos na oficina, durante toda a coleta de dados, desde reformulações de conceitos sobre as Ligações Químicas, como visto nas figuras 3 e 4, à mudança na forma de interpretar modelos mentais, previsto por Moreira (1996) a respeito dos LQ e como elas de fato acontecem, como visto nas figuras 5 e 6.

Dessa forma, tendo em vista os diversos resultados obtidos durante a pesquisa, foi realizada uma análise comparativa entre os questionários (Q1 e Q2) e os formulários (F1 e F2). Levando em conta que nos formulários, além das perguntas que estão presentes no questionário Q1, se encontram 2 questões não apresentadas anteriormente (1 para cada formulário). Essas questões estão no mesmo nível das demais, e são apresentadas na figura 10.

<p>Ângulos e distâncias de ligação são fatores que sempre variam nas ligações iônicas, covalentes e metálicas. É possível perceber que ao criar uma molécula no programa Avogadro, e realizar a otimização da estrutura, todas as ligações sofrem essa variação. Quais as informações acerca da molécula que o programa utiliza para realizar essas modificações? Justifique!</p> <p>A informação do tamanho dos átomos baseados na quantidade de elétrons que os mesmos contém em seus níveis de energia, os tipos de ligação que se evidencia na molécula como simples, dupla ou tripla, bem como a eletronegatividade dos elementos. Favorecendo a partir dos ângulos e distâncias das ligações as inferências observadas.</p>
<p>De acordo com a regra do octeto, os átomos precisam apresentar 8 elétrons na última camada, para se tornarem estáveis como os gases nobres. Sabendo disso, você acha que todos os átomos seguem essa regra ou há exceções? Justifique!</p> <p>Há exceções, pois existem átomos de elementos como por exemplo o Enxofre (S) que apresentam um número maior de coordenação, ou seja, ele pode estar a fazer um número maior de ligações, não seguindo assim, a regra do octeto, que evidencia a quantidade de elétrons a ganhar, perder para a estabilidade.</p>

Figura 10 – Perguntas extras dos formulários F1 e F2, respectivamente, com as respostas do participante 32.

Os enunciados extras dos formulários, foram elaborados pensando nas possibilidades que o programa Avogadro® pode apresentar. Como, as informações que este fornece aos usuários (nesse caso, aos participantes) durante a sua utilização, e no auxílio de professores e alunos em situações complexas, como em exceções na regra do octeto, ainda muito utilizada por professores no ensino de ligações químicas.

A partir de todos esses resultados, foi montado um gráfico, comparando o desenvolvimento de cada participante (gráfico 4).

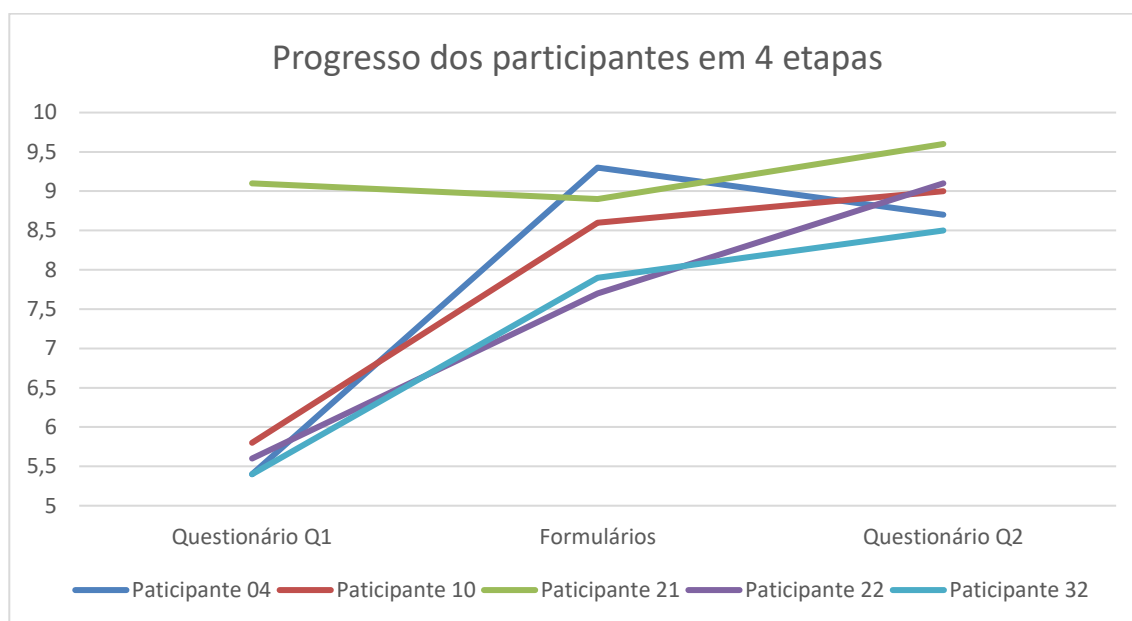


Gráfico 4 - Comparação dos resultados das análises dos questionários e formulários.

Ao analisar o gráfico, percebe-se que o rendimento dos estudantes, entre o questionário 1 e 2, é 100% satisfatório. Entretanto, quando analisado o caminho do processo, é percebido que alguns estudantes no decorrer das avaliações apresentaram pequenas quedas que, em uma margem de erro, acaba não sendo preocupante. Com isso, identifica-se que a metodologia utilizada, se mostrou útil no ensino e aprendizado do conteúdo abordado e como ela corroborou para um aperfeiçoamento dos conceitos teóricos que esses sujeitos apresentavam, no que diz respeito aos conteúdos de LQ.

Para além dos valores obtidos através dos formulários e questionários, é de suma importância apresentar, também, as situações de discussões durante as práticas, a respeito do uso do Avogadro[®] com o conteúdo trabalhado durante toda a pesquisa, já recomendado por Moraes, (2003), como dados válidos para a pesquisa cuja ATD é utilizada como ferramenta de análise. Tendo em vista essa possibilidade, durante a realização das atividades propostas, foi percebida a participação em diálogos sobre o que estava sendo investigado e motivação dos discentes com o uso do software, o que reafirma Vieira (2014), no que diz respeito ao uso de simulações ser um meio atrativo dos estudantes aprenderem química. Além de se perceber a utilidade da metodologia trabalhada como uma prática para professores que buscam inovação para a sala de aula, com a inserção de recursos tecnológicos como o uso de simulações, visando melhorar o desempenho dos estudantes nos diversos conteúdos de química, como afirma Vasconcelos (2015).

Considerações Finais

De acordo com os resultados obtidos nos questionários e formulários, é percebido alguns obstáculos que ainda surgem para uma formação adequada de professores de química, como o uso de métodos e ferramentas capazes de abordar, em sala, a complexidade dos conhecimentos mais atuais. Mesmo com um nível mais elevado de instrução, alguns discentes ainda apresentam dificuldade de diferenciar um átomo no estado elementar de uma molécula, ou ainda interpretar a formação de uma ligação química através da TOM. Que, entre outros fatores, pode estar associado ao uso de simplificação dos conteúdos e a utilização excessiva de métodos de estruturas simples, como o de Lewis (MARTINIE et al., 2011).

De modo geral, foi obtido um avanço expressivos dos participantes, do início ao fim da atividade experimental realizada com eles. Atribuindo-se isso ao uso da ferramenta Avogadro[®], na qual os participantes tiveram acesso à visualização de todas as principais representações gráficas mais próxima do que de fato são os átomos e as moléculas, tendo como base os conhecimentos científicos atuais (AUTSCHBACH, 2012). E, mais uma vez, o uso das tecnologias de informação e comunicação mostraram ter seu papel na construção do conhecimento. Romaní (2013) aponta, como foi comprovado com o uso do Avogadro[®], “que o uso intensivo das TIC em geral pode resultar na aprendizagem de competências e habilidades não consideradas nos cenários educacionais tradicionais” (ROMANÍ, 2013, p. 861).

Dentro do que foi discutido no trabalho, paralelo ao que os diversos pesquisadores que incentivam o uso das diversas ferramentas tecnológicas dentro da sala de aula, o uso de programas computacionais na química, em particular o Avogadro[®], têm se mostrado eficiente na aprendizagem de ligações químicas, como também de diversos outros conteúdos nesse campo de ensino. Dessa forma, é possível concluir que, como Ribeiro e colaboradores (2003) afirmam, a tecnologia possui a capacidade de ser utilizada para a solução de problemas educacionais.

Referências

- AUTSCHBACH, J. Orbitals: Some fiction and some facts. *Journal of Chemical Education*, v. 89, n. 8, 2012.
- ATKINS, Peter William; JONES, Loretta. *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- HANWELL, M. D.; CURTIS, D. E.; LONIE, D. C.; VANDERMEERSCH, T.; ZUREK, E.; HUTCHISON, G. R. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *J. Cheminform.* 2012.
- KYLE, Y.; BACON, S.; PARK, A.; GRIFFIN, J.; CUMMINS, R.; HOOKS, R.; QIAN, B.; FAN, H. J. Teaching chemistry effectively with engineering majors: Teaching Beyond the textbook. in *Proc. 21st ICCE on Chemical Education and Sustainability in the Global Age*, Springer, 2011.
- MACHADO, A. S. Uso de Softwares Educacionais, Objetos de Aprendizagem e Simulações no Ensino de Química. *Química e Sociedade*, v. 38, p. 104–111, 2016.
- MARTINIE, R. J.; BULTEMA, J. J.; WAL, M. N. V.; BURKHART, B. J.; GRIEND, D. A. V.; DEKOCK, R. L. Bond order and chemical properties of BF, CO, and N₂. *Journal of Chemical Education*, v. 88, n. 8, p. 1094–1097, 2011.
- MOREIRA, M. A. MODELOS MENTAIS. *Revista Investigações em Ensino de Ciências*, Porto Alegre, RS, 1996.
- MORENO, E. L.; HEIDELMANN, S. P. Recursos Instrucionais Inovadores para o Ensino de Química. *Química Nova na Escola*, v. 39, p. 12–18, 2017.
- PACHECO, J. A. D.; BARROS, J. V. O Uso de Softwares Educativos no Ensino de Matemática José. *DIÁLOGOS – Revista de Estudos Culturais e da Contemporaneidade*, v. 8, p. 5–13, 2013.

RIBEIRO, A. A. et al. Revisão. v. 26, n. 4, p. 542–549, 2003.

ROMANÍ, C. C. Explorando tendências para a educação no Século XXI. Cad. Pesqui. São Paulo, v. 42 n. 147, p. 848-867, 2013.

SHRIVER & ATKINS. Química Inorgânica. 4 ed. Guanabara Koogan, 2008.

SILVA, R. R.; MACHADO, P. F. L.; TUNES, E. Experimentar sem medo de errar. In: Ensino de Química em foco. Ijuí: Editora UNIJUÍ, 2013, cap. 9, pp. 231-261.

VASCONCELOS, F. C. G. C. Levantamento e análise das Simulações do PhET para o ensino e aprendizagem de Química. Anais do X Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências (X ENPEC). Águas de Lindóia, SP, 2015.

VIEIRA, S. L. Estudos em Educação e Tecnologias da Informação e da Comunicação (TICs). p. 21–23, 2004.