



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**



ÉZIO RAUL ALVES DE SÁ

**TERMODINÂMICA: UMA PROPOSTA DE ENSINO A PARTIR DA QUÍMICA
COMPUTACIONAL**

TERESINA - PI

2017

ÉZIO RAUL ALVES DE SÁ

**TERMODINÂMICA: UMA PROPOSTA DE ENSINO A PARTIR DA QUÍMICA
COMPUTACIONAL**

Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Piauí, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Química (Área de concentração: Físico-Química).

Orientador: Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima

TERESINA - PI

2017

FICHA CATALOGRÁFICA

Serviço de Processamento Técnico da Universidade Federal do Piauí
Biblioteca Setorial do CCN

S111t Sá, Ézio Raul Alves de.
Termodinâmica: uma proposta de ensino a partir da
química computacional / Ézio Raul Alves de Sá. –Teresina,
2017.
102f. il.: color

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do
Piauí, Centro de Ciências da Natureza, Pós-Graduação em
Química, 2017.

Orientador: Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima.

1. Química – Estudo e Ensino. 2. Termodinâmica. 3.
Química Computacional – Metodologia de Ensino. I. Título

CDD 541.36

ÉZIO RAUL ALVES DE SÁ

**TERMODINÂMICA: UMA PROPOSTA DE ENSINO A PARTIR DA QUÍMICA
COMPUTACIONAL**

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Piauí, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Química, na área de concentração de Físico-Química.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima - UESPI (Presidente)

Prof. Dr. Samuel Anderson Alves de Sousa - UFPI (Titular)

Prof. Dr. Joaquim Soares da Costa Júnior - IFPI (Titular)

Dedico esta dissertação aos meus pais, familiares e amigos, com amor, admiração e gratidão. Obrigado!

Agradecimentos

Ao Sr. Jesus Cristo pela saúde, força, fé e dedicação a mim concedidos durante todo o percurso desta extensa caminhada, sendo mais uma etapa hoje concretizada. Serei eternamente grato a minha maravilhosa mãe, Bernardina Maria de Jesus Alves Silva, por ter concedido todo o apoio, incentivo e amor em todos os momentos difíceis. Ao meu pai, Valdemir de Sá e Silva, que sempre me orientou e mostrou o caminho certo a seguir, aos meus irmãos, Ênio José Alves de Sá e Elis Lorena Alves de Sá, os quais contribuíram significativamente nesta conquista, a minha namorada Gegê pelo apoio, amor e compreensão, como também aos meus avós, tios (as), primos (as) e amigos (as), que se fizeram presentes quando os busquei.

Aos colegas e amigos da Pós-Graduação em Química (Ronaldo Borges, Nielson Furtado, Tiago Linus, Jaelson, Jonatas, Cleane, Isabella, Antônio, Jadiel, Wiury, Tales) e ao Raimundo Nonato que me apoiaram, contribuíram e incentivaram nos diversos momentos durante a construção e o aprimoramento deste trabalho. Sou muito grato ao meu orientador, professor Dr. Francisco das Chagas Alves Lima (Chicão), por aceitar a orientação e o desenvolvimento desse projeto de mestrado, através dos seus ensinamentos, experiências, dedicação e compreensão nos diversos momentos, como também aos integrantes do grupo de Química Computacional da UESPI (Lucas Abreu, Assis, José Antônio, Aninha e o Chico Ivan) pelo companheirismo e o compartilhamento de ideias e informações.

Aos professores do programa, Alexandre Araújo e Luciana Nobre, pelos excelentes profissionais que são através dos seus serviços prestados a comunidade acadêmica e a sociedade em geral. Ao apoio fornecido pela instituição de fomento CAPES por meio da concessão de bolsa de pesquisa no decorrer de um ano, possibilitando a manutenção das minhas despesas básicas. Aos diretores e coordenadores do Instituto Federal de Ciência, Educação e Tecnologia do Tocantins, *campus* Araguatins, em especial aos professores (as) Décio Dias, Lucinalva, Mauro, Janaína, Laerton e Wyratan, por me concederem a permissão para realizar as viagens durante o desenvolvimento e aplicação da pesquisa.

Sou ciente e grato que foram o resultante dessas forças que fortaleceram, construíram e concretizaram essa vitória, ensinando e orientando a ser um profissional focado e centrado nos objetivos, hoje felizmente alcançados. MEUS SINCEROS AGRADECIMENTOS!

*“Que os vossos esforços desafiem as impossibilidades,
lembrai-vos de que as grandes coisas do homem foram
conquistadas do que parecia impossível”.*

Charles Chaplin

Publicações Durante o Período de Mestrado

Divulgação em reuniões científicas

- ✓ **SÁ, E. R. A.**; BARROS, F. A. A.; BARROS, S. B. A.; LIMA, F. C. A. A EXPERIMENTAÇÃO COMO MOTIVAÇÃO PARA ESTUDANTES NA COMPREENSÃO DE CONCEITOS NO ENSINO DE QUÍMICA In: 13º SIMPEQUI, 2015, Fortaleza-CE.
- ✓ **SÁ, E. R. A.**; BORGES, R. S.; SA, E. L. A.; LIMA, F. C. A. INVESTIGAÇÃO E RELEVÂNCIA DA UTILIZAÇÃO DE SOFTWARES EDUCACIONAIS PELOS DOCENTES DE QUÍMICA NO ENSINO MÉDIO DA REDE PÚBLICA ESTADUAL NA CIDADE DE PICOS-PI In: 13º SIMPEQUI, 2015, Fortaleza-CE.
- ✓ BORGES, R. S.; **SÁ, E. R. A.**; LUIZ, G. E. A CONTEXTUALIZAÇÃO E O ENSINO DE QUÍMICA: O QUE PRATICAM OS PROFESSORES In: 13º SIMPEQUI, 2015, Fortaleza-CE.
- ✓ ARAUJO, D. T. R.; OLIVEIRA, A. C.; LIMA, F. C. A.; **SÁ, E. R. A.** A IMPORTÂNCIA DAS AULAS EXPERIMENTAIS COMO INSTRUMENTO FACILITADOR DA APRENDIZAGEM NA 1º SÉRIE DO ENSINO MÉDIO NA UNIDADE ESCOLAR BARÃO DE GURGUÉIA EM TERESINA-PI In: 13º SIMPEQUI, 2015, Fortaleza-CE.
- ✓ OLIVEIRA, A. R.; LIMA, F. C. A.; **SÁ, E. R. A.** A UTILIZAÇÃO DE UM SOFTWARE EDUCATIVO COMO FORMA DE MELHORAR O CONHECIMENTO DOS HIDROCARBONETOS EM QUÍMICA ORGÂNICA DESENVOLVIDO COM O PIBID-UESPI In: 13º SIMPEQUI, 2015, Fortaleza-CE.
- ✓ ARAUJO, D. T. R.; **SÁ, E. R. A.**; LIMA, F. C. A. JOGO ORGÂNICO: UMA METODOLOGIA DESENVOLVIDA COM O PIBID-UESPI PARA REVISAR CONCEITOS E MELHORAR A FIXAÇÃO DOS CONTEÚDOS DA QUÍMICA ORGÂNICA In: 13º SIMPEQUI, 2015, Fortaleza-CE.
- ✓ **SÁ, E. R. A.**; LOPES, L. B.; LOPES, L. B.; CHAVES, F. F. A ARGUMENTAÇÃO DE ESTUDANTES DO 1º ANO DO ENSINO MÉDIO A CERCA DOS CONTEÚDOS DE QUÍMICA TRABALHADOS NA DISCIPLINA DE CIÊNCIAS NO 9º ANO DO ENSINO FUNDAMENTAL In: JORNADA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E EXTENSÃO - JICE, 2016, Araguatins-TO.

- ✓ **SÁ, E. R. A.**; SA, E. L. A.; SOUZA FILHO, L. B.; LIMA, F. C. A. A ANÁLISE DE PÓS-GRADUANDOS EM FÍSICO-QUÍMICA A CERCA DE DADOS SOBRE O ESTADO DA ARTE DE INTERFACES COLOIDAIIS ABORDADOS NO CONTEXTO CIENTÍFICO NO PERÍODO DE 2010 A 2014 VOLTADOS PARA A DISCIPLINA DE COLOIDES E SUPERFÍCIES In: 56° Congresso Brasileiro de Química, 2016, Belém-PA.
- ✓ SOUZA FILHO, L. B.; **SÁ, E. R. A.** AGENTES ANTIOXIDANTES NA ESTABILIDADE DE FILMES FINOS DE MEH-PPV In: 56° Congresso Brasileiro de Química, 2016, Belém-PA.
- ✓ **SÁ, E. R. A.**; LIMA, J. A.; SOUZA FILHO, L. B.; LIMA, F. C. A. A ANÁLISE DE TEMAS E TÉCNICAS SOBRE INTERFACES COLOIDAIIS MAIS ABORDADOS NO CONTEXTO CIENTÍFICO ENTRE OS ANOS DE 2010 A 2014 In: 56° Congresso Brasileiro de Química, 2016, Belém-PA.

Resumo

SÁ, E. R. A. **Termodinâmica: uma proposta de ensino a partir da química computacional**. 2017. 102 f. Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Química, Departamento de Química, Universidade Federal do Piauí, Teresina, 2017.

O processo educacional vem passando por grandes transformações nas últimas décadas, como por exemplo, através da utilização de ferramentas que proporcionam a visualização e a reprodução de modelos dinâmicos. Neste sentido, os *softwares* de simulação e as ferramentas de modelagem molecular surgem com a finalidade de desenvolverem a compreensão conceitual e minimizarem o aprendizado mecânico dos estudantes no Ensino de Química. A presente pesquisa busca promover uma melhor compreensão de conceitos e cálculos sobre os conteúdos de Termodinâmica Química abordados na disciplina de Físico-Química I (FQI) para uma amostra de 14 estudantes do curso de Licenciatura em Química da Universidade Estadual do Piauí (UESPI). Dessa forma, foram produzidos e aplicados tutoriais que auxiliaram na utilização dos *softwares* de modelagem molecular pelos graduandos a partir da inserção das aulas práticas computacionais na disciplina. O método de pesquisa empregado foi uma abordagem qualitativa do tipo estudo de caso, e quantitativa, utilizando como instrumentos de coleta de dados, questionários subjetivos e escalas do tipo Likert de cinco pontos, sendo aplicados ao término das aulas práticas computacionais. A partir das análises dos resultados pode-se perceber que a utilização de tal ferramenta de ensino contribuiu para o aprofundamento do conhecimento termodinâmico, ajudou a estabelecer uma visão mais realística e simbólica do mundo microscópico, minimizou as limitações matemáticas na obtenção dos cálculos e melhorou o interesse e a motivação dos estudantes pelo aprendizado. Desse modo, foi possível mostrar a importância da utilização e aplicação dos *softwares* de modelagem molecular no ensino de termodinâmica, abordando e esclarecendo conceitos, e constatando melhores desempenhos dos estudantes.

Palavras-chave: Ensino de Química; Termodinâmica Química; *Softwares* de Modelagem Molecular; Tutoriais; Aulas Práticas Computacionais.

Abstract

SÁ, E. R. A. **Thermodynamics: a teaching proposal from computational chemistry**. 2017. 102 f. Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Química, Departamento de Química, Universidade Federal do Piauí, Teresina, 2017.

The educational process has undergone major transformations in the last decades, for example, through the use of tools that allow the visualization and reproduction of dynamic models. In this case, simulation softwares and molecular modeling tools emerge with the purpose of developing a conceptual comprehension and minimizing the mechanical learning of students in Chemistry Teaching. The present research seeks to promote a better understanding of the concepts and calculations on the contents of Chemical Thermodynamics covered in the discipline of Physicochemical I (FQI). With a sample of 14 undergraduate students from Chemistry Degree, the study took place at the State University of Piauí (UESPI). In this way, tutorials were produced and applied to help in the use of molecular modeling softwares by undergraduates. These tutorials were presented to the students at the practical classes in the discipline. The research method used was a qualitative approach of the case-study type and a quantitative approach, using as data collection instruments: subjective questionnaires and five-point Likert-type scales, being applied at the end of the practical computational classes. From the analysis of the results it is possible to see that the use of this teaching tool contributed to a better understanding of the thermodynamic. It also helped to establish a more realistic and symbolic view of the microscopic world, minimizing mathematical limitations in obtaining calculations, and improving student interest and motivation for learning. Thus, it was possible to show the importance of the use and application of molecular modeling softwares in the teaching of thermodynamics, approaching and clarifying concepts, and confirming better student performance.

Keywords: Chemistry teaching; Chemical Thermodynamics; Molecular Modeling Softwares; Tutorials; Computational Practical Classes.

Lista de Figuras

Figura 1 - Observação das aulas teóricas da disciplina de FQI.....	35
Figura 2 - Aplicação das avaliações diagnósticas	36
Figura 3 - Esquema de execução da pesquisa	37
Figura 4 - Argumentação dos estudantes a cerca dos tutoriais associados às aulas práticas computacionais	41
Figura 5 - Construção e visualização das moléculas com os <i>softwares</i> GaussView 5.0 e o Avogadro 1.1.1	42
Figura 6 - Habilidades desenvolvidas pelos discentes com o uso dos <i>softwares</i> GaussView 5.0 e Avogadro 1.1.1	44
Figura 7 - Argumentação dos graduandos a cerca da obtenção, análise e interpretação dos dados termodinâmicos com o <i>software</i> Gaussian 09W	47
Figura 8 - Diagnóstico dos dados termodinâmicos pelos estudantes ao utilizar o <i>software</i> Gaussian 09W.....	49
Figura 9 - O uso do <i>software</i> MOPAC2016 pelos alunos para a obtenção dos cálculos termodinâmicos	52

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Principais funções de bases e seus modos de descrição dos orbitais atômicos	28
Tabela 2 - Objetivos das avaliações diagnósticas.....	36
Tabela 3 - Finalidades das aplicações dos tutoriais	40

Lista de Equações

Equação 1	21
Equação 2	21
Equação 3	21
Equação 4	21
Equação 5	22
Equação 6	22
Equação 7	22
Equação 8	22

Lista de Abreviaturas e Siglas

AD: Avaliação Diagnóstica

AM1: *Austin Model 1*

CBS: *Complete Basis Set*

CCCBDB: *Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase*

CEP: Comitê de Ética em Pesquisa

CPU: Unidade Central de Processamento

DCNs: Diretrizes Curriculares Nacionais

DFT: Teoria do Funcional da Densidade (do inglês *Density Functional Theory*)

EQ: Ensino de Química

FQI: Físico-Química I

GB: *Gigabyte*

GHz: *Giga hertz*

HOMO: *Highest Occupied Molecular Orbital*

HF: Hartree-Fock

IR: Infravermelho (do inglês *Infrared*)

LUMO: *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*

MCCM: Modelos de Correlação com uso de Multi Coeficientes

MNDO: *Modified Neglect of Diatomic Overlap*

MOPAC: *Molecular Orbital PACkage*

NDDO: *Neglect of Differential Diatomic Overlap*

NPG: Núcleo de Pós-Graduação

PM3: Modelo de Parametrização 3 (do inglês *Parameterization Model 3*)

PM6: Modelo de Parametrização 6 (do inglês *Parameterization Model 6*)

PM7: Modelo de Parametrização 7 (do inglês *Parameterization Model 7*)

RAM: Memória de Acesso Aleatório (do inglês *Random Access Memory*)

SE: Semiempírico

TCLE: Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

TQ: Termodinâmica Química

ZPE: Energia do Ponto Zero (do inglês *Zero-Point Energy*)

3D: Tridimensional

Sumário

1 INTRODUÇÃO	17
2 OBJETIVOS	20
2.1 Geral	20
2.2 Específicos	20
3 REVISÃO DA LITERATURA	21
3.1 O Ensino de Termodinâmica Química	21
3.2 O Computador como Ferramenta Educacional	22
3.3 A Química Quântica Computacional	23
3.4 Os Métodos de Cálculo	24
3.4.1 <i>Ab initio</i>	25
3.4.1.1 Hartree-Fock.....	25
3.4.2 Semiempíricos	26
3.5 Funções de Base	27
3.6 Os Softwares de Modelagem Molecular	29
3.6.1 Gaussian	29
3.6.2 GaussView.....	30
3.6.3 MOPAC	30
3.6.4 Avogadro	31
3.7 Os Softwares Educacionais no Ensino de Química	31
4 ESTRATÉGIA METODOLÓGICA	33
4.1 Caracterização da Área, Sujeito da Pesquisa e Coleta de Dados	34
4.2 Natureza da Pesquisa	34
4.3 Observação das Aulas Teóricas e Aplicação das Avaliações Diagnósticas	35
4.4 Elaboração dos Tutoriais Voltados aos Softwares de Modelagem Molecular	37
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	39
5.1 O Uso dos Tutoriais no Desenvolvimento das Aulas Práticas Computacionais	40
5.2 A Importância da Visualização Gráfica ao Utilizar os Softwares de Modelagem Molecular	41
5.3 Cálculos Termodinâmicos no Gaussian 09W	42
5.4 Cálculos Termodinâmicos no MOPAC2016	43
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	53
REFERÊNCIAS	54
APÊNDICES	63
ANEXOS	92

1 INTRODUÇÃO

A educação vem passando por grandes mudanças em sua forma e conteúdo ao longo das últimas décadas devido a introdução de uma série de novos fatores tecnológicos e comportamentais, em todo o cenário mundial. A inserção das mídias como o rádio, a televisão e, mais recentemente, o computador e a *internet* nos meios tradicionais de educação vem gerando uma transformação no contexto educacional para professores e pesquisadores. Muitas pesquisas estão sendo realizadas com o objetivo de adequar antigas técnicas de ensino as novas tecnologias e as recentes demandas surgidas nesse período (MELO; MELO, 2005).

Em muitas décadas, os únicos meios disponíveis para os educadores foram às representações pictóricas, esquemáticas ou modelos estáticos. Nas duas últimas, os pesquisadores veem sugerindo várias formas de abordagens pedagógicas aos estudantes através da investigação de métodos e da aplicação de ferramentas computacionais, proporcionando o desenvolvimento da capacidade intuitiva e representativa do alunado por meio da utilização das simulações computacionais e das ferramentas de modelização (BARNEA; DORI, 2000; WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001).

Considerando tais argumentos surgiu a necessidade de inserir o computador no Ensino de Química (EQ), permitindo assim que os alunos explorassem, entre outros, os aspectos conformacionais das moléculas e conseqüentemente, as propriedades químicas e físicas e seus arranjos tridimensionais (3D) de acordo com os modelos existentes. O uso da química computacional pode auxiliar na assimilação dos conteúdos, como na aplicação a problemas de interesse industrial, contextualizando o ensino de Química Quântica e estimulando o interesse dos alunos em desenvolver atividades de pesquisa nessa área (ARROIO *et al.*, 2005).

Com o desenvolvimento tecnológico, os profissionais da educação química dispõem de ferramentas que proporcionam visualização e reprodução de modelos dinâmicos. Neste sentido, os *softwares* de simulação e as ferramentas de modelagem molecular, podem ser de grande proveito para que os educadores consigam proporcionar condições aos alunos para o desenvolvimento da compreensão conceitual e redução do aprendizado mecânico a cerca dos conteúdos estudados (RIBEIRO; GRECA, 2003).

Desta forma os usos das simulações computacionais podem melhorar o entendimento dos estudantes nos fenômenos químicos, tanto ao nível macroscópico (experimentos, observáveis e mensuráveis), microscópico (partículas, átomos, íons e moléculas) bem como a nível simbólico, como os símbolos, as equações, os coeficientes, gráficos e números (CAROBIN; NETO, 2003). Ao utilizar práticas computacionais de química, o aluno poderá

observar e analisar certas situações difíceis de serem demonstradas em sala de aula, as quais são muitas vezes apenas teoricamente abordadas pelo professor, deixando a carga dos alunos a difícil materialização visual daquele conteúdo.

As Diretrizes Curriculares Nacionais (DCNs) estabelecidas para os cursos de Licenciatura em Química recomendam que a formação docente do estudante proporcione o desenvolvimento de habilidades que o capacitem para a preparação e criação de recursos didáticos e instrucionais relativos à sua prática e avaliação da qualidade do material disponível no mercado, além de ser preparado para atuar como pesquisador e adquirir conhecimentos básicos do uso de computadores e as suas formas de aplicação no Ensino de Química (BRASIL, 2002).

Apesar das orientações dos DCNs para os cursos, muitos estudantes da Educação Superior enfrentam dificuldades ao estudar os conteúdos de Termodinâmica Química (TQ) (BANERJEE, 1995). Mesmo sendo um assunto de grande importância para a fundamentação da ciência química, a maioria dos alunos concluem os cursos com uma compreensão muito limitada (OCHS, 1996). O curso de Físico-Química, onde os alunos veem conceitos avançados de termodinâmica e cinética, é considerado por muitos estudantes com um dos cursos mais difíceis (THOMAS, 1997). A termodinâmica faz parte dos cursos de graduação em Química, Física e Engenharias, sendo essa de grande importância para avaliar as capacidades de compreensão dos alunos em Físico-Química e seus problemas através da aplicação dos princípios termodinâmicos no cotidiano, em termos de desenvolvimento industrial e humano. Porém o ponto mais preocupante são os alunos como sujeitos deste estudo, pois serão os professores do futuro. Dessa forma a compreensão das ideias termodinâmicas fundamentais são cruciais para educar as futuras gerações (TAMANI; TALBI; RADID, 2015).

Outro ponto relevante está relacionado as dificuldades matemáticas em solucionar as equações da Mecânica Quântica, em particular as relacionadas à equação de Schrödinger, fato esse característico desde o seu surgimento (FREITAS, 1998). A aplicação e resolução de problemas termodinâmicos envolvendo essas equações, influenciam diretamente no desempenho dos estudantes, pois muitos não conseguem utiliza-las ou compreende-las, impossibilitando o aprendizado.

Até recentemente a inserção da química computacional nos cursos de graduação apresentava algumas dificuldades e limitações relacionadas aos *softwares* e *hardwares* dos computadores. Porém nos últimos anos ocorreram muitas aplicações de química computacional, devido à disponibilidade de programas mais didáticos para os alunos e a

redução do tempo computacional (LINENBERGER; COLE; SARKAR, 2011; CLAUSS; NELSEN, 2009; MCNAUGHT, 2011; JOHNSON; ENGEL, 2011; ROWLEY; WOO; MOSEY, 2009; CLAUSEN, 2011; MONTGOMERY, 2007; WANG, 2012; SALTER; FORESMAN, 1998). Com o crescente uso de técnicas computacionais em investigação química, é fundamental fornecer meios para a introdução efetiva de graduandos nesta área com a implementação de ferramentas computacionais para o apoio e melhoria da aprendizagem (ESSELMAN; HILL, 2016).

Assim a utilização das ferramentas computacionais podem orientar o trabalho e criar condições de aprendizagem para os estudantes, através do desenvolvimento de atividades planejadas e estruturadas pelo professor, assumido o papel de mediador entre o aluno e o potencial de uso do computador. Para que o processo aconteça de forma significativa, é necessário que os docentes estejam aptos e qualificados o suficiente para possuírem o domínio da tecnologia utilizada como suporte metodológico ou ainda que estejam buscando qualificações em grupos de pesquisa em ensino, designados tanto para os profissionais da educação básica como da educação superior (ARROIO *et al.*, 2005; VASCONCELOS; ARROIO, 2013).

Dentro desse contexto, o presente trabalho buscou realizar um estudo de caso por meio da construção e aplicação de tutoriais aos *softwares* de modelagem molecular em aulas práticas computacionais com os graduandos do quinto semestre do curso de Licenciatura em Química da Universidade Estadual do Piauí (UESPI), *campus* Poeta Torquato Neto, na cidade de Teresina, Piauí. Tendo como finalidade facilitar e melhorar a compreensão dos estudantes a cerca dos conceitos e cálculos termodinâmicos inseridos no plano de disciplina de Físico-Química I (FQI).

2 OBJETIVOS

2.1 Geral

Facilitar a compreensão de graduandos sobre conceitos e cálculos de Termodinâmica Química abordados na disciplina de Físico-Química I, a partir da aplicação de tutoriais em aulas práticas computacionais utilizando *softwares* de modelagem molecular.

2.2 Específicos

- ✓ Aplicar Avaliações Diagnósticas (AD) a fim de identificar as dificuldades dos graduandos com os conteúdos de Termodinâmica Química;
- ✓ Produzir e executar os tutoriais com a finalidade de diminuir as limitações apresentadas pelos estudantes;
- ✓ Realizar as aulas práticas computacionais a partir das aplicações dos tutoriais aos *softwares* de modelagem molecular;
- ✓ Construir e otimizar as estruturas moleculares com o auxílio dos *softwares* GaussView 5.0 e Avogadro 1.1.1, melhorando as habilidades de visualização espacial das moléculas e a compreensão dos níveis microscópico e simbólico;
- ✓ Submeter os cálculos aos métodos *ab initio* e Semiempírico nos *softwares* Gaussian 09W e MOPAC2016, respectivamente, para a obtenção das propriedades termodinâmicas das moléculas;
- ✓ Analisar os arquivos de saída gerados pelos *softwares* de modelagem molecular para os sistemas simulados;
- ✓ Minimizar as dificuldades dos estudantes ao acesso e obtenção dos cálculos termodinâmicos com os *softwares* de modelagem molecular;
- ✓ Comparar os dados teóricos obtidos com os valores energéticos experimentais disponíveis para cada substância nas bases de dados NIST *Chemistry WebBook* e *Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase (CCCBDB)*.

3 REVISÃO DA LITERATURA

3.1 O Ensino da Termodinâmica Química

A termodinâmica é um ramo da física que busca estudar os processos de transferência de energia, fundamentando-se em leis naturais para os seus estudos. A primeira lei da Termodinâmica Química investiga e acompanha as variações de energia de um sistema e realiza o cálculo da quantidade de calor resultante de uma reação. A primeira lei ou princípio de conservação da energia observa a variação da energia interna (ΔU) de um sistema através da troca de energia com a sua vizinhança na forma de calor (q) e trabalho (w), sendo obtida por meio da Equação 1 (ATKINS; JONES, 2012).

$$\Delta U = q + w \quad (1)$$

A energia interna (U) representa a soma das energias cinética e potencial, resultando na energia total do sistema (ATKINS; PAULA, 2006). A variação de energia interna pode ser obtida também pela diferença entre a energia interna do estado final (U_f) e a inicial (U_i) de um sistema, como mostra na Equação 2.

$$\Delta U = U_f - U_i \quad (2)$$

A segunda lei da Termodinâmica Química analisa a espontaneidade das transformações e explica por que algumas reações ocorrem, enquanto outras não. A espontaneidade de uma reação tende a crescer com o aumento da entropia (S), a qual é definida pelo grau de desordem do sistema ou do universo. A temperatura (T) constante, a variação de entropia (ΔS) de um sistema pode ser calculada pela Equação 3 (ATKINS; JONES, 2012).

$$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T} \quad (3)$$

A capacidade calorífica (C) corresponde a constante de proporcionalidade entre o calor (q) fornecido a uma substância e a variação de temperatura (ΔT) ocorrida, conforme a Equação 4 (ATKINS; JONES, 2012).

$$C = \frac{q}{\Delta T} \quad (4)$$

Durante a variação de energia do sistema em uma reação química, o cálculo da entalpia padrão da reação ($\Delta_r H^0$) a pressão constante pode ser realizado pela diferença entre a soma das entalpias padrão de formação ($\Delta_f H^0$) dos produtos e a soma das entalpias de

formação dos reagentes, levando-se em consideração os coeficientes estequiométricos (v) da reação (ATKINS; PAULA, 2006), de acordo com a Equação 5.

$$\Delta_r H^0 = \sum_{\text{Produtos}} v \Delta_f H^0 - \sum_{\text{Reagentes}} v \Delta_f H^0 \quad (5)$$

A entropia padrão de reação ($\Delta_r S^0$) pode ser definida pela diferença entre entropia molar dos produtos e a entropia molar dos reagentes, conforme a Equação 6 (ATKINS; PAULA, 2006):

$$\Delta_r S^0 = \sum_{\text{Produtos}} v S_m^0 - \sum_{\text{Reagentes}} v S_m^0 \quad (6)$$

Para calcular a energia de Gibbs padrão de reação ($\Delta_r G^0$) ou energia livre padrão de reação é necessário possuir os valores das entalpias e entropias padrão das reações associados à temperatura (T) do sistema em estudo, como mostra a Equação 7.

$$\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T \Delta_r S^0 \quad (7)$$

Da mesma forma que se define a entropia padrão de reação, a energia de Gibbs padrão de reação ($\Delta_r G^0$) também pode ser definida, conforme a Equação 8 (ATKINS; PAULA, 2006):

$$\Delta_r G^0 = \sum_{\text{Produtos}} v G_m^0 - \sum_{\text{Reagentes}} v G_m^0 \quad (8)$$

Dessa forma com o uso dos *softwares* de modelagem molecular é possível obter todos os parâmetros termodinâmicos, como por exemplo, energia interna, capacidade calorífica, entalpia (H), entropia e energia livre de Gibbs (G) a partir do comando específico no *software* utilizado, sendo obtidas na forma de energias absolutas (ORTOLAN, 2014). Geralmente não se utiliza as energias absolutas obtidas nos cálculos termoquímicos, pois na maioria dos casos se trabalha apenas com as energias relativas (LEWARS, 2011). Com isso, por meio das equações termodinâmicas, podemos utilizar os resultados dos cálculos para se chegar às energias relativas desejadas.

3.2 O Computador como Ferramenta Educacional

Com a crescente globalização da informação e a necessidade de melhoria na qualidade do ensino, surge a necessidade em utilizar novas metodologias no processo educacional, de forma a despertar o interesse do aprendiz. Um recurso complementar para o ensino é a inserção do computador como ferramenta no aprendizado dos estudantes, destacando-se como uma boa alternativa no contexto educacional (RODELLO; SAKAI; MANOEL, 2002).

As ferramentas computacionais permitem a abordagem de novas estratégias de ensino. Esquembre (2004) destaca que as novas tecnologias proporcionam oportunidades para a criação de ambientes de aprendizagem inovadores, que vão além do uso de instrumentos como quadros, pinceis e livros, apresentando problemas do mundo real e trazendo-os para a sala de aula, tornando o aprendizado mais interessante, proporcionando meios para a melhoria da aprendizagem e originando oportunidades para reflexão e revisão, construindo comunidades locais e globais, que incluem professores, administradores, alunos, pais e cientistas, ampliando as oportunidades de aprendizagem.

Segundo Azevedo (1997), a inserção de novas tecnologias educacionais deve buscar soluções para promoção de melhorias no processo de ensino e aprendizagem, pois os recursos computacionais, se utilizados adequadamente, podem melhorar o conceito de aula, além de criar novas estruturas cognitivas. O uso do computador na educação consiste na informatização dos meios tradicionais de instrução, dando condições de enriquecer ambientes de aprendizagem, nos quais o aluno que interage com os objetivos desse ambiente tem a chance de construir o seu conhecimento por meio de recursos antes não disponíveis, mas muito mais atrativos e motivadores (DENARI; SACIOLOTO; CAVALHEIRO, 2016).

Nota-se que a utilização de recursos computacionais no ensino superior de química cresceu nos últimos anos e que, mesmo com grande aplicação na educação há algum tempo, ainda é importante avaliar a utilização desses recursos. Pois a sua utilização depende de fatores cruciais, como o conhecimento do professor a cerca da ferramenta, a forma de como irá inserir e trabalhar tal metodologia de ensino (AZEVEDO, 1997; NASCIMENTO *et al.*, 2005)

Deste modo o ambiente de ensino pautado no uso de computadores pressupõe uma interação onde os professores e estudantes aprendem e atualizam continuamente os seus saberes "disciplinares" e as suas competências pedagógicas para o desenvolvimento do ensino (MELO; MELO, 2005).

3.3 A Química Quântica Computacional

A Química é considerada uma ciência experimental, já a Química Teórica com o seu crescente desenvolvimento tem se mostrado como uma grande ferramenta auxiliar no apoio, na análise e na interpretação de dados que muitas vezes não são possíveis de serem obtidos experimentalmente. A química computacional comprova que o laboratório químico e o computador são igualmente importantes para o desenvolvimento químico na atualidade.

Como por exemplo, os prêmios Nobel em Química de J. A. Pople e W. Kohn através das suas contribuições no desenvolvimento de técnicas computacionais para a elucidação de estruturas moleculares e de reatividade (TRUHLAR; MCKOY, 2000). Como também o conquistado por Martin Karplus, Michael Levitt e Arieh Warshel, pelo desenvolvimento de metodologias computacionais que possibilitaram compreender melhor as reações químicas de alta complexidade (SKAF, 2013).

Os conhecimentos de Química Quântica computacional têm sido bastante aplicados nos diversos campos como no desenho de novos fármacos, ciência dos materiais, sínteses em geral, etc. As previsões da Química Quântica computacional são utilizadas como complemento de informações nas investigações científicas. Mesmo sendo uma área promissora, certos pesquisadores são desencorajados a utilizar essa ferramenta pela falta de experiência com a área ou por dificuldades que possam encontrar, devido aos complexos conceitos e interfaces da química computacional (ALLOUCHE, 2011).

Com o objetivo de facilitar e proporcionar uma melhor compreensão da ciência química, a química computacional vem sendo uma alternativa de aperfeiçoamento e entendimento do estudante na compreensão de fenômenos químicos e físico-químicos (ORTOLAN, 2014) e também de conceitos da Química Quântica. Os *softwares* de química computacional facilitam a capacidade de compreensão dos conteúdos de Química e, trazendo uma interface onde é possível visualizar a estrutura dos átomos e moléculas (MASSAROTTI, 2015).

3.4 Os Métodos de Cálculos

O progresso das pesquisas em química computacional tem contribuído para o desenvolvimento de diversas áreas da Química. Isso vem sendo consolidado com a popularização dos modelos químico quânticos e o desenvolvimento de novos métodos computacionais, além do incremento do poder computacional e da acessibilidade em adquirir computadores (ALCANI; MÓ; YÀÑEZ, 2001).

A abrangência da química computacional pode ser dividida em métodos empíricos que usam os parâmetros das leis da natureza como Informática, Química, Mecânica Estatística, Mecânica Molecular e métodos Semiempíricos (SE). Enquanto a outra classificação refere-se aos métodos não empíricos, conhecidos como *Ab Initio*, sendo desenvolvidos exclusivamente com dados teóricos, não contendo informações experimentais (GILBERT, 2007).

Os métodos *ab initio* podem fornecer resultados precisos para sistemas pequenos, com poucos átomos e elétrons, no entanto sendo computacionalmente inviável para moléculas grandes. No entanto, métodos SE e DFT (Teoria do Funcional da Densidade) podem realizar com facilidade os cálculos de estrutura eletrônica de sistemas grandes, porém os resultados obtidos pelos métodos DFT são mais precisos e confiáveis que os métodos SE (ATKINS; PAULA; FRIEDMAN, 2009).

Com isso, a escolha de um método de cálculo para a resolução de um problema químico é um trabalho que requer bastante conhecimento científico da área, tornando-se uma tarefa complexa. Outro fator importante que deve ser considerado é o tempo computacional, o qual estar relacionado à velocidade e a capacidade de memória do computador, pois a precisão dos cálculos químicos está associada ao método e ao custo do cálculo (ATKINS; PAULA; FRIEDMAN, 2009).

3.4.1 *Ab initio*

O método *ab initio* soluciona a equação de onda independente do tempo (não relativística) de Schrödinger utilizando para isso aproximações. O uso da aproximação de Born-Oppenheimer, separa o movimento dos elétrons dos núcleos, devido apresentarem uma massa muito menor e estarem se movimentando muito mais rapidamente que os núcleos (MEUWLY, 2010). Esse método de cálculo aplica aproximações bem definidas, podendo ser sistematicamente melhoradas até um resultado convergente dos cálculos realizados (THIEL, 2013). Como exemplo, podemos citar o método Hartree-Fock (HF) que é considerado como o mais simples e o mais utilizado dos cálculos *ab initio* (LEWARS, 2011).

3.4.1.1 Hartree-Fock

O método de Hartree (HARTREE, 1928a,b) é considerado um dos primeiros métodos a utilizar um procedimento numérico iterativo para cálculos de estrutura eletrônica. É possível afirmar que este método representa o ponto de partida para os principais métodos de estrutura eletrônica do tipo *ab initio*, uma vez que foi o precursor do método de Hartree-Fock. As suas principais ideias podem ser de grande importância para o ensino de Química Quântica, apesar da sua aplicação se restringir a átomos (MONTE; VENTURA, 2011).

Após um ano da publicação dos três primeiros artigos relacionados ao método de Hartree (HARTREE, 1928a,b,c), Slater demonstrou a forma funcional da função de onda mais simples possível que satisfazia aos princípios da indistinguibilidade e da antissimetria, a

chamada determinante de Slater. Em 1930, Fock a partir das habilidades adquiridas na obtenção das equações de Hartree por meio do método variacional (FOCK, 1930) e o aplicando à função de onda tentativa apresentada na forma de determinante de Slater, deduziu as conhecidas equações de Hartree-Fock (MONTE; VENTURA, 2011).

As equações de Hartree-Fock constituíram o ponto inicial para a maioria dos métodos de estrutura eletrônica usados atualmente. Para a obtenção e aplicação destas equações a sistemas moleculares grandes é necessário à utilização da expansão de funções de onda de um elétron (sendo do tipo orbital se considerar apenas as coordenadas espaciais ou spin-orbital se incluir também as coordenadas de spin) em termos de funções de base ou método de combinação linear de orbitais atômicos, sendo uma técnica muito utilizada e de grande importância para a compreensão e consequências das equações de Hartree-Fock. Além do que, os métodos correlacionados pós-Hartree-Fock utilizam os orbitais moleculares canônicos e suas energias, tornando evidentes algumas das propriedades mais relevantes desses cálculos durante a demonstração da obtenção das equações de Hartree-Fock (CUSTODIO, 2015).

3.4.2 Semiempíricos

Os cálculos semiempíricos são configurados com a mesma estrutura do método Hartree-Fock associados a um Hamiltoniano e uma função de onda. Para isso, certas informações são aproximadas, ignoradas ou ainda negligenciadas. Desse modo com o objetivo de reduzir os erros introduzidos pela omissão de parte do cálculo, o método é submetido a uma parametrização, que geralmente é o ajuste de dados experimentais com um estimado parâmetro (MASSAROTTI, 2015).

Dentre os métodos semiempíricos, é importante destacar o MNDO (*Modified Neglect of Diatomic Overlap*), AM1 (*Austin Model 1*), PM3 (*Parameterization Model 3*), PM6 (*Parameterization Model 6*) e o PM7 (*Parameterization Model 7*), por serem os mais utilizados. O MNDO é considerado o antecessor dos outros métodos, gerando resultados qualitativos para vários sistemas orgânicos e podendo também originar resultados imprecisos. O AM1 é consideravelmente melhor que o MNDO, principalmente com a predição do calor de formação, mas possui uma aplicação limitada para alguns elementos químicos (H, C, N, O, F, Al, Si, P, S, Cl, Br e I). O PM3 apresenta as mesmas restrições quanto aos elementos químicos do AM1 com a exceção do Bromo (Br), possuindo melhores resultados para as medidas de energia e comprimento de ligação (YOUNG, 2001). O método PM6 é uma reparametrização do PM3, tornando um dos métodos mais utilizados, pois a sua aprimorada

precisão gera resultados para mais de 70 elementos e parâmetros energéticos (MASSAROTTI, 2015).

Mais recentemente surgiu o método PM7, uma forma modificada do PM6, sendo nele removidos alguns erros na teoria NDDO (*Neglect of Differential Diatomic Overlap*) que afetam grandes sistemas. Os seus parâmetros atômicos e diatômicos foram re-otimizados, os erros médios nos compostos orgânicos foram reduzidos em cerca de 10%, e os erros em grandes compostos orgânicos e sólidos foram expressivamente reduzidos (STEWART, 2016).

3.5 Funções de Base

O modelo químico é desenvolvido para estimar a função de onda molecular e, assim obter, a energia, a estrutura eletrônica e a geometria, além de outras propriedades dos íons e moléculas. Este modelo é composto por um método e uma função de base gaussiana, como HF/3-21G (FORESMAN; FRISCH, 1993).

De acordo com o método utilizado, os tipos de modelos diferem nas formas de otimizar as estruturas, na obtenção da energia do ponto zero, no tratamento para recuperar a correlação eletrônica, nas considerações sobre as limitações das funções de base gaussianas e nas correções relacionadas as energias spin-órbita e correlação do caroço (VESSECCHI *et al.*, 2008). Os modelos que mais se destacam são: os Complete Basis Set (CBS), (OCHTERSKI; PETERSON; MONTGOMERY, 1996), os modelos Gaussian (Gn), (CURTISS *et al.*, 2000), os modelos Weinzman (Wn), (MARTIN; OLIVEIRA, 1999), os modelos de correlação com uso de multi-coeficientes (MCCM), (FAST *et al.*, 1999) e os esquemas propostos por Morgon (MORGON, 1998).

Os modelos CBS foram propostos por Petersson e seus colaboradores, os quais utilizam métodos de alto nível de correlação eletrônica, combinados a extrapolação das funções de base (OCHTERSKI; PETERSON; MONTGOMERY, 1996). Os modelos Gn introduzidos por Pople *et al.* (2000), assim como os CBS, estimam a energia dos sistemas com alto nível de correlação, no entanto empregando grandes conjuntos de funções de bases, embasados em cálculos de alto nível para correção da energia de ponto zero. Os modelos Wn (MARTIN; OLIVEIRA, 1999) utilizam a extrapolação de funções de base semelhante aos modelos CBS, diferenciando quanto aos métodos empregados para o cálculo da energia molecular. Enquanto que os propostos por Morgon (1998) utilizam pseudopotenciais para descrição de orbitais de caroço da estrutura eletrônica. Já os MCCMs abrangem mais de um

nível de teoria para cálculo da estrutura eletrônica e diferentes conjuntos de funções de bases, combinando com os parâmetros empíricos (FAST *et al.*, 1999).

É importante conhecer os modelos compostos para saber qual deles empregar quando for obter as propriedades termoquímicas para uma determinada classe de substâncias, obtendo um melhor desempenho e um menor tempo computacional. Cada modelo possui a sua versatilidade e aplicação característica, sendo ainda a maioria deles limitado quanto à aplicação a moléculas com grande número de átomos. Para a obtenção de grandezas termoquímicas, os modelos Gn e CBS são os mais utilizados (VESSECCHI *et al.*, 2008).

Para uma boa descrição dos orbitais moleculares em uma ligação química é necessária a inclusão de funções polarizadas e difusas. Na função polarizada é adicionado um orbital de momento angular maior do que é esperado. No estudo da formação de uma ligação, o orbital s do átomo de Hidrogênio, por exemplo, passa a ter contribuição do orbital p, e o orbital p do átomo de Lítio passa a ter contribuição dos orbitais d, e assim por diante. Funções de polarização adicionam orbitais do tipo p para o hidrogênio e do tipo d para os átomos pesados. As funções difusas são usadas para estudar sistemas com grande distorção eletrônica, como, par isolado de elétron. A notação que representa a inclusão de funções de polarização é o símbolo (p) para os orbitais do tipo p e (d) para os orbitais do tipo d. Para a inclusão de funções difusas na base adiciona o símbolo (+) significando que funções difusas do tipo s e p serão inseridas aos átomos pesados, e (++) representa funções difusas do tipo s que serão adicionadas ao átomo de H (PEREIRA, 2008). Na Tabela 1 a seguir são observadas algumas funções de bases e o modo de descrição dos orbitais atômicos.

Tabela 1 - Principais funções de bases e seus modos de descrição dos orbitais atômicos

Base	Modo de descrição dos orbitais atômicos
STO-3G	1 função de base com 3 funções primitivas por orbital
STO-3G*	1 função de base com 6 funções primitivas polarizantes por orbital
3-21G	1 função de base com 3 funções primitivas por orbital
6-31G	2 funções de base, uma com 3 funções primitivas e uma com 1 função primitiva
6-31++G(d,p)	Base 6-31G com funções difusas (++) e de polarização nos orbitais (d e p)
6-311++G(d,p)	3 funções de base, uma com 3 funções primitivas e duas com 1 função primitiva. Uso de funções difusa e de polarização

Fonte: Adaptado de PEREIRA, 2008 e OLIVEIRA, 2010.

3.6 Os Softwares de Modelagem Molecular

Na atualidade existe uma variedade de *softwares* que realizam cálculos quânticos, dentre eles podemos destacar o SPARTAN (HEHRE, 2016), Gaussian (FRISCH *et al.*, 2009), GAMESS (SCHMIDT, 2016), HyperChem (HyperChem *Professional* 8.0, 2013), Q-Chem (ADAMS *et al.*, 2010), ACES II (STANTON, 2014), ADF (BAERENDS *et al.*, 2013), MOLPRO (WERNER *et al.*, 2012), MOPAC2012 (STEWART, 2012) e MOPAC2016 (STEWART, 2016). Sendo esses bastante utilizados em cálculos com aplicação em modelagem molecular e para obtenção das propriedades de interesse das moléculas em estudo.

Os pacotes computacionais que utilizam os métodos quânticos *ab initio* (CADPAC, GAMESS, GAUSSIAN, HONDO, etc.) e semiempíricos (AMPAC, MOPAC, etc.) baseiam-se no formalismo de orbitais moleculares através de diferentes abordagens (BOYD, 1990; CLARK, 1987; BREWSTER *et al.*, 1994). Os cálculos teóricos, além de fornecer dados estruturais, são utilizados na obtenção das propriedades energéticas dos íons, átomos e moléculas, tais como: calores de formação, energias eletrônicas, energias do HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) e do LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), energias de ionização, densidades eletrônicas atômicas, cargas atômicas líquidas, densidades eletrônicas dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), ordens de ligação e momentos de dipolo, entre outros (COHEN *et al.*, 1990; KOROLKOVAS; BURCKHALTER, 1976).

3.6.1 Gaussian

O pacote computacional Gaussian começou a ser desenvolvido em 1970 na *Carnegie-Mellon University* pelo grupo de John Pople, sendo laureado em 1998 com o Nobel em Química, devido a sua contribuição ao desenvolvimento dos métodos computacionais para a Química Teórica (PICINFORMÁTICA, 2016).

Gaussian é considerado uma importante ferramenta de pesquisa para simular como as substâncias e reações se comportarão em determinadas condições (MASSAROTTI, 2015). O programa calcula propriedades químicas e físicas, tais como as propriedades energéticas, as superfícies potenciais de energia de excitação, os efeitos substituintes, dentre outras. Os cálculos podem ser realizados para sistemas na fase gasosa ou em solução, no estado fundamental ou excitado (WASS, 2000).

Uma das versões mais recente da série de programas gaussianas é o Gaussian 09. Ele fornece recursos de última geração para a modelagem de estruturas eletrônicas, contendo

todos os recursos científicos de modelagem (FRISCH *et al.*, 2009). O pacote computacional Gaussian é uma ferramenta de código fechado (*closed code*), estando disponível no mercado para os sistemas operacionais *Windows*, *Linux* e *Mac OS X*.

3.6.2 GaussView

O GaussView é um programa de interface gráfica incluso no pacote computacional Gaussian, sendo imprescindível na importação de dados moleculares a serem processadas no Gaussian, assim como na visualização dos resultados. Com esse software é possível importar os bancos de dados, construir as moléculas de interesse, configurar as ligações, solicitar que o Gaussian execute os cálculos, monitorar e extrair os resultados e visualizar as propriedades moleculares. O Gaussian View 5.0 é a versão mais recente desse programa, trazendo a possibilidade de obter e visualizar o espectro de Infravermelho (IR) do composto (DENNINGTON; KEITH; MILLAM, 2009).

3.6.3 MOPAC

O MOPAC (*Molecular Orbital PACkage*) é um pacote computacional que utiliza métodos semiempíricos para o estudo das estruturas e reações do estado sólido e molecular. Os Hamiltonianos semiempíricos MNDO (DEWAR; THIEL, 1977), AM1 (DEWAR *et al.*, 1985), PM3 (STEWART, 1989), PM6, MNDO-*d* (THIEL; VOITYUK, 1996) e PM7 são utilizados na parte eletrônica do cálculo para obter os orbitais moleculares, o calor de formação e a sua derivada em relação à geometria molecular. Com o uso desses dados o *software* MOPAC pode calcular os espectros vibracionais, as quantidades termodinâmicas, os efeitos de substituição isotópica e as constantes de força para moléculas, íons, radicais e polímeros (STEWART, 2016).

Esse *software* é de código aberto (*open source*) e encontra-se disponível nas versões 7, 7.1, 2007, 2009, 2012 e 2016. O MOPAC2016 apresenta as melhores e mais fáceis ferramentas de manuseio para grandes biomoléculas e macromoléculas, como por exemplo, para a ionização e deionização de átomos e resíduos individuais, para superposição e especificação de átomos individuais (STEWART, 2016).

O usuário ao utilizar o MOPAC cria um arquivo que define um sistema molecular e o tipo de cálculo que o programa deve fazer por meio dos comandos de *softwares* com interface gráfica e compatíveis com o programa. O usuário faz com que o programa gere outro arquivo

baseado nos cálculos desejados e por fim obtenha as informações desejadas através dos cálculos quânticos computacionais (STEWART, 2016).

3.6.4 Avogadro

O Avogadro é um editor e visualizador de moléculas avançado, sendo esse projetado para uso em plataformas multicomputacionais em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e áreas afins. Oferece renderização flexível de alta qualidade e uma arquitetura *plugin* poderosa. É uma ferramenta de código aberto desenvolvida para uso em *Windows*, *Linux* e *Mac OS X*, e estando disponível em várias versões para *downloads* (HANWELL *et al.*, 2012).

Esse *software* permite que as moléculas sejam construídas e visualizadas em três dimensões sob vários ângulos e modelos de exibição. Devido possuir uma interface de fácil entendimento e manuseio, pode ser utilizado como recurso na compreensão de conceitos como: geometria molecular, ligações químicas, identificação de ângulos, hibridações, cálculo de energia, massa molecular, arranjo cristalino em aglomerados moleculares, entre outros. Avogadro realiza ainda cálculos de mecânica molecular, voltados para simulação computacional em química, sendo um excelente recurso para alunos e professores (MEDEIROS *et. al.*, 2016)

Dessa maneira o programa não se destina apenas para pesquisa em modelagem molecular, mas também para uso educacional, ajudando educadores em todo o mundo a encontrar aplicações e dicas de como usa-lo no Ensino de Química (AVOGADRO, 2016).

3.7 Os Softwares Educacionais no Ensino de Química

A obtenção de novas informações através da inovação tecnológica deve ser apreciada, sendo a escola o local mais apropriado para o desenvolvimento de novas metodologias de aprendizagens. Desta forma, torna-se necessário a inserção de ferramentas como os *softwares* de simulação em seu contexto educacional. Uma maneira adicional de se utilizar os computadores no ensino é através da simulação de experiências, podendo essas serem virtualmente demonstradas na tela do computador (MELO; MELO, 2005).

Existem atualmente muitos *softwares* gratuitos disponíveis na *internet* para *downloads* e outros com licença paga. Pode-se destacar que estas ferramentas, quando devidamente aplicadas, estimulam a aprendizagem e contribuem na adaptação do aluno a uma sociedade cada vez mais tecnológica (RAUPP; SERRANO; MARTINS, 2008).

O uso do computador na educação química tem provocado avanços no ensino das ciências físico-químicas (MORAIS; PAIVA, 2007). A presença do ambiente virtual tem possibilitado simular situações difíceis, complexas ou custosas, o que permite ao aluno a oportunidade de aplicar o conhecimento que seria puramente teórico usando um ambiente mais atraente e próximo do real (RODRIGUES *et al.*, 2008).

A função dos *softwares* de Química Quântica é transferir aos computadores a tarefa de realizar os cálculos, os quais são complexos de serem encontrados manualmente, fazendo com que o estudante interprete os resultados, associe-os aos conhecimentos teóricos e práticos, de acordo com os conhecimentos científicos disponível na literatura (VEIT; ARAUJO, 2004).

Quando essas ferramentas computacionais são aplicadas no Ensino de Química possibilitam a demonstração e a simulação de vários conceitos, podendo facilitar o aprendizado por meio da visualização dinâmica em diversos campos da química. A visualização em 3D de animações dinâmicas tem auxiliado os estudantes a representar simbolicamente os processos químicos e, portanto, a interpretar a descrição de alguns fenômenos nas dimensões macroscópica e microscópica (GIORDAN; GÓIS, 2005).

4 ESTRATÉGIA METODOLÓGICA

4.1 Caracterização da Área, Sujeito da Pesquisa e Coleta de Dados

A pesquisa foi aplicada na Universidade Estadual do Piauí, campus Poeta Torquato Neto, localizado na Rua João Cabral, 2231, bairro Pirajá, zona Norte de Teresina - PI. O universo da pesquisa foi composto por 14 alunos de duas turmas do curso de Licenciatura em Química matriculados no quinto período e cursando a disciplina de FQI. As turmas possuíam aulas em turnos diferentes, sendo uma no turno matutino com a participação de dez (10) alunos na pesquisa e outra no turno vespertino com a participação de quatro (04) alunos. Estando estes presentes em todas as etapas da pesquisa de forma voluntária através do conhecimento e assinatura do Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE).

A UESPI foi a instituição de ensino escolhida para desenvolver e executar a pesquisa devido possuir o curso de Licenciatura em Química e um laboratório de informática com os *softwares* de modelagem molecular (GuassView 5.0, Guassian 09W, HyperChem, Avogadro, MOPAC 2016) instalados nos computadores e disponíveis para o uso dos graduandos.

Para realizar a pesquisa, inicialmente o projeto foi submetido ao Comitê de Ética em Pesquisa (CEP) da instituição, meses antes de sua execução, sendo o mesmo aprovado e cadastrado na Plataforma Brasil com o número (49617315.3.0000.5209). A partir desse momento pode-se ter um primeiro contato com os professores responsáveis pelas disciplinas de FQI e com os alunos matriculados na mesma, para assim esclarecer os objetivos, a importância da pesquisa e solicitar a participação dos alunos voluntariamente por meio da assinatura do TCLE (Anexo B).

Após a aprovação do CEP (Anexo A) foi realizado reuniões com as duas turmas, para o esclarecimento das etapas e do período de execução do projeto. Foram aplicadas quatro práticas computacionais entre os meses de abril e setembro de 2016, referentes ao semestre letivo 2016.1. Os estudantes que aceitaram participar da pesquisa voluntariamente assinaram o TCLE como critério de inclusão e como critério de exclusão foi definido a eliminação dos sujeitos que não participaram de todas as etapas da pesquisa.

Após o primeiro contato, iniciou-se o período de observação dos alunos e professores nas aulas de FQI durante quatro semanas, e em seguida ocorreu à aplicação das avaliações diagnósticas nas salas de aulas, com a antecedência de sete (07) dias de cada prática computacional. As avaliações tiveram como objetivo verificar o nível de conhecimento a

cerca dos conteúdos abordados e adequar os tutoriais de acordo com as limitações dos estudantes em relação aos conteúdos termodinâmicos.

As aulas práticas computacionais foram executadas no laboratório do Núcleo de Pós Graduação (NPG) da UESPI com o auxílio dos tutoriais e utilizando como instrumento de coleta de dados, questionários subjetivos e escalas do tipo Likert com cinco pontos (concordo totalmente, concordo, indiferente, discordo e discordo totalmente). A escala de Likert nos permite medir as atitudes e conhecer o grau de concordância do entrevistado a cerca das afirmações propostas (LIKERT, 1932). As escalas se encontram inseridas nos questionários da pesquisa e disponíveis nos apêndices juntamente com as avaliações diagnósticas e os tutoriais.

Para a efetivação dos cálculos termodinâmicos por meio dos *softwares* de modelagem molecular, foram usados alguns métodos computacionais de Química Quântica, tais como o *ab initio* (Hartree Fock) associado ao conjunto de base 3-21G e os métodos Semiempírico como o PM6 e o PM7. Antes de cada prática foram abordados conceitos e aplicações desses métodos quânticos com os estudantes, visto que eles não tinham conhecimentos sobre os mesmos.

Na execução das três (03) primeiras práticas computacionais foram utilizados dezessete (17) computadores *desktop* com processadores *Pentium(R) Dual-Core*, CPU E5300, 2.60 GHz, 1,00 GB de memória RAM com interface *Windows 7 Home Basic*, sendo esses substituídos na quarta prática por dezenove (19) computadores *desktop* com processadores *Intel(R) Core(TM) i5-4590T CPU @ 2.00 GHz*, 8,00 GB de memória RAM com interface *Windows 7 professional* para a realização dos cálculos termodinâmicos, fazendo-se o uso dos *softwares* de cálculo quântico Gaussian 09W e MOPAC 2016 e os softwares gráficos e de visualização Gaussview 5.0 e Avogadro 1.1.1.

Os programas utilizados encontram-se disponíveis para os sistemas operacionais *Windows*, *Linux* e *Mac OS X* e as suas simulações consistem principalmente em otimizar e calcular as frequências vibracionais das moléculas, sendo possível obter as propriedades termodinâmicas das substâncias analisadas.

4.2 Natureza da Pesquisa

O procedimento investigativo foi norteado por meio de uma abordagem qualitativa, do tipo estudo de caso, e quantitativa de natureza interpretativa, discursiva com manipulação e controle de variáveis, na qual privilegia, de modo geral, a análise construtivista e positivista.

A finalidade de um estudo de caso é reunir informações detalhadas e sistemáticas sobre um fenômeno, consistindo em uma metodologia que enfatiza compreensões contextuais, sem esquecer-se da representatividade, centrando-se no entendimento dinâmico do contexto real e envolvendo-se num estudo intenso e exaustivo de um ou poucos objetos, de maneira que permita um conhecimento detalhado (MOREIRA, 2016; PATTON, 2002; LLEWELLYN; NORTHCOTT, 2007; EISENHARDT, 1989; GIL, 2008).

Enquanto a pesquisa quantitativa busca analisar os fenômenos de interesse da pesquisa em educação através de estudos experimentais ou correlacionais caracterizados principalmente por medições objetivas e análises quantitativas (MOREIRA, 2016). A abordagem qualitativa tem como objetivo central identificar as características das ocorrências, organizações e acontecimentos, já a pesquisa quantitativa condiciona ao pesquisador quantificar dados, opiniões e fatos através de uma amostra estatística que represente a população em estudo. Dessa forma ambas as abordagens não são excludentes, diferem apenas quanto aos objetivos, podendo ser utilizadas simultaneamente (LLEWELLYN; NORTHCOTT, 2007; TERENCE; FILHO, 2006).

4.3 Observação das Aulas Teóricas e Aplicação das Avaliações Diagnósticas

O período de observação das aulas da disciplina de FQI (Figura 1) iniciou após a assinatura do TCLE, onde foi possível observar a desenvoltura, a metodologia, o interesse, a motivação dos alunos e professores. A partir desse momento pode-se perceber algumas dificuldades nos conteúdos por parte dos alunos e falta de interação e indagação dos mesmos para com os professores, se tornando em alguns momentos, sujeitos passivos no processo de ensino e aprendizagem.

Figura 1- Observação das aulas teóricas da disciplina de FQI



Fonte: Do próprio autor

Com a finalidade de mapear as dificuldades e limitações enfrentadas pelos estudantes com conteúdos de termodinâmica, foram aplicadas avaliações diagnósticas (Figura 2), onde se abordou questões objetivas e subjetivas sobre os conteúdos de ligações químicas, geometria molecular, leis da termodinâmica, *softwares* de modelagem molecular e métodos computacionais. Com isso foi possível montar os tutoriais e realizar as aulas práticas computacionais com as turmas da disciplina de FQI.

Figura 2 - Aplicação das avaliações diagnósticas



Fonte: Do próprio autor

Na Tabela 2 a seguir é descrito os objetivos de cada avaliação diagnóstica aplicada aos estudantes durante a realização da pesquisa.

Tabela 2 - Objetivos das avaliações diagnósticas

AVALIAÇÕES DIAGNÓSTICAS	OBJETIVOS
AD I	<ul style="list-style-type: none"> • Observar se os estudantes têm conhecimento sobre o uso de <i>softwares</i> educacionais e de modelagem molecular no Ensino de Química, e também a cerca dos conteúdos de ligações químicas e geometrias moleculares.
AD II	<ul style="list-style-type: none"> • Verificar o nível de compreensão dos estudantes a respeito dos conteúdos de Termodinâmica Química, tais como, calor, trabalho, energia interna, capacidade calorífica, entalpia, como também, sobre os métodos quânticos computacionais e as extensões de entrada e saída de dados;
AD III	<ul style="list-style-type: none"> • Obter os cálculos para as variações de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs para algumas reações, assim como

AD IV	os métodos quânticos computacionais mais utilizados;
	<ul style="list-style-type: none"> Investigar o conhecimento dos graduandos sobre o uso e aplicação do <i>software</i> MOPAC2016, questionando sobre as suas principais versões, métodos quânticos, interfaces gráficas de usuários e extensões de entrada e saída de dados;

Fonte: Do próprio autor

4.4 Elaboração dos Tutoriais Voltados aos *Softwares* de Modelagem Molecular

Os tutoriais foram desenvolvidos e aplicados com o intuito de facilitar o aprendizado dos alunos com os conteúdos de Termodinâmica Química ministrados na disciplina de FQI do curso de Licenciatura em Química da UESPI. A produção e aplicação dos tutoriais aconteceram de acordo com as dificuldades observadas no decorrer das aulas teóricas e dos fatos relatados pelos próprios estudantes através das AD aplicadas antes da realização das práticas computacionais, tendo essas a finalidade de minimizar ou sanar as deficiências encontradas ao longo dos conteúdos.

Foram produzidos quatro (04) tutoriais na forma de textos com tópicos abordando de forma detalhada todos os passos a serem seguidos para o desenvolvimento das tarefas, como pode ser observado abaixo:

- **TUTORIAL I** buscou-se trabalhar as funcionalidades dos *softwares* de modelagem molecular GaussView 5.0 e Avogadro 1.1.1, levando-se em conta que os estudantes não tinham habilidade ou até mesmo os desconheciam, como foi relatado nas avaliações diagnósticas. Neste tutorial foram abordadas todas as funções da barra de menus e barra de ferramentas, as maneiras de construção das moléculas, os modos de visualização, otimização da estrutura, as propriedades moleculares e as formas de como salvar os arquivos. Ao final do tutorial foi sugerida uma atividade para a construção de moléculas orgânicas, repetindo-se todos os passos realizados anteriormente (Apêndice B);
- O **TUTORIAL II** abordou-se as propriedades termodinâmicas das moléculas, as quais foram inicialmente construídas através do *software* GaussView 5.0 e em seguida submetidas aos cálculos realizados pelo *software* de química quântica Gaussian 09W. Esse tutorial mostrou como realizar os cálculos para a obtenção da energia térmica interna, energia vibracional do ponto zero, capacidade calorífica a volume constante (C_v), entalpia, energia cinética translacional, rotacional e vibracional das moléculas

em diferentes temperaturas. Após os cálculos foi possível visualizar todos os valores de frequências e os modos vibracionais das moléculas, mostrando as animações ocasionadas por cada modo. A partir desses dados é possível obter os valores teóricos das energias e os espectros de Infravermelho e *Raman* do composto e compará-los com os seus dados experimentais, sendo possível também visualizar todas as geometrias intermediárias do composto, desde a de maior energia potencial (menos estável) até a de menor energia potencial (mais estável), podendo os dados ser salvos e exportados para outros programas de acordo com as extensões disponíveis, destinando a construção de gráficos, histogramas e tabelas (Apêndice E);

- **TUTORIAL III** mostrou-se a sequência de execução dos cálculos e análise dos dados termodinâmicos utilizando o pacote computacional Gaussian 09W. Nesse tutorial foram fornecidas algumas substâncias com nomes, fórmulas moleculares e modelos *ball and sticks* já construídos pelo *software* GaussView 5.0. Em seguida foram submetidos (*input*) aos cálculos e obtido (*output*) os valores das entalpias, entropias e energias livres de Gibbs para cada molécula (Anexo C). Com isso pode-se obter as variações de entalpia, entropia e energia livre para a reação de combustão do metano, sendo esses comparados com os seus valores experimentais da literatura. Foi proposto também nesse tutorial, observar as variações nos valores de entalpia e entropia ao serem submetidas a diferentes temperaturas e comparar os valores das entropias para diferentes substâncias líquidas e sólidas (Apêndice H);
- **TUTORIAL IV** destinou-se a obter e analisar os parâmetros termodinâmicos e as variações de entalpias em reações de combustão a partir do uso de *softwares* livres, tais como o Avogadro 1.1.1 e o MOPAC2016. Após construir as moléculas com o *software* Avogadro 1.1.1 e submetê-las (*input*) aos cálculos pelo MOPAC2016, o qual não possui interface gráfica, foi possível obter (*output*) os valores de entalpia de formação, energia total, energia eletrônica, potencial de ionização, as geometrias otimizadas e calcular as variações de entalpias de combustão (Anexo C). Sendo esses salvos e registrados em tabelas presentes no tutorial e comparados com os seus valores experimentais. Sugeriu-se também nessa tarefa, construir gráficos a partir dos resultados encontrados para as diferentes energias obtidas, a fim de tabular e discutir os dados (Apêndice K).

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O presente trabalho buscou apresentar uma linguagem acessível para a construção e aplicação dos tutoriais voltados a realização dos cálculos das propriedades termodinâmicas das substâncias a partir dos *softwares* de modelagem molecular, tendo a finalidade de atender aos objetivos propostos pela disciplina de FQI, facilitar o conhecimento da área aos estudantes, abordar conceitos e cálculos frequentemente utilizados na Termodinâmica Química a partir da investigação teórica pelo uso da química computacional.

Na Figura 3 são demonstradas todas as etapas de execução da pesquisa e as quantidades de alunos participantes, observando que houve uma redução no número de estudantes ao longo do processo, isso decorrente da participação voluntária, da realização das práticas no contra turno das aulas, do interesse e motivação pelo aprendizado, dentre outros motivos. Sendo levado em consideração para tabulação dos resultados da pesquisa apenas aqueles que participaram de todas as etapas do projeto, ou seja, 14 estudantes.

Figura 3 - Esquema de execução da pesquisa



Fonte: Do próprio autor

5.1 O Uso dos Tutoriais no Desenvolvimento das Aulas Práticas Computacionais

A produção dos tutoriais a partir das observações e avaliações diagnósticas realizadas em sala de aula ao longo da disciplina abordou os principais problemas enfrentados pelos alunos nos conteúdos de TQ. Através do diagnóstico foi observado que os graduandos

sentiam bastantes dificuldades em cálculos de propriedades termodinâmicas como entalpia, capacidade calorífica, entropia e energia livre de Gibbs. Com isso foi possível montar os tutoriais com a intenção de reduzir ou suprir as deficiências ao longo da execução das práticas computacionais.

Os tutoriais foram desenvolvidos de acordo com o nível de conhecimento dos estudantes investigados na pesquisa, destinando-se cada um deles a uma diferente finalidade e aplicação como mostra a Tabela 3.

Tabela 3 - Finalidades das aplicações dos tutoriais

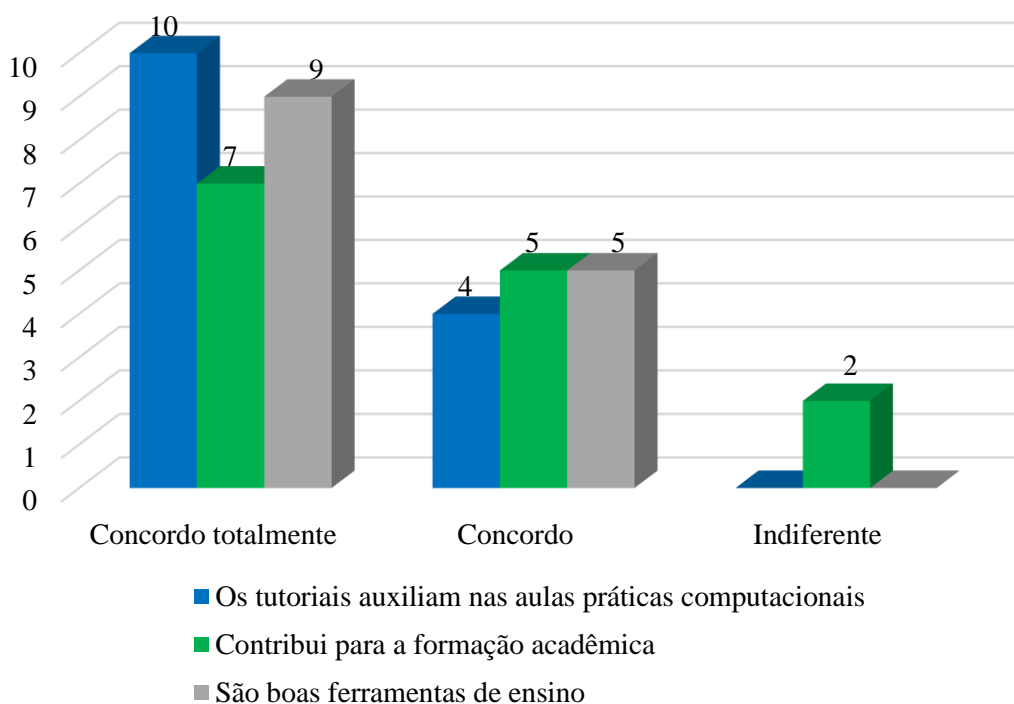
TUTORIAL	FINALIDADE
Tutorial I	<ul style="list-style-type: none"> • Mostrar as ferramentas de construção e visualização de moléculas utilizando os <i>softwares</i> de modelagem molecular GausView 5.0 e Avogadro 1.1.1;
Tutorial II	<ul style="list-style-type: none"> • Calcular e analisar as contribuições energéticas e as propriedades térmicas em diferentes temperaturas para diferentes moléculas a partir do uso dos <i>softwares</i> do pacote computacional Guassian 09 e Avogadro 1.1.1;
Tutorial III	<ul style="list-style-type: none"> • Calcular e analisar os dados termodinâmicos e as variações de energias em reações químicas utilizando o pacote computacional Gaussian 09;
Tutorial IV	<ul style="list-style-type: none"> • Calcular e analisar os parâmetros termodinâmicos e variações de entalpias em reações de combustão utilizando o <i>software</i> Avogadro 1.1.1 e o pacote computacional MOPAC2016.

Fonte: Do próprio autor

Ao final da realização de todas as aulas práticas computacionais aplicou-se a escala de Likert com cinco afirmações acerca dos tutoriais (Apêndice M), a fim de analisar as opiniões dos estudantes a cerca da utilização dos tutoriais associados aos *softwares* computacionais.

Na Figura 4 os alunos relataram que contribuíram para a sua formação acadêmica como discentes ao inserir tal proposta de ensino no plano da disciplina de FQI, mostrando-se como ferramentas úteis na compreensão dos conteúdos termodinâmicos e facilitando a execução das práticas computacionais.

Figura 4 - Argumentação dos estudantes a cerca dos tutoriais associados às aulas práticas computacionais



Fonte: Do próprio autor

Os tutoriais e os recursos computacionais foram disponibilizados para os estudantes a fim de ajudá-los a adquirir uma melhor compreensão dos conteúdos termodinâmicos, complementando os assuntos já anteriormente repassados. Segundo Dallacosta *et al.* (1998), os tutoriais e demonstrações auxiliam em muito os estudantes de Química Geral e Orgânica, uma vez que permitem que o material seja estudado de acordo com os seus ritmos apropriados de aprendizagem, sendo essa uma das maiores vantagens do seu uso.

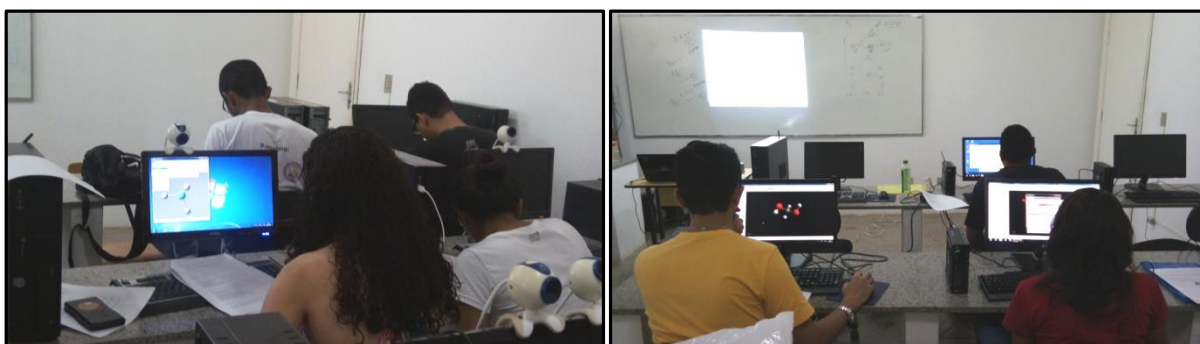
5.2 A Importância da Visualização Gráfica ao Utilizar os *Softwares* de Modelagem Molecular

Para a construção do Tutorial I foi analisado os relatos de trinta e um (31) estudantes de duas turmas de FQI na AD I (Apêndice A), os quais descreveram ter habilidades com as funcionalidades dos programas básicos de um computador, onde a maioria afirmaram ter usado em algum momento os softwares educacionais direcionados ao Ensino de Química. Grande parte deles não conhecia nenhum *software* de modelagem molecular, por ausência de incentivo docente, falta de informação ou desinteresse pessoal, mas mostraram ter

conhecimento sobre os tipos de ligações químicas e geometrias moleculares ao responderem os questionamentos.

A partir desses relatos montou-se o Tutorial I adequando às necessidades dos estudantes, tendo como finalidade mostrar a utilização das ferramentas para a construção e visualização das moléculas (Figura 5), observando as suas formas de exibição, os ângulos, os comprimentos das ligações, otimização das estruturas e determinação das propriedades moleculares, através dos *softwares* GaussView 5.0 e o Avogadro 1.1.1.

Figura 5 - Construção e visualização das moléculas com os *softwares* GaussView 5.0 e o Avogadro 1.1.1



Fonte: Do próprio autor

A realização do cálculo para a obtenção das estruturas moleculares é uma das funções mais simples de qualquer programa de química computacional, porém não é um cálculo fácil, devido ao formalismo matemático aplicado. Esses cálculos são realizados de forma que as energias e os gradientes de energia encontrem a geometria molecular que corresponde ao menor nível energético. A Energia do Ponto Zero (ZPE) é encontrada através das frequências vibracionais e adicionada com uma correção a energia interna (YOUNG, 2001).

Após a execução da primeira aula prática foi aplicado o Questionário I (Apêndice C) com cinco (05) questões subjetivas e a escala do tipo Likert com cinco afirmações, onde foram analisadas as respostas dos estudantes a cerca da prática realizada. Ao indagar os estudantes sobre a contribuição das funcionalidades dos softwares Avogadro 1.1.1 e GaussView 5.0 para o aprofundamento do conhecimento em Química, treze (13) dos alunos pesquisados responderam sim, argumentando que se deu através da relação entre a teoria e a prática, por meio do aprendizado mais dinâmico, interativo e atrativo. Podendo ser observado nos relatos dos alunos como, por exemplo, em:

“(…) Ampliando minha visão e os meus conhecimentos sobre química computacional. Promovendo uma desmistificação de conceitos pré-estabelecidos.” (Aluno A2)

“(…) Pois ajuda a perceber detalhes que em uma aula tradicional, por exemplo, geometria não fica tão evidente, os ângulos, conformações dentre outros aspectos da molécula.” (Aluno A14)

Os softwares de visualização e construção de modelos como ferramentas metodológicas têm auxiliado os alunos de maneira significativa, conforme mostram as pesquisas na área de Educação Química (ESSELMAN; HILL, 2016; LEAL *et. al.*, 2010; MARTINI; HARTZELL, 2015; TAMANI; TALBI; RADID, 2015; VASCONCELOS; ARROIO, 2013). Eles possuem múltiplas representações, fazendo uma conexão com o nível macroscópico, possibilitando a transformação das representações bidimensionais em tridimensionais e usando informações explícitas (RAUPP; SERRANO; MORREIRA, 2009). As opiniões dos estudantes confirmam o que as pesquisas têm relatado sobre o uso desses programas associados ao EQ com complementação dos conteúdos.

Outros questionamentos foram levantados sobre a construção das moléculas com os *softwares*, como a cerca da formulação de uma melhor interpretação do mundo microscópico da matéria e da maneira pela qual o aprendizado dos estudantes havia sido facilitado a partir do seu uso. Tornando-se assim possível coletar as opiniões dos estudantes, os quais relataram que houve um bom entendimento, sendo este de forma clara, acessível, interessante, mais compreensível em termos de estrutura molecular, dentre outros como, por exemplo, em:

“(…) Nos tira do mundo de abstração que é a química e nos faz visualizar aquilo, que na maioria das vezes em sala de aula fica apenas no campo da imaginação.” (Aluno A6)

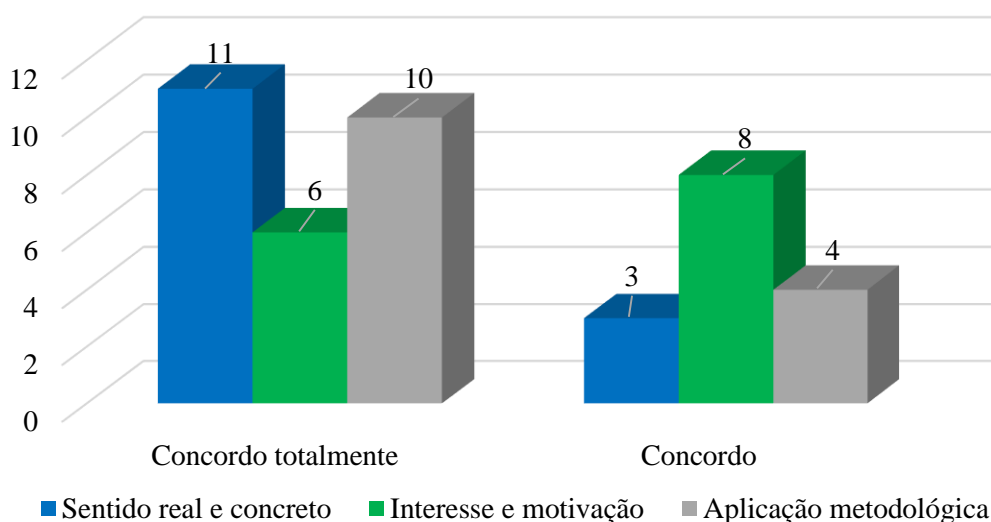
“(…) Através dos softwares adquirir uma visão tridimensional da molécula podendo enxergar melhor o mundo microscópico.” (Aluno A12)

Demonstrando assim que a aplicação de diferentes estratégias no Ensino de Química desenvolve as habilidades de visualização dos estudantes e colaboram para a formação das competências representativas através dos modelos tridimensionais, facilitando o entendimento das propriedades estruturais das moléculas. Tal habilidade de visualização é descrita como “a habilidade necessária para transitar entre os níveis representacionais sendo chamada de

habilidade visuoespacial, derivada do conceito visualização espacial” (RAUPP; MOREIRA; SERRANO, 2009; MOREIRA; SERRANO, 2013). O seu desenvolvimento proporciona o avanço para a consolidação de imagens mentais de rotações moleculares em 3D. A visualização e interpretação dessas imagens produzidas pelos estudantes é uma boa estratégia metodológica para melhorar o entendimento (RAUPP; MOREIRA; SERRANO, 2009; MOREIRA; SERRANO, 2013).

Na Figura 6 são observados os relatos obtidos a partir do Questionário I, demonstrando que a maioria dos alunos concordaram que algumas características e habilidades podem ser desenvolvidas, tais como interesse, motivação, curiosidade, aplicação metodológica, sentido mais realístico e concreto dos conteúdos, ao se trabalhar com os *softwares* de modelagem no EQ. Essas competências e habilidades são necessárias à aprendizagem do conhecimento químico, uma vez que dão suporte para a compreensão de conceitos abstratos, como átomos, ligações químicas, moléculas, geometrias moleculares, orbitais, cálculo de energias, dentre outros.

Figura 6 - Habilidades desenvolvidas pelos discentes com o uso dos *softwares* GaussView 5.0 e Avogadro 1.1.1



Fonte: Do próprio autor

5.3 Cálculos Termodinâmicos no Gaussian 09W

Após a aplicação da AD II (Apêndice D) com vinte (20) estudantes das duas turmas de FQI, foram analisadas as respostas para a construção do Tutorial II, buscando coletar informações relacionadas aos conceitos de calor, trabalho, energia interna, capacidade

calorífica, entalpia e métodos quânticos computacionais. Observando que os graduandos não apresentaram bons resultados na avaliação, mostrando dificuldades, deficiência ou desconhecimento dos assuntos abordados através das suas respostas.

Para a execução da segunda e terceira aulas práticas (Tutorial II e III), foi necessário introduzir aos estudantes um pouco sobre os conceitos da Química Quântica computacional, tendo em vista que a grande maioria desconhecia a sua importância, uso e/ou aplicação. Então para a execução dos cálculos termodinâmicos no programa Gaussian 09W (Anexo C) foi utilizado o método *ab initio* (Hartree Fock) associado ao conjunto de base 3-21G. Nessa etapa os cálculos de Opt+Freq (otimização e frequências) foram realizados, bem como as extensões .gjf para os arquivos de entrada (*input*) e .log ou .out para os arquivos de saída (*Output*). Esse modelo quântico foi escolhido apenas com a finalidade de demonstrar aos estudantes a forma de obtenção dos resultados termodinâmicos e não como padrão para pesquisas científicas que necessitam de resultados altamente precisos.

Assim a partir do Tutorial II pode-se calcular e analisar as contribuições energéticas e as propriedades térmicas, como o ZPE, energia térmica interna, capacidade calorífica a volume constante, entalpia e energias cinéticas translacional, rotacional e vibracional, em diferentes temperaturas, tais como 298, 600, 900, 1200 e 1500 K com diferentes moléculas (monoatômicas, diatômicas, poliatômicas, lineares e não lineares) através do *software* Gaussian 09W.

Na execução dos cálculos quânticos foram escolhidas moléculas com poucos átomos para um estudo preliminar dos métodos aplicados, por serem menos complexas na sua construção, requererem pouco tempo computacional na realização dos cálculos e possuem uma maior disponibilidade de dados experimentais de entalpia de formação, entropia molar, capacidade calorífica, frequências e comprimento de ligações na temperatura de 25 °C que podem ser comparados com os valores teóricos. As moléculas selecionadas foram o gás oxigênio (O₂), gás hidrogênio (H₂), dióxido de carbono (CO₂), amônia (NH₃), metano (CH₄), metanol (CH₄O), ácido etanoico (C₂H₄O₂), benzeno (C₆H₆) e os átomos de hélio (He) e argônio (Ar). Inicialmente as grandezas calculadas foram ZPE, H , ΔU e C_v , além do número de modos vibracionais para os átomos e moléculas lineares e não lineares. Posteriormente analisou os valores individuais de ΔU e C_v para os movimentos de translação, rotação e vibração destas, observando os modos e as frequências vibracionais e gerando os espectros de IR e *Raman* dos compostos.

Ao término aplicou-se o Questionário II (Apêndice F) com cinco (05) questões subjetivas e a escala do tipo Likert com cinco afirmações, no qual foram avaliados os

questionamentos dos estudantes sobre a aula prática. Ao perguntar sobre a relação das energias internas e as capacidades caloríficas totais das moléculas quando submetidas a diferentes temperaturas, onze (11) estudantes afirmaram que ocorreu um acréscimo nos seus valores com o aumento da temperatura. Isso mostra que estudantes compreenderam as relações estabelecidas entre as variáveis ao obterem os dados e os organizarem em tabelas inseridas dentro dos tutoriais a partir do uso dos programas computacionais.

Os alunos ao relatarem os pontos positivos e negativos da aula prática com a utilização dos softwares Avogadro 1.1.1, GaussView 5.0 e Gaussian 09W, disseram que os programas são de fácil entendimento, autoexplicativos, ajudam na compreensão dos conteúdos, despertam a curiosidade, realizam cálculos em pouco tempo e apresentam boa visualização gráfica. Sendo citado nos trechos a seguir:

“(...) O programa Gaussian 09W, não é um programa gratuito, isso dificulta o acesso desse programa.” (Aluno A3)

“(...) Os programas trabalhados são de grande importância para os cálculos termoquímicos de moléculas.” (Aluno A9)

“(...) Os alunos devem está por dentro dos conteúdos, porque se não será uma dificuldade na hora de usar e entender os programas.” (Aluno A10)

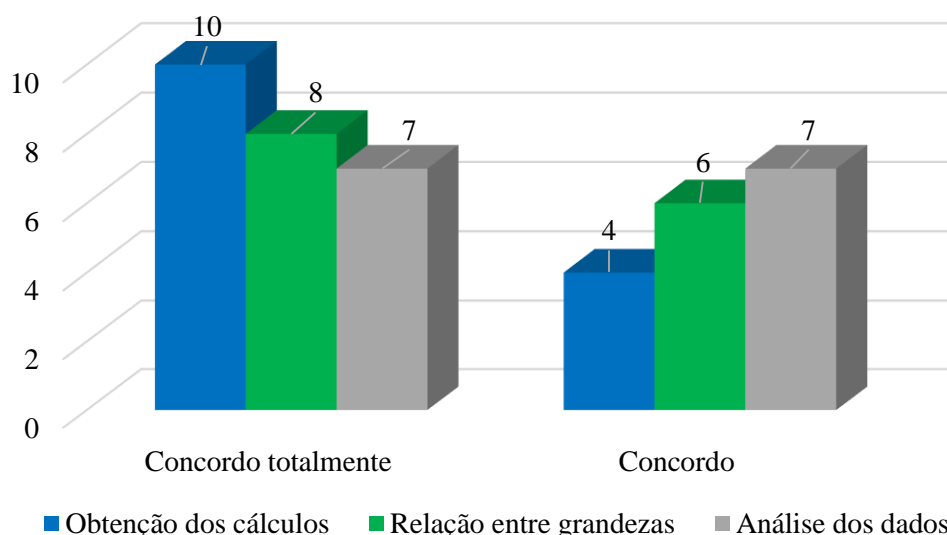
“(...) Consegui ter uma aprendizagem mais ampla sobre termoquímica, alinhando a teoria a prática.” (Aluno A13)

Os argumentos dos alunos sobre o uso dos programas mostram as possíveis contribuições para o ensino da Termodinâmica Química, contrariando ao que geralmente é discutido ao analisarmos artigos sobre o tema, pois esses relatam a cerca das dificuldades conceituais dos alunos ao discutir algumas ideias termodinâmicas, tais como: calor, temperatura, equilíbrio químico, termoquímica e entropia, os quais demonstram ser obstáculos na aprendizagem desses conteúdos (SÖZBILIR, 2003a; DRIEL; GRÄBER, 2003; GOEDHART; KAPER, 2002; SÖZBILIR, 2003b).

A partir dos questionamentos, as respostas dos estudantes foram analisadas de acordo com os resultados apresentados pelos cálculos termodinâmicos realizados para as diferentes substâncias, assim como outros conceitos abordados pela primeira lei da termodinâmica. Os

alunos afirmaram que ao utilizarem os *softwares* facilitou a maneira de execução dos cálculos de energia, diminuindo os obstáculos impostos pelas relações e deduções matemáticas, sendo demonstrada a importância dessa ferramenta para o ensino e o aprendizado desses conteúdos. Dentre as opções de respostas presentes na escala do tipo Likert, todos os participantes responderam que concordam ou concordam totalmente com as vantagens em utilizar o Gaussian 09W nos conteúdos de termodinâmica, como mostra a Figura 7 a seguir.

Figura 7 - Argumentação dos graduandos a cerca da obtenção, análise e interpretação dos dados termodinâmicos com o *software* Gaussian 09W



Fonte: Do próprio autor

Quando utilizamos um programa computacional que resolve problemas básicos de termodinâmica é vantajoso para os estudantes que não possuem afinidade com matemática. Embora pré-requisitos matemáticos sejam aplicados, cada aluno difere em nível de compreensão, especialmente quando enfrenta a aplicação desses conceitos a um sistema químico. No entanto, a incorporação dos *softwares* computacionais na disciplina faz com que os estudantes ao trabalharem com a matemática sejam capazes de visualizar relações teóricas, sem ter que superar a barreira do cálculo (MARTINI; HARTZELL, 2015).

Para a construção do Tutorial III quinze (15) graduandos em Química foram submetidos à AD III (Apêndice G), a qual buscou determinar os valores das variações de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs para algumas reações. Percebeu-se que os estudantes não tiveram um bom desempenho nessa avaliação, mostrando desinteresse, dificuldades ou deficiências com o conteúdo trabalhado em sala de aula.

Com o auxílio do Tutorial III na aula prática foram determinados os valores de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs, assim como as suas variações ($\Delta_r H^\circ$, $\Delta_r S^\circ$ e $\Delta_r G^\circ$) para as reações de combustão do metano e benzeno, síntese da amônia e decomposição da água. Foram utilizadas diferentes temperaturas (298, 600, 900, 1200 e 1500 K) para determinar essas energias com diferentes substâncias (dióxido de silício, água, benzeno, gás hidrogênio e gás oxigênio). Durante as aulas práticas os estudantes realizaram os cálculos de conversão dos valores teóricos de entalpia de formação obtidos em Hartree para kcal.mol^{-1} e posteriormente transformando-os em kJ.mol^{-1} , como também para os valores de entropia molar ao converter da unidade $\text{cal.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$ para a $\text{J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$, sendo assim possível compará-los com os dados experimentais disponíveis a temperatura de 25 °C para as substâncias através das bases de dados *Nist WebBook Chemistry* e CCCBDB (NIST, 2016a,b).

Os valores de entalpia e entropia totais do sistema podem sofrer alterações de acordo com as contribuições dos movimentos vibracionais, translacionais, rotacionais e de energia eletrônica das moléculas. Esses resultados geralmente são mostrados após os cálculos de frequência dos programas computacionais, determinando-se em seguida as propriedades termodinâmicas das substâncias (YOUNG, 2001).

Ao verificar as contribuições que o pacote computacional Gaussian 09W proporcionou ao realizar os cálculos computacionais, os estudantes foram submetidos a sete (07) questões subjetivas e a escala do tipo Likert com cinco afirmações presentes no Questionário III (Apêndice I). Ao pergunta-los se concordavam com a afirmação de que o *software* resolve as equações matemáticas para os cálculos termoquímicos facilitando a obtenção dos resultados sem ter que superar as limitações matemáticas, eles responderam que o trabalho tornou-se mais simplificado, obtiveram resultados mais rápidos e precisos, reduziram as dificuldades em realizar os cálculos, tornando-se assim uma ferramenta útil e eficaz.

Ao abordar sobre os pontos positivos e negativos da aula prática sobre os cálculos termodinâmicos utilizando os *softwares* GaussView 5.0 e Gaussian 09W, os alunos discutiram que os *softwares* são didáticos, dinâmicos e melhoram o aprendizado, como também:

“(…) Conversão de unidade, alguns pontos cofusos em interpretar.” (Aluno A1)

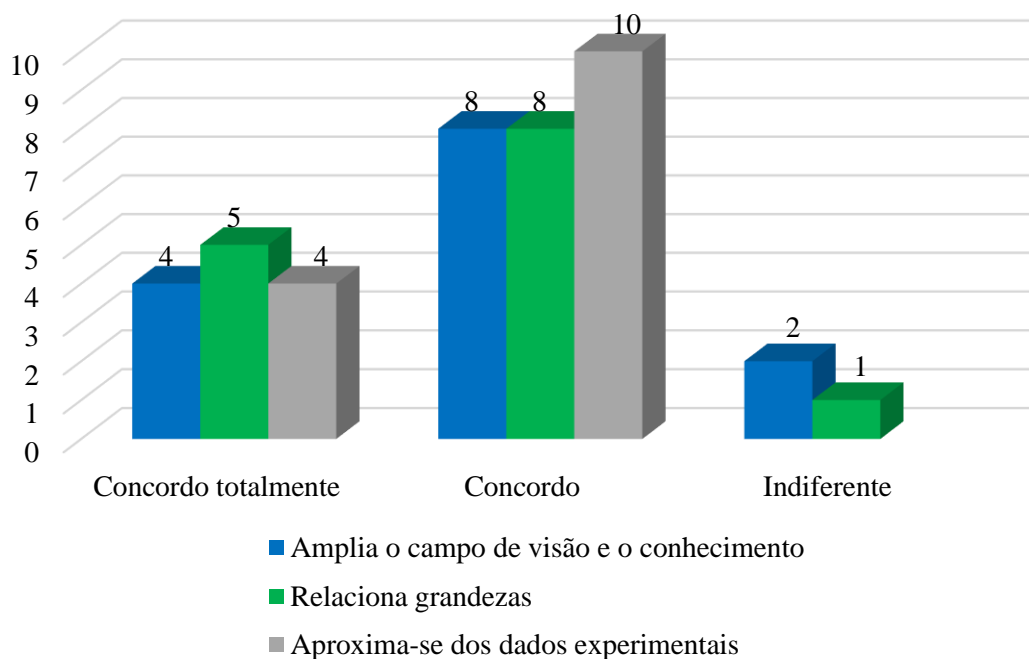
“(…) O software facilitou os cálculos e estimulou o interesse.” (Aluno A7)

“(…) Problemas nos computadores.” (Aluno A11)

“(…) Melhor compreensão e mais facilidade para obtenção de cálculos termodinâmicos.” (Aluno A12)

Durante a pesquisa doze (12) estudantes relataram que as aulas práticas fizeram com que houvesse um melhor entendimento sobre o assunto, como por exemplo, em determinar a espontaneidade de uma reação a partir dos cálculos da energia livre de Gibbs da reação. Ao observar a Figura 8, notamos que 12 alunos afirmaram que os *softwares* ajudam a ampliar o conhecimento e o entendimento a cerca das leis da termodinâmica. Ao comparar os dados termodinâmicos teóricos obtidos com os valores experimentais para as substâncias a 25 °C, todos perceberam a grande aproximação entre os resultados. Os alunos verificaram um crescente aumento nos valores de entropias quando submetidas às respectivas temperaturas de 298, 600, 900, 1200 e 1500 K, mostrando a grande contribuição dessa ferramenta ao relacionar a prática com os conteúdos teóricos trabalhados pelo professor.

Figura 8 - Diagnóstico dos dados termodinâmicos pelos estudantes ao utilizar o *software* Gaussian 09W



Fonte: Do próprio autor

Esses resultados mostram a importância da aplicação dos cálculos computacionais, concordando que a termoquímica computacional tem emergido nos últimos anos como uma

ferramenta importantíssima para obtenção de valores das entalpias e das energias de Gibbs de formação de compostos orgânicos, da afinidade protônica ao medir a basicidade em fase gasosa (BURK, *et al.*, 2000; AUE; GUIDONI, 2000).

5.4 Cálculos Termodinâmicos no MOPAC2016

Com a finalidade de proporcionar maior acesso aos estudantes, a quarta prática foi realizada com um programa livre de Química Quântica na sua versão acadêmica, o *software* MOPAC2016, o qual utiliza somente métodos semiempíricos para os cálculos quânticos, sendo a aula prática realizada com o uso dos métodos PM6 e PM7 e as extensões .mop para os arquivos de entrada e .out, .aux e .arc para os arquivos de saída. Os métodos SE se baseiam em algumas implementações de dados experimentais, combinando física teórica com experimentos (LEWARS, 2011). Assim como os métodos *ab initio*, os SE iniciam com a resolução da equação de onda de Schrödinger e em seguida introduzem determinadas hipóteses visando aumentar a velocidade dos cálculos, desconsiderando termos menos importantes das equações (BARREIRO; RODRIGUES, 1997; THIEL, 2013).

Para o desenvolvimento do Tutorial IV foi aplicada a AD IV (Apêndice J) a quinze (15) estudantes, sendo investigadas as contribuições sobre o uso e aplicação do *software* MOPAC2016, tais como: as principais versões, métodos quânticos, interfaces gráficas de usuários e extensões de entrada e saída de dados. Devido esse programa não possuir interface gráfica, foi utilizado o *software* Avogadro (versão 1.1.1) para a edição das moléculas e submissão dos cálculos termodinâmicos. Com os resultados da avaliação, percebeu-se que os alunos desconheciam o programa, sendo assim necessário apresentar, instruir e explicar as suas funcionalidades, aplicações, assim como os métodos SE a serem utilizados.

Com o tutorial em mãos procurou-se construir as moléculas do gás metano (CH₄), gás oxigênio (O₂), gás carbônico (CO₂) e água (H₂O), e em seguida otimizar as suas estruturas, obter as energias eletrônicas, os potenciais de ionização, as entalpias de formação e entalpias de reação através dos métodos PM6 e PM7. Ao determinar teoricamente as entalpias de formação e de reação das substâncias, os alunos confrontaram os resultados obtidos com os valores experimentais disponíveis na literatura, observando que o método PM7 foi o que mais se aproximou.

Ao executar os cálculos foram utilizadas algumas palavras chave na caixa de visualização, indicando assim os comandos a serem executados pelo *software*, dentre elas foram as palavras PRECISE, a qual aumentou relativamente a precisão dos resultados,

CHARGE=0, definindo o sistema como neutro (carga zero), PM6 ou PM7 para escolha do método SE, entre outras. Ao final do tutorial foi sugerida com atividade extra a repetição de todos os passos para as reações de combustão do benzeno (C_6H_6) e etanol (C_2H_6O).

Em seguida com a aplicação do Questionário IV (Apêndice L), os estudantes responderam a cinco (05) questões subjetivas e a escala do tipo Likert com oito afirmações. Ao indagar os alunos sobre os pontos positivos e negativos da aula prática a cerca dos cálculos termodinâmicos utilizando os softwares Avogadro 1.1.1 e MOPAC2016, eles descreveram que esses ajudam a formular uma melhor compreensão, realizam cálculos complexos em pouco tempo e com boa precisão, são programas fáceis de serem utilizados, acessíveis e indispensáveis. Sendo constatado nos relatos a seguir:

“(...) É um método rápido e obtemos resultados próximos dos experimentais”. (Aluno A5)

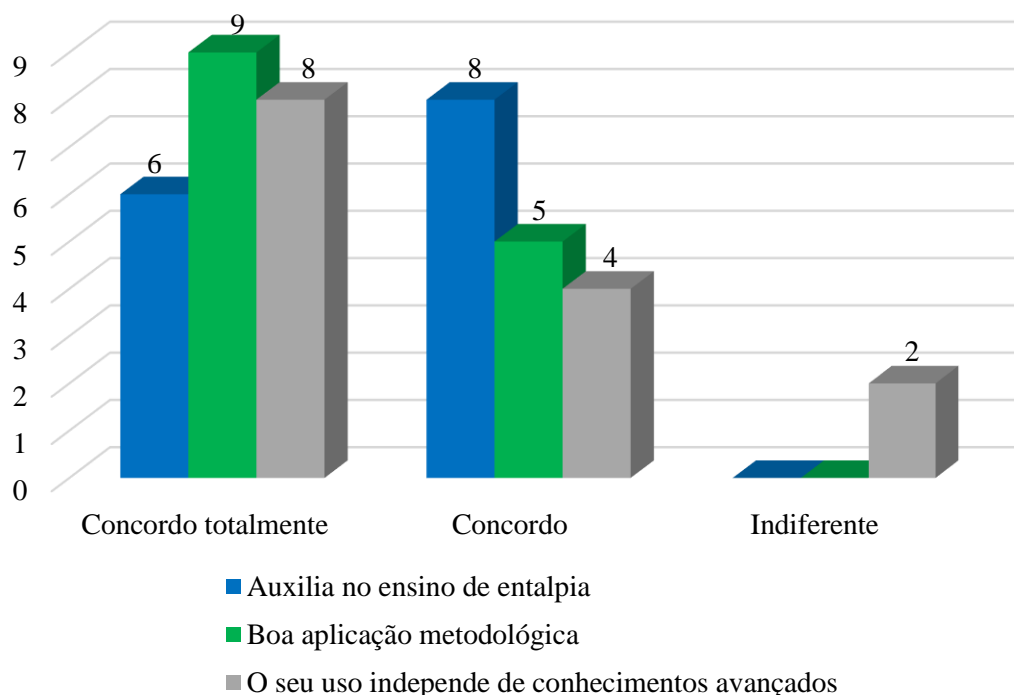
“(...) Os computadores travaram bastante quando usaram esses softwares”. (Aluno A11)

“(...) Facilidade no manuseio, assimilação dos conteúdos e complementação do conhecimento”. (Aluno A13)

“(...) Não mostra as fórmulas para a obtenção dos resultados”. (Aluno A4)

Com o auxílio da Figura 9 é possível analisar as opiniões dos graduandos, mostrando que todos concordam totalmente ou parcialmente que o uso do MOPAC2016 complementa o ensino de entalpia das reações, tornando-se uma boa metodologia a ser aplicada ao ensino e aprendizado dos conteúdos de termodinâmica na disciplina de FQI. O *software* utiliza os princípios quânticos e termodinâmicos, associados a uma matemática avançada. No entanto, o usuário não precisa ter pleno conhecimento com estes tópicos para utiliza-lo, pois os comandos de entrada são de fácil execução, permitindo aos usuários direcionar a sua atenção à interpretação química e não se prender as teorias quânticas e a termodinâmica estatística (STEWART, 2012). A partir da análise das respostas do Questionário IV foi possível construir a Figura 9, aonde 12 estudantes concordaram que o uso dessas ferramentas independem dos conhecimentos avançados nas áreas de quântica e termodinâmica.

Figura 9 - O uso do *software* MOPAC2016 pelos alunos para a obtenção dos cálculos termodinâmicos



Fonte: Do próprio autor

A realização dos cálculos pelo MOPAC2016 exige um baixo custo computacional para a obtenção do arquivo de saída (Anexo D), o qual registra os dados e o tempo transcorrido de todo o processo. Neste trabalho, o tempo médio gasto para os cálculos de entalpia de formação e otimização das substâncias foram de 0,5 segundos, sendo essa a principal característica que favorece a sua aplicação didática como complementação ao ensino de termodinâmica, devido à rapidez dos resultados. Diferentemente dos vários parâmetros que seriam calculados em um método *ab initio*, os métodos semiempíricos já veem previamente determinados, se tornando muito mais rápidos (MARTINS; LIMA, 2016).

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os graduandos relataram que ao inserir tal proposta de ensino no plano da disciplina de FQI colaborou positivamente para a aprendizagem dos conteúdos termodinâmicos, complementando aspectos normalmente não discutidos em sala de aula. Além de desenvolver habilidades de visualização espacial molecular, melhorando a compreensão dos níveis microscópico e simbólico.

Durante o desenvolvimento das aulas práticas computacionais, os estudantes não tiveram maiores problemas em operar os *softwares* de modelagem molecular, especialmente em função dos tutoriais previamente fornecidos e detalhados. Os problemas relatados por alguns alunos foram a respeito das dificuldades que sentiram com os programas em inglês e o desempenho dos computadores.

A análise dos resultados mostra uma melhor compreensão dos conceitos e cálculos após a realização das atividades de modelagem e simulação computacional, assim como uma melhor interpretação dos dados teóricos quando foram comparados aos experimentais disponíveis para as diferentes substâncias nas bases de dados NIST *Chemistry WebBook* e CCCBDB. Os resultados apresentados mostram evidências de que o uso dos programas de modelagem e simulação como ferramentas de ensino facilitam a aprendizagem dos conteúdos termodinâmicos.

Para os estudantes que participaram da pesquisa foi constatado que obtiveram um melhor desempenho a cerca dos conhecimentos termodinâmicos nas avaliações realizadas na disciplina de FQI. Porém não podemos generalizar e afirmar que outras pesquisas poderão obter os mesmos resultados, levando em consideração a heterogeneidade dos indivíduos em termos de conhecimentos e aprendizagens.

Dessa forma a partir das análises dos questionários pode-se perceber que a utilização de tutoriais associados as práticas computacionais e inseridas dentro das aulas teóricas da disciplina de FQI seguem as orientações dos DCNs, contribuem para o aprofundamento dos conhecimentos em Termodinâmica Química, ajudam a estabelecer uma visão mais concreta do mundo microscópico, minimizam as limitações matemáticas na resolução dos cálculos e estimulam o interesse e a motivação dos estudantes pelo aprendizado.

REFERÊNCIAS

- ADAMS, T. R.; ADAMSON, R. D.; ASPURU G. A. *Q-Chem*. Inc. Pittsburgh. EUA, 2010. Disponível em: <<https://www.q-chem.com/qchem-website/about-qchem4.html>>. Acesso em: 18 jan. 2016.
- ALCAMÍ, M.; MÓ, O.; YÁÑEZ, M. Computational chemistry: A useful (sometimes mandatory) tool in mass spectrometry studies. *Mass Spectrometry Reviews*, v. 20, n.4, p. 195-245, 2001.
- ALLOUCHE, A. R. Gabedit: a graphical user interface for computational chemistry softwares. *Journal of Computational Chemistry*, v. 32, n. 1, p. 174-182, 2011.
- ARROIO, A.; HONÓRIO, K. M.; WEBER, K. C.; MELLO, P. H.; SILVA, A. B. O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. *Química Nova*, v. 28, n. 2, p. 360-363, 2005.
- ATKINS P.; JONES L. *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. Tradução Ricardo Bicca de Alencastro. 5 ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- ATKINS, P.; PAULA, J. *Physical Chemistry*. 8 ed. New York: Oxford University Press., 2006.
- ATKINS, P.; PAULA, J.; FRIEDMAN, R. *Quanta, matter, and change: a molecular approach to physical chemistry*. New York: W. H. Freeman and Company, 2009.
- AUE, D.H.; GUIDONI, M.; BETOWSKI, L. D. *Ab initio* calculated gas-phase basicities of polynuclear aromatic hydrocarbons. *International Journal of Mass Spectrometry*, v. 201, n. 1-3, p. 283-295, 2000.
- AVOGADRO: *an open-source molecular builder and visualization tool*. Version 1.1.1. 2016. Disponível em: <<http://avogadro.cc/>>. Acesso em: 15 jan. 2016.
- AZEVEDO, B. F. T. *Tópicos em Construção de Software Educacional*. 1997. 13 f. Estudo dirigido (Mestrado em Informática) - Centro Tecnológico. Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória, 1997.
- BAERENDS, E. J.; ZIEGLER, T. *ADF® molecular modeling suite*. Universidade de Amsterdam. Amsterdam. Holanda, 2013. Disponível em: <<https://www.scm.com/>>. Acesso em: 20 jan. 2016.
- BANERJEE, A.C. Teaching chemical equilibrium and thermodynamics in undergraduate general chemistry classes. *Journal of Chemical Education*, v. 72, n. 10, p. 879-881, 1995.

BARREIRO, E. J.; RODRIGUES, C. R. Modelagem molecular: uma ferramenta para o planejamento racional de fármacos de química medicinal. *Química Nova*, v. 20, n. 3, p. 300-310, 1997.

BARNEA, N.; DORI, Y. J. Computerized molecular modeling: the new technology for enhancing model perception among chemistry educators and learners. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, v. 1, n. 1, p. 109-120, 2000.

BRASIL. Ministério da Educação. *Diretrizes Curriculares Nacionais para os Cursos de Química*. Parecer CES/CNE 1.303/2001, homologação publicada no DOU 07/12/2001, Seção 1, p. 25. Resolução CES/CNE 08/2002, publicada no DOU 26/03/2002, Seção 1, p. 13.

BREWSTER M. E; POP E.; HUANG M. J.; BODOR N. "Contributions of molecular-orbital techniques to the study of dihydropyridines". *Heterocycles*, v. 37, n. 2, p. 1373-1415, 1994.

BURK, P.; KOPPEL, I. A.; KOPPEL, I.; LEITO, I.; TRAVNIKOVA, O. Critical test of performance of B3LYP functional for prediction of gas-phase acidities and basicities. *Chemical Physics Letters*, v. 323 n. 5-6, p. 482-489, 2000.

BOYD, D. B. *Compendium of software for molecular modeling*. In: Lipkowitz, K. B.; Boyd, D. B. (eds) *Reviews in computational chemistry*. New York: VCH Pub, 1990.

CAROBIN, C.; NETO, A. S. A. Um exemplo do uso de simulações computacionais aplicados no ensino de equilíbrio químico para estudantes de ensino médio. In: IV Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, *Anais eletrônicos*, n. 4, p. 1-14, Bauru, 2003. Disponível em: <<http://fep.if.usp.br/~profis/arquivos/ivenpec/Arquivos/Orais/ORAL173.pdf>>. Acesso em: 18 out. 2016.

CLARK, T. A handbook of computational chemistry: a practical guide to chemical structure and energy calculations. *American Scientist*, v. 75, n. 1, p. 79-80, 1987.

CLAUSEN, T. P. Combining a standard fisher esterification experiment with stereochemical and molecular-modeling concepts. *Journal of Chemical Education*, v. 88, n. 7, p. 1007-1009, 2011.

CLAUSS, A. D.; NELSEN, S. F. Integrating computational molecular modeling into the undergraduate organic chemistry curriculum. *Journal of Chemical Education*, v. 86, n. 8, p. 955-958, 2009.

COHEN, N. C.; BLANEY, J. M.; HUMBLET, C.; GUND, P.; BARRY, D. C. Molecular modeling software and methods for medicinal chemistry. *Journal of Medicinal Chemistry*, v. 33, n. 3, p. 883-894, 1990.

CURTISS, L. A.; RAGHAVACHARI, K.; REDFERN, P. C.; POPLE, J. A. Assessment of Gaussian-3 and density functional theories for a larger experimental test set. *The Journal of Chemical Physics*, v. 112, n. 17, p. 7374-7383, 2000.

CUSTÓDIO, R. Uma forma simplificada de deduzir as equações de Hartree e Hartree-Fock. *Química Nova*, v. 38, n. 7, p. 995-1001, 2015.

DALLACOSTA, A; FERNANDES, A. M. R; BASTOS, R. C. Desenvolvimento de um software educacional para o Ensino de química relativo à tabela periódica. In: IV Congresso Ibero-americano de Informática na Educação, *Anais eletrônicos*, n. 4, p. 1-18, Brasília, 1998. Disponível em: <http://www.niee.ufrgs.br/eventos/RIBIE/1998/pdf/com_pos_dem/160.pdf>. Acesso em: 20 set. 2016.

DENARI, G. B.; SACIOLOTO, T. R; CAVALHEIRO, E. T. G. Avaliação do uso de planilhas computacionais como uma ferramenta didática em química analítica qualitativa. *Química Nova*, v. 39, n. 3, p. 371-375, 2016.

DENNINGTON, R.; KEITH, T.; MILLAM, J. *GaussView*. Version 5. Semichem Inc. Shawnee Mission KS, 2009. Disponível em: <http://www.surfchem.fudan.edu.cn/teacher/lizh/Usefull_Files/g09/g_prod/gv5.htm>. Acesso em: 20 abr. 2015.

DEWAR, M. J. S.; THIEL, W. Ground states of molecules, 38. The MNDO method. approximations and parameters. *Journal of the American Chemical Society*, v. 99, n. 15, p. 4899-4907, 1977.

DEWAR, M. J. S.; ZOEBISCH, E. G.; HEALY, E. F.; STEWART, J. J. P. AM1 a new general purpose quantum mechanical model. *Journal of the American Chemical Society*, v. 107, n. 13, p. 3902-3909, 1985.

DRIEL, J. V.; GRÄBER, W. The teaching and learning of chemical equilibrium. In: GILBERT, J. K. *et al. Chemical Education: Towards research-based practice*. Kluwer Academic Publishers, p. 271–292, 2003.

EISENHARDT, K. M. Building theories from case study research. *Academy of Management Review*, v. 14, n. 4, p. 532-550, 1989.

ESQUEMBRE, F. Easy java simulations: a software tool to create scientific simulations in Java. *Computer Physics Communications*, v. 156, n. 2, p. 199-204, 2004.

ESSELMAN, B. J.; HILL, N. J. Integration of computational chemistry into the undergraduate organic chemistry laboratory curriculum. *Journal of Chemical Education*, v. 93, n. 5, p. 932-936, 2016.

FAST, P. L.; CORCHADO, J.; SANCHEZ, M. L.; TRUHLAR, D. G. Optimized parameters for scaling correlation energy. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 103, n. 17, p. 3139-3143, 1999.

FREITAS, L. C. Prêmio Nobel de Química 1998. *Química Nova na Escola*, n. 8, p. 3-6, 1998.

FRISCH, M. J. *et al.* *Gaussian 09*. Revision A.1. Gaussian, Inc. Wallingford. EUA, 2009. Disponível em: <http://www.surfchem.fudan.edu.cn/teacher/lizh/Usefull_Files/g09/g_prod/g09.htm>. Acesso em: 20 abr. 2015.

FOCK, V. “Selfconsistent field” mit austausch fur natrium. *Zeitschrift Fur Physik*, v. 62, n. 11-12, p. 795-805, 1930.

FORESMAN, J. B.; FRISCH, A. *Exploring chemistry with electronic structure methods*. 2 ed. Gaussian Inc.: Pittsburg, p. 181-187, 1993.

GIL, A. C. *Métodos e técnicas de pesquisa social*. 6. ed. São Paulo: Atlas S.A., 2008.

GILBERT, A. *Introduction to computational quantum chemistry: theory*. Curso. The Australian National University, Craig Building, 2007.

GIORDAN, M.; GÓIS, J. Telemática educacional e ensino de química: considerações em torno do desenvolvimento de um construtor de objetos moleculares. *Revista Latinoamericana de Tecnología Educativa*, Badajoz, v. 3, n. 2, p. 41-59, 2005.

GOEDHART, M. J.; KAPER, W. From chemical energetics to chemical thermodynamics. In: GILBERT, J.K. *et al.* *Chemical Education: Towards Research-based Practice*. Kluwer Academic Publishers, p. 339–362, 2003.

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. *Journal of Cheminformatics*, v. 4, n. 17, p. 1-17, 2012.

HARTREE, D. R. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 24, n. 1, p. 89-110, 1928a.

_____. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 24, n. 1, p. 111-132, 1928b.

_____. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 24, n. 1, p. 426-437, 1928c.

HEHRE W. J. *Spartan Student*. Wavefunction, Inc. Irvine. EUA, 2016. Disponível em: <<https://www.wavefun.com/>>. Acesso em: 05 fev. 2016.

HYPERCHEM Professional 8.0. *Hypercube*. Inc. Gainesville. EUA, 2013. Disponível em: <<http://www.hyper.com/>>. Acesso em: 23 fev. 2016.

JOHNSON, L. E.; ENGEL, T. Integrating computational chemistry into the physical chemistry curriculum. *Journal of Chemical Education*, v. 88, n. 5, p. 569-573, 2011.

KOROLKOVAS, A.; BURCKHALTER, J. H. *Essential of medicinal chemistry*. New York, Wiley-Interscience, 1976.

LEAL, R. C., NETO, J. M. M., LIMA, F. D. C. A., FEITOSA, C. M. (2010). A química quântica na compreensão de teorias de química orgânica. *Química Nova*, v. 33, n. 5, p. 1211-1215, 2010.

LEWARS, E. G. *Computational Chemistry: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*. 2 ed. New York: Springer, 2011.

LIKERT, R. A Technique for the Measurement of Attitudes. *Archives of Psychology*, v. 140, p. 1-55, 1932.

LINENBERGER, K. J.; COLE, R. S.; SARKAR, S. Looking beyond lewis structures: a general chemistry molecular modeling experiment focusing on physical properties and geometry. *Journal of Chemical Education*, v. 88, n. 7, p. 962-965, 2011.

LLEWELLYN, S.; NORTHCOTT, D. The “singular view” in management case studies. *Qualitative Research in Organizations and Management: An International Journal*, v. 2, n. 3, p. 194-207, 2007.

MARTIN, J. M. L.; OLIVEIRA, G. Towards standard methods for benchmark quality ab initio thermochemistry: W1 and W2 theory. *The Journal of Chemical Physics*, v. 111, n. 5, p. 1843-1856, 1999.

MARTINI, S. R.; HARTZELL, C. J. Integrating computational chemistry into a course in classical thermodynamics. *Journal of Chemical Education*, v. 92, n. 7, p. 1201-1203, 2015.

MARTINS, L. S.; LIMA, A. Métodos semiempíricos de química quântica no ensino da entalpia das reações químicas. *Scientia Plena*, v. 12, n. 6, p. 1-12, 2016.

MASSAROTTI, F. *Estudo de ácidos orgânicos pelo método da química computacional através de cálculos semi-empíricos*. 2015. 30f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Química Industrial) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Pato Branco, 2015.

MCNAUGHT, I. J. Testing and Extending VSEPR with WebMO and MOPAC or GAMESS. *Journal of Chemical Education*, v. 88, n. 4, p. 421-425, 2011.

MEDEIROS, A. C. S; MOITA, F. M. G; LIMA, R. C. A; NASCIMENTO, R. D. B. Avogadro: um recurso digital para a aprendizagem de modelos moleculares e ligações químicas. In: III Congresso Nacional de Educação, *Anais eletrônicos*, n. 3, p. 1-10, Natal, 2016. Disponível em: <http://www.editorarealize.com.br/revistas/conedu/trabalhos/TRABALHO_EV056_MD1_SA18_ID4873_15082016172401.pdf>. Acesso em: 15 jan. 2017.

- MELO, E. S.; MELO, J. R. Softwares de simulação no ensino de química: uma representação social na prática docente. *Educação Temática Digital*, Campinas, v. 6, n. 2, p. 51-63, 2005.
- MEUWLY, M. Theoretical and computational chemistry. *Chimia*, v. 64, n. 12, p. 867-870, 2010.
- MONTE, S. A.; Ventura, E. A importância do método de Hartree no ensino de química quântica. *Química Nova*, v. 34, n. 3, p. 527-534, 2011.
- MONTGOMERY, C. D. π Backbonding in carbonyl complexes and carbon-oxygen stretching frequencies: a molecular modeling exercise. *Journal of Chemical Education*, v. 84, n. 1, p. 102-105, 2007.
- MORAIS, C.; PAIVA, J. Simulação digital e atividades experimentais em Físico-Químicas. Estudo piloto sobre o impacto do recurso “Ponto de fusão e ponto de ebulição” no 7º ano de escolaridade. Sísifo. *Revista de Ciências da Educação*, v. 3, n. 7, p. 101-112. 2007.
- MOREIRA, M. *Subsídios teóricos para o professor pesquisador em ensino de ciências - a teoria da aprendizagem significativa*. 2. ed. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.
- MOREIRA, L. P. B.; SERRANO, A. Representações mentais de concepções espontâneas dos estudantes após utilização de softwares. *Revista Novas Tecnologias na Educação*, v. 11, n. 3, p. 1-10, 2013.
- MORGON, N. H. Theoretical calculation of proton affinities using basis set functions defined by the generator coordinate method. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 102, n. 11, p. 2050-2054, 1998.
- NASCIMENTO, F. B.; RIBEIRO, A. C. C.; ELLENA, J.; QUEIROZ, S. L.; Estudo das qualidades pedagógicas dos programas conquest e mercury visando benefícios para o ensino de química no nível superior. In: V Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, *Atas do V ENPEC*, n.5, p. 1-13, Bauru, Brasil, 2005. Disponível em: < <http://www.nutes.ufrj.br/abrapec/venpec/conteudo/artigos/3/pdf/p100.pdf> >. Acesso em: 20 jun. 2016.
- NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database. *NIST Standard Reference Database Number 101*. EUA, 2016. Editor: Russell D. Johnson III. Disponível em: < <http://cccbdb.nist.gov/>>. Acesso em: 15 fev. 2016a.
- _____. Livro de Química na Web. *Base de dados de Referência padrão do NIST número 69*. EUA, 2016. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America. Disponível em: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>>. Acesso em: 10 mar. 2016b.
- OCHTERSKI, J. W.; PETERSSON, G. A.; MONTGOMERY, J. A. A complete basis set model chemistry. V Extensions to six or more heavy atoms. *The Journal of Chemical Physics*, v. 104, n. 7, p. 2598-2619, 1996.

OCHS, R.S. Thermodynamics and Spontaneity. *Journal of Chemical Education*, v. 73, n. 10, p. 952-954, 1996.

OLIVEIRA, P. J. P. *Conjuntos de bases gaussianas para os átomos de H ate Ar: Aplicações em cálculos HF, MP2 e DFT de propriedades elétricas e magnéticas moleculares*, 2010. 114 f. Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória, 2010.

ORTOLAN, A. O. *Apostila de práticas de química computacional*. 2014. 88 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Química) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Pato Branco, 2014.

PATTON, M. *Qualitative research and evaluation methods*. 3. ed. Londres. Thousand Oaks: Sage Publications, 2002

PEREIRA, A. M. *Estudo ab-initio e DFT das nitrosaminas*. 2008. 118 f. Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal do Paraiba. João Pessoa, 2008.

PICINFORMÁTICA. *Gaussian*. São Paulo, 2016. Disponível em: <<http://www.picinfo.com.br/gaussian.php>>. Acesso em: 10 jan. 2017.

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

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MOREIRA, M. A. Desenvolvendo habilidades visuoespaciais: uso de software de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica em química. *Experiências Em Ensino de Ciências (UFRGS)*, v. 4, n. 1, p. 65-78, 2009.

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.

RODELLO, I. A.; SAKAI, R. K.; MANOEL, E. F. *Um ambiente virtual para auxiliar o ensino de química em escolas de ensino fundamental*. 2002. Disponível em: <<http://rodello.fearp.usp.br/VRLabQuim/artigos/rodellowie2002.pdf>> Acesso em: 12 de dezembro de 2016.

RODRIGUES, C.; DINIZ, J.; ALBUQUERQUE, M. G.; SANTOS, N. P.; ALENCASTRO, R. B.; LIMA, D.; CASTRO, H. C. Ambiente virtual: ainda uma proposta para o ensino. *Ciências e Cognição*, v. 13, n. 2, p. 71-83, 2008.

ROWLEY, C. N.; WOO, T. K.; MOSEY, N. J. A computational experiment of the endo versus exo preference in a diels-alder reaction. *Journal of Chemical Education*, v. 86, n. 2, p. 199-201, 2009.

SALTER, C.; FORESMAN, J. B. Naphthalene and azulene: semimicro bomb calorimetry and quantum mechanical calculations. *Journal of Chemical Education*, v. 75, n. 10, p. 1341-1345, 1998.

SCHMIDT M.W.; BALDRIDGE K. K.; BOATZ J. A. *The General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS)*. Universidade do Estado de Iowa. EUA, 2016. Disponível em: <<http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>>. Acesso em: 30 mar. 2016.

SKAF, M. S. O Prêmio Nobel de Química 2013. *Química Nova*, v. 35, n. 4, p. 243-246, 2013.

SÖZBILIR, M. A review of selected literature on students' misconceptions of heat and temperature. *Journal of Education*, v. 20, n. 1, p. 25-41, 2003a.

_____. What students' understand from entropy?: A review of selected literature. *Journal of Baltic Science Education*, v. 1, p. 21-27, 2003b.

STANTON, J. F.; GAUSS, J.; WATTS, J. D. *ACES III*. Universidade da Florida. Gainesville. EUA, 2014. Disponível em: <<http://www.qtp.ufl.edu/ACES/download.shtml>>. Acesso em: 02 abr. 2016.

STEWART, J. J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method. *Journal of Computational Chemistry*, v. 10, n. 2, p. 209-220, 1989.

STEWART J. P. *MOPAC2012*. Stewart Computational Chemistry. Colorado Springs. EUA, 2012. Disponível em: <<http://openmopac.net/>>. Acesso em: 11 ago. 2016.

STEWART J. P. *MOPAC2016*. Stewart Computational Chemistry. Colorado Springs. EUA, 2016. Disponível em: <<http://openmopac.net/>>. Acesso em: 15 ago. 2016.

TAMANI, S; TALBI, M.; RADID, M. The teaching of chemical thermodynamics at moroccan university: obstacles and areas for improvement. *Procedia - Social and Behavioral Sciences*, v. 191, p. 2612-2617, 2015.

TERENCE, A. C. F.; FILHO, E. E. Abordagem quantitativa, qualitativa e a utilização da pesquisa-ação nos estudos organizacionais. In: XXVI Encontro Nacional de Engenharia de Produção, *Anais eletrônicos*, n. 26, p. 1-9, Fortaleza, 2006. Disponível em: <http://www.abepro.org.br/biblioteca/enegep2006_tr540368_8017.pdf>. Acesso em: 15 ago. 2016.

THIEL, W. Semiempirical quantum-chemical methods. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, v. 4, n. 2, p. 145-157, 2013.

THIEL W.; VOITYUK, A. Extension of MNDO to d-Orbitals: parameters and results for the second-row elements and for the zinc group. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 100, n. 2, p. 616-626, 1996.

THOMAS, P. L.; SCHWENZ, R. W. College physical chemistry students' conceptions of equilibrium and fundamental thermodynamics. *Journal of Research in Science Teaching*, v. 35, n. 10, p. 1151-1160, 1998.

TRUHLAR, D. G.; MCKOY, V. Guest editors' introduction: computational chemistry computational chemistry. *Computing in Science & Engineering*, v. 2, n. 6, p. 19-21, 2000.

VASCONCELOS, F. C. G. C.; ARROIO A. Explorando as percepções de professores em serviço sobre as visualizações no ensino de química. *Química Nova*, v. 36, n. 8, p. 1242-1247, 2013.

VEIT, E. A.; ARAUJO, I. S. Modelagem computacional no ensino de Física. *Revista do Centro de Educação da Universidade Federal de Alagoas*, Alagoas, v. 13, n. 21, p. 51-70, 2004.

VESSECCHI, R.; GALEMBECK, S. E.; LOPES, N. P.; NASCIMENTO, P. G. B. D.; CROTTI, A. E. M. Aplicação da química quântica computacional no estudo de processos químicos envolvidos em espectrometria de massas. *Química Nova*, v. 31, n. 4, p. 840-853, 2008.

WANG, L. Using molecular modeling in teaching group theory analysis of the infrared spectra of organometallic compounds. *Journal of Chemical Education*, v. 89, n. 3, p. 360-364, 2012.

WASS, J. A. Software: modeling molecules. *Science*, v. 290, n. 5499, p. 2098-2104, 2000.

WERNER H. J.; KNOWLES P. J. *Molpro quantum chemistry package*. Universidade de Stuttgart, Alemanha, 2012. Disponível em: <<https://www.molpro.net/>>. Acesso em: 16 out. 2016.

WU, H.; KRAJCIK, J. S.; SOLOWAY, E. Promoting understanding of chemical representations: students use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching*, v. 38, n.7, p. 821-842, 2001.

YOUNG, D. C. *Chemistry computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real-world problems*. 9. ed. New York: John Wiley & Sons, 2001.

APÊNDICE - A

Avaliação Diagnóstica I

01. Qual o nível de habilidade que você considera ter com as funcionalidades dos programas (*softwares*) de um computador?

() bom () razoável () pouco () nenhum () Outro: _____

02. Por incentivo do professor ou curiosidade, você já usou em algum momento os softwares educacionais direcionados ao ensino de química? Justifique.

03. Conhece algum *software* de modelagem molecular? Se SIM, qual (ais)? Justifique.

04. Caso tenha respondido NÃO no quesito anterior (QUESTÃO 3), quais os motivos que te levaram a não conhecê-los?

() Desinteresse pessoal () Ausência de incentivo docente () Falta de estrutura física
() Falta de informação () Outro: _____

05. Você considera importante à implementação de *softwares* educacionais no ensino de química? Justifique.

06. Para a utilização de *softwares* de modelagem é preciso ter conhecimentos sobre ligações químicas e geometria molecular, sendo assim, de acordo com a teoria da repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência é correto afirmar que a geometria molecular do dióxido de carbono é do tipo:

- a) trigonal plana.
- b) piramidal.
- c) angular.
- d) linear.
- e) tetraédrica.

APÊNDICE - B

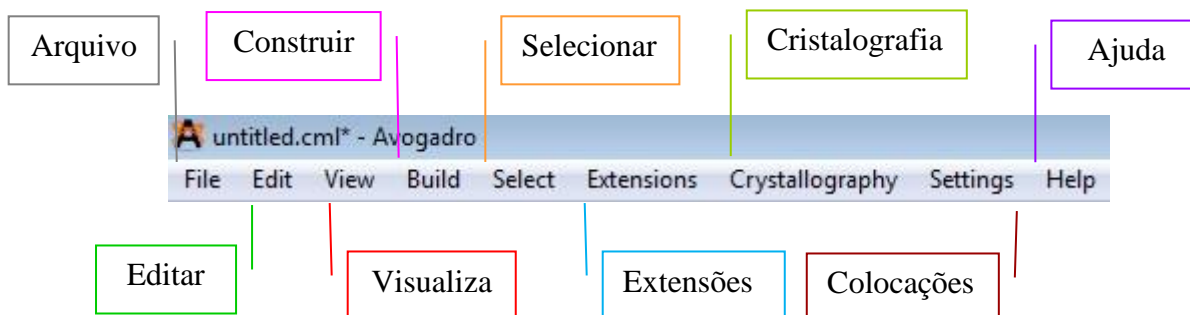
Tutorial I

Avogadro 1.1.1

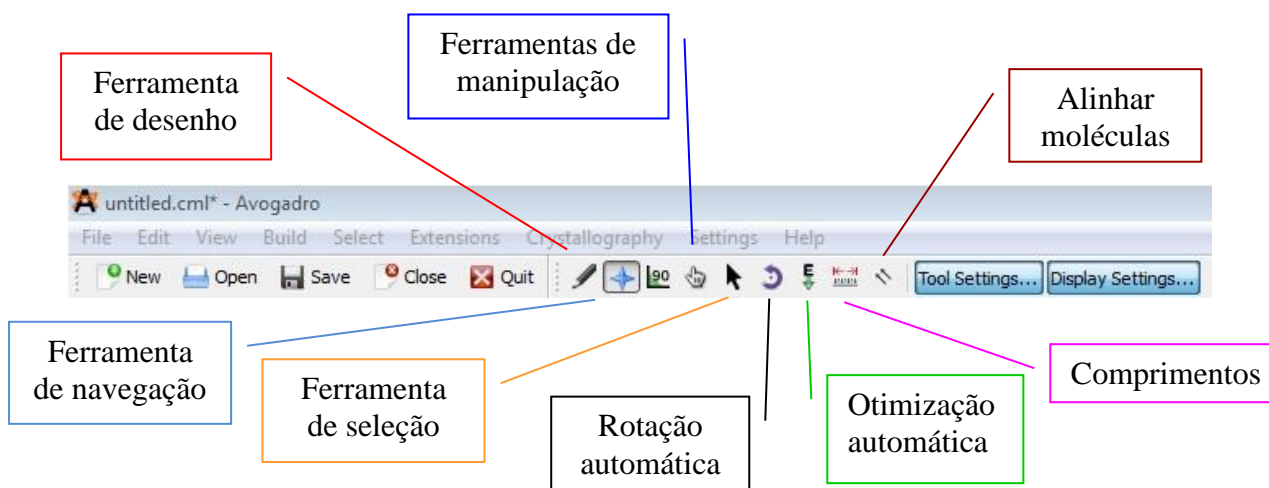
Objetivo: Aprender a utilizar as ferramentas dos softwares de modelagem molecular para a construção e otimização das estruturas. O Avogadro é um software livre para edição e visualização de moléculas em três dimensões (3D). Disponível gratuitamente em: <https://sourceforge.net/projects/avogadro/files/latest/download>

Passo 1: Conhecendo as funcionalidades do software


I. Barra de menus

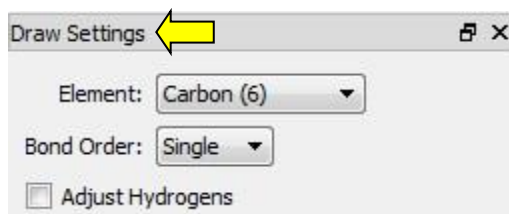


II. Barra de ferramentas

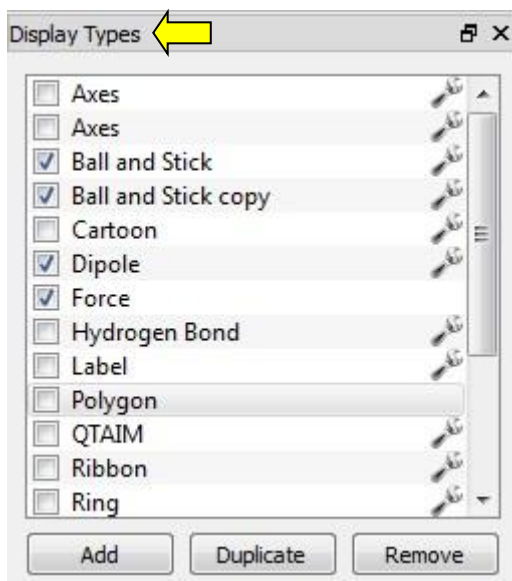


Passo 2: Construindo as moléculas

I. Para iniciar a construção de uma molécula é preciso clicar sobre o ícone *Draw Tool*  na barra de ferramentas e em seguida escolher o tipo de elemento químico e a opção de ligação química na janela *Draw Settings*. Caso não encontre o elemento desejado escolha a opção *other* que surgirá a tabela periódica dos elementos químicos.







II. Em seguida clique sobre a área de desenho e construa a molécula desejada, caso pretenda alterar o tipo de exibição molecular, direcione o cursor para a janela *Display types*.




III. Para usar estruturas prontas (fragmentos de moléculas) clica em *Build* → *Insert* na barra de menus e escolhe o tipo de fragmento que deseja inserir.

Passo 3: Modos de visualização das moléculas


I. A molécula depois de construída pode ser visualizada em três dimensões com o auxílio das ferramentas *Navigation Tool*  (F9), *Manipulation Tool*  (F10) e *Auto Rotation Tool* , em conjunto com as funcionalidades do *mouse*.

II. Para observar as rotações e angulações em uma molécula é necessário clicar sobre o ícone *Bond Centric Manipulation Tool*  em conjunto com as funcionalidades do *mouse*.

III. Para obter os comprimentos das distâncias entre as ligações e dos ângulos de uma molécula é preciso clicar sobre o ícone *Click to Measure*  (F12) em conjunto com as funcionalidades do *mouse*.

IV. É possível criar novas abas de visualização na barra de menus com a opção *View* → *New View*, duplicar a que já existe em *Duplicate View*, centralizar a molécula em *Center*, maximar a tela em *Full Screen* e alterar a cor do plano de fundo em *Set Background Color*.


Passo 4: Otimizando as moléculas

I. Após a construção de uma molécula pode-se obter a sua estrutura mais estável, ou seja, a de menor energia através da otimização. Para isso é preciso clicar sobre o ícone *Auto optimization Tool*  e depois *Stop* ou então no menu *Extensions* → *Optimize Geometry*.

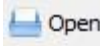
Passo 5: Visualizando as propriedades

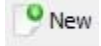
I. Após otimização da molécula, é possível visualizar as propriedades do composto na opção *View* → *Properties* na barra de menus, podendo assim verificar as propriedades da molécula, dos átomos, das ligações, dos ângulos, das torções e das conformações.


Passo 6: Salvando os arquivos

I. Para salvar os dados e estruturas moleculares é preciso clicar sobre o ícone  *Save* na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *Save* (Ctrl + S) ou *Save As* (Ctrl + Shift + S) na barra de menus e escolher o local de destino, o nome do arquivo e a extensão desejada.

Passo 7: Acessar arquivos salvos, abrir e fechar janelas

I. Para ter acesso a um arquivo salvo, deve-se clicar sobre o ícone  *Open* na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *Open* (Ctrl + O) na barra de menus e selecionar o arquivo que deseja.

II. Para abrir uma nova janela para a construção de moléculas clica sobre o ícone  *New* na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *New* (Ctrl + N) na barra de menus.

III. Para deletar moléculas construídas, clica sobre o ícone  *Close* na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *Close* (Ctrl + W) na barra de menus.

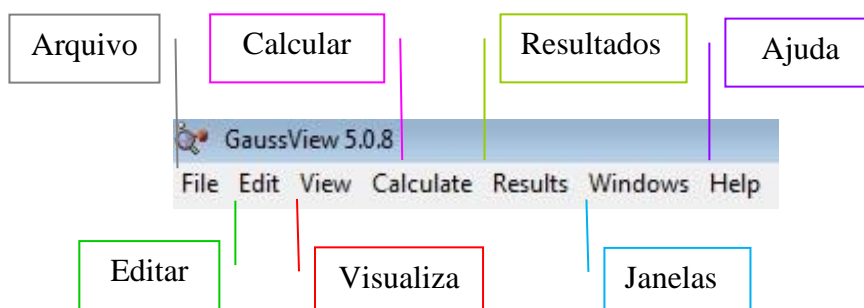
IV. Para sair do Avogadro clica sobre o ícone  *Quit* na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *Quit* (Ctrl + W) na barra de menus.

GaussView 5.0

Software incluso no pacote computacional Gaussian 09, o qual permite importar ou construir as estruturas moleculares que lhes interessam, criar, lançar, monitorar e controlar os cálculos no Gaussian 09, recuperar e visualizar os resultados.

Passo 1: Conhecendo as funcionalidades do software

I. Barra de menus



II. Barra de ferramentas



- Fragmento de elemento	- Indagar	- Salvar arquivo imagem
- Fragmento de anel	- Adicionar valência	- Salvar filme
- Fragmento de grupo-R	- Excluir átomo	- Limpar
- Fragmento biológico	- Inverter simetria	- Editor da lista de átomos
- Fragmento de costume	- Selecionar átomos	- Editor PBC
- Modificar ligação	- Seleção elástica	- Editor de Orbitais Mol.
- Modificar ângulo	- Abrir arquivo	- Visualizar arquivo
- Modificar diedro	- Salvar arquivo	- Calcular no Gaussian

Passo 2: Construindo as moléculas

I. Para iniciar a construção de uma molécula é preciso clicar sobre o ícone *Element fragment* na barra de ferramentas e em seguida escolher o tipo de elemento químico e a opção de fragmento para aquele elemento na tabela periódica. Em seguida clique sobre a janela do construtor (G1:M1:V1) sendo esse o local de construção como também o de informações a cerca da estrutura (átomos, elétrons, cargas, multiplicidades, comprimentos de ligações e de ângulos).

II. Para visualizar e utilizar os fragmentos de anel , os fragmentos de grupo-R e os fragmento biológico , basta clicar sobre esses ícones na barra de ferramentas e selecionar o tipo, após isso clica sobre a janela G1:M1:V1 e monta a molécula.

III. Ao construir a molécula, caso deseje alterar o tipo de ligação entre os átomos, modificar o ângulo e o diedro é preciso clicar sobre esses ícones e os átomos participantes das ligações ou das formações dos ângulos na molécula.

IV. Para excluir átomos de uma molécula é necessário clicar sobre o ícone *Delete Atom* , eliminando assim os átomos indesejados da estrutura. Já para excluir toda a molécula, basta clicar sobre o ícone *Delete* na barra de ferramentas.

V. Para deixar a molécula com uma estrutura organizada (comprimento de ligação, ângulos e geometrias pré-definidas) deve-se clicar sobre o ícone *Clean* na barra de ferramentas.


VI. Outra maneira de usar essas funções é através da opção View → *Builder* na barra de menus ou clicando com o botão direito do *mouse* sobre a janela G1:M1:V1 e escolhendo a opção *Builder*.


Passo 3: Modos de visualização das moléculas



I. A molécula depois de construída pode ser visualizada em três dimensões (3D) com o auxílio do *mouse*, ao clicar com o botão direito sobre a molécula será possível gira-la para

direita e para esquerda como também aumentar e reduzir o seu tamanho. Já ao clicar com o botão esquerdo é possível gira-la em todas as direções.


II. Com a Junção dos comandos *Shift* + botão esquerdo do *mouse* é possível arrastar a molécula para qualquer posição da janela do construtor.

III. Para centralizar a molécula na janela do construtor basta clicar sobre o ícone *Center Molecule in View*  na barra de ferramentas ou então na opção *View* → *Center* na barra de menus. Ainda na opção *View* é possível adicionar/omitir hidrogênios, numerações, símbolos, ligações, eixos cartesianos, ferramentas de posicionamento, outros.


IV. Ao clicar sobre o ícone *Inquire*  e sobre os átomos que se pretende, é possível encontrar o símbolo do elemento, a sua numeração no composto, o comprimento das ligações, os ângulos das ligações e dos diedros.



V. Pode-se criar novas janelas para construção de moléculas na opção *File* → *New* → *Create Molecule Group* na barra de menus, duplicar a que já existe no ícone *Add View of Molecule Group*  na barra de ferramentas e alterar a cor do plano de fundo do construtor em *View* → *Display Format* ou no ícone *Display Format Editor* .

Passo 4: Visualizando alguns dados moleculares


I. Após a construção da molécula, é possível visualizar alguns dados do composto no ícone *Atom List Editor*  na barra de ferramentas ou na opção *Edit* → *Atom List* na barra de menus. Tendo acesso ao símbolo do elemento, os comprimentos das ligações, as coordenadas cartesianas, os ângulos das ligações e dos diedros.

Passo 5: Salvando os arquivos

I. Para salvar os dados e estruturas moleculares é preciso clicar sobre o ícone *Save*  na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *Save* (Ctrl + S) na barra de menus e escolher o local de destino, o nome do arquivo e a extensão gif.

II. Pode-se salvar a imagem do arquivo no ícone *Save Image File* , como também uma sequência de imagens na forma de vídeo no ícone *Save Movie*  ou salva-los na opção *File* da barra de menus.

Passo 6: Acessar arquivos salvos e fechar janelas

I. Para ter acesso a um arquivo salvo, deve-se clicar sobre o ícone *Open File*  na barra de ferramentas ou então sobre a opção *File* → *Open* (Ctrl + O) na barra de menus e selecionar o arquivo desejado.

II. Para sair do GaussView, direcione-se para a barra de menus e clique sobre a opção *File* → *Exit*.

APÊNDICE - C

Questionário I

01. A aula prática a cerca das funcionalidades dos softwares Avogadro e GaussView 5.0 contribuiu para o aprofundamento do seu conhecimento em química? De que forma?

02. A construção de moléculas nos softwares Avogadro e GaussView 5.0 ajudou a formular uma melhor interpretação do mundo microscópico da matéria? Isso facilita o aprendizado? Como?

03. Os softwares de modelagem molecular aplicam conhecimentos químicos para a construção de moléculas. Ao utiliza-los o aluno põem em prática os seus conhecimentos teóricos, em sua opinião, isso faz com que melhore o interesse e a motivação pelo conhecimento? Justifique.

() sim () indiretamente () não influencia () outra: _____

04. Ter conhecimento sobre a utilização e funcionamento de softwares de modelagem molecular, contribui para a sua formação docente? De que forma?

05. Relate os pontos positivos e negativos da primeira aula prática sobre as funcionalidades dos softwares GaussView 5.0 e Avogadro.

ESCALA DE LIKERT

CT - Concordo Totalmente; C – Concordo; I – Indiferente;
D – Discordo; DT - Discordo Totalmente

1. Os softwares facilitaram a forma de visualização das moléculas, dando-lhes um sentido mais realístico e concreto.	CT	C	I	D	DT
2. A prática estimulou um maior interesse, motivação e curiosidade dos graduandos pelo conhecimento.	CT	C	I	D	DT
3. Conhecer e utilizar softwares de modelagem molecular ajudará no trabalho docente dos graduandos.	CT	C	I	D	DT
4. Ao longo da aula prática foi possível relembrar de alguns conteúdos já estudados da disciplina de Química.	CT	C	I	D	DT
5. Houve dificuldades em executar as funcionalidades dos softwares a partir da sequência de passos presentes no tutorial.	CT	C	I	D	DT

APÊNDICE - D

Avaliação Diagnóstica II

01. A primeira lei da Termodinâmica trata do princípio de conservação da energia. Nela, uma dada quantidade de calor, Q , cedida a um sistema termodinâmico será usada para aumentar a energia interna, ΔU , do sistema e realizar trabalho, W . Dessas três grandezas da primeira lei:

- a) Q é independente do processo.
- b) ΔU é independente do processo.
- c) W é independente do processo.
- d) Todas dependem do processo.
- e) Nenhuma depende do processo.

02. Um gás é confinado em um cilindro sob pressão atmosférica constante. Quando 518 J de calor é adicionado ao gás, ele expande e realiza 127 J de trabalho na vizinhança. Quais os valores de ΔU e ΔH para esse processo?

03. Quantos joules são necessários para aquecer 100 g de cobre ($c = 0,389 \text{ J/g.K}$), de 10°C até 100°C ? Quando uma mesma massa de alumínio ($c = 0,908 \text{ J/g.K}$) a 100°C é exposta á mesma quantidade de calor calculada, qual dos metais fica mais quente, o cobre ou alumínio?

04. Qual método quântico computacional é capaz de fornecer resultados bem precisos para moléculas com poucos átomos e elétrons, porém é computacionalmente inviável para moléculas maiores?

05. Qual(ais) a(s) extensão(ões) utilizada(s) para salvar um arquivo de entrada (*input*) quando se utiliza o pacote computacional Gaussian 09W?

APÊNDICE - E



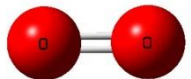
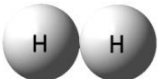
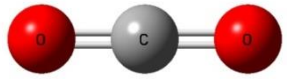
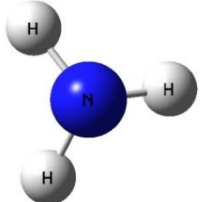
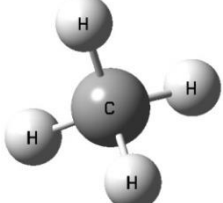
Tutorial II

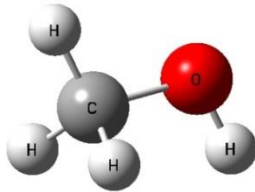
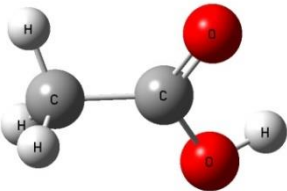
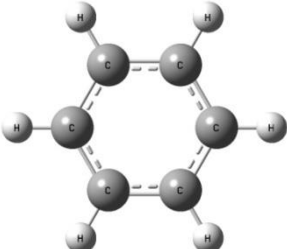
Pacote Gaussian 09W

Objetivo: Investigar as contribuições energéticas de diferentes moléculas e as suas propriedades térmicas em diferentes temperaturas. O arquivo com todas as informações sobre os cálculos termoquímicos no Gaussian 09W encontra-se no endereço eletrônico: http://www.gaussian.com/g_whitepap/thermo.htm

Passo 1. Selecionar na Tabela 1 um gás monoatômico, uma molécula linear e outra não linear, e em seguida construí-las em diferentes janelas no software GaussView 5.0.

Tabela 1. Substâncias químicas, suas fórmulas moleculares, modelos pau e bola, entalpia de formação, atomicidades e linearidades a 298, 15 K

Nome	Fórmula molecular	Modelo pau e bola*	Entalpia de Formação ($\Delta_f H^\circ$)** kJ.mol ⁻¹	Atomicidade/Linearidade
Hélio	He		0	Monoatômica
Argônio	Ar		0	Monoatômica
Gás oxigênio	O ₂		0	Diatômica/Linear
Gás Hidrogênio	H ₂		0	Diatômica/Linear
Dióxido de carbono	CO ₂		-393.51	Poliatômica/Linear
Amônia	NH ₃		-45.94	Poliatômica/não linear
Metano	CH ₄		-74.60	Poliatômica/não linear

Metanol	CH ₄ O		-201,00	Poliatômica/ não linear
Ácido etanoico	C ₂ H ₄ O ₂		-432.30	Poliatômica/ não linear
Benzeno	C ₆ H ₆		82.93	Poliatômica/ não linear

* Modelos moleculares construídos no GaussView 5.0.

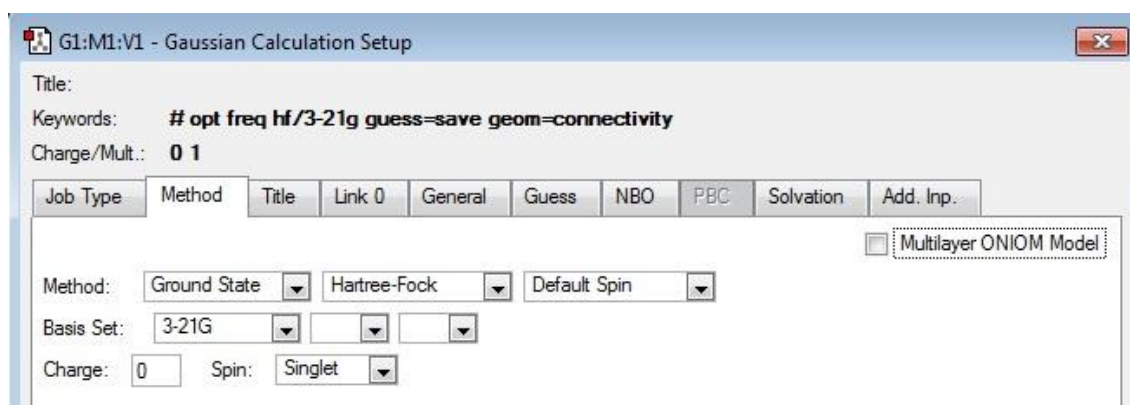
**Valores experimentais disponíveis em <http://cccbdb.nist.gov/introx.asp>.

Passo 2: Submeter aos cálculos termoquímicos no Gaussian 09W

I. Após a construção da molécula é necessário submeter à estrutura aos cálculos termoquímicos a fim de se obter os seguintes dados energéticos:

- Energia do ponto zero (ZPE);
- Energia térmica interna (E)
- Capacidade calorífica a volume constante (C_v);
- Energias cinéticas translacional, rotacional e vibracional;
- Entalpia (H).

II. Após a construção da molécula direciona-se para a barra de menus e clica sobre a opção **Calculate > Gaussian Calculation Setup**. Tal procedimento deve ser feito para um gás monoatômico, uma molécula linear e outra não linear, disponíveis na Tabela 1S. Logo em seguida abrirá uma janela para configurar o cálculo a ser realizado pelo Gaussian 09W:




Onde será preciso informar:

- **Job Type** > *Opt + Freq*
- **Method** > *Hartree-Fock, 3-21G*
- **Title** > **Job Title** > *Nome do arquivo*
- **Guess** > *Save orbitals to checkpoint file*
- **Additional KeyWords** > *vazio* (entende-se que a temperatura seja de 298,15 K).
- Em seguida clica em **Submit** > **Save** > **nome.gjf** > **Ok**

Aviso: Ao salvar os arquivos de entrada (*input*) deve-se utilizar a extensão (.gjf)

III. A partir disso os cálculos serão realizados pelo *Gaussian* e ao concluí-lo aparecerá o aviso de término. Os resultados poderão ser visualizados como arquivos de saída (*Output*) ao selecionar a extensão (.log ou .out) e direcionar-se para a opção **Results** na barra de menus do *GaussView*. Nesse menu teremos:

- *Summary*
- *Charge Distribution*
- *Vibrations*
- *View File*
- *Stream Output File*

Aviso: Ao clicar sobre o ícone  será direcionado ao endereço (file:///C:/g09w/help/results.htm), onde terá acesso a mais informações a cerca do menu resultados.

- Registrar os resultados para as energias termoquímicas presentes no *Output* nas Tabelas 2 e 3 a seguir:

Tabela 2. Valores totais das energias para as moléculas a temperatura de 298,15 K

ENERGIAS	Monoatômica:	Linear:	Não linear:
ZPE (kcal.mol ⁻¹)			
H (Hartree*)			
E (kcal.mol ⁻¹)			
C _v (cal. K ⁻¹ . mol ⁻¹)			
Modos vibracionais			

*1 Hartree equivale aproximadamente a 627, 51 kcal/mol.

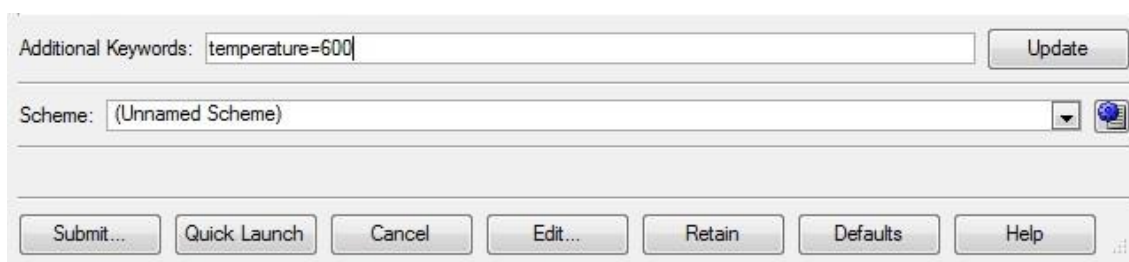
Tabela 3. Valores das contribuições energéticas dos movimentos para as moléculas a temperatura de 298,15 K

ENERGIA CINÉTICA	Monoatômica:		Linear:		Não linear:	
	E (Kcal/mol)	C _v (Cal/mol.K)	E (Kcal/mol)	C _v (Cal/mol.K)	E (Kcal/mol)	C _v (Cal/mol.K)
Translação						
Rotação						
Vibração						
Valor total						

Passo 3: Observar as propriedades térmicas das moléculas em diferentes temperaturas.

I. Realizar o procedimento do passo 2 para a molécula escolhida, em diferentes temperaturas, alterando-se apenas o título e a palavra chave. Por exemplo: **Additional KeyWords** >

temperature=600. Devendo-se utilizar os seguintes valores de temperaturas para a efetivação dos demais cálculos: 600 K, 900 K, 1200 K e 1500 K.



II. Os resultados para as energias em diferentes temperaturas devem ser registrados na Tabela 4 a seguir:

Tabela 4. Valores totais para as energias térmicas e capacidade caloríficas a volume constante da molécula de _____ em diferentes temperaturas

TEMPERATURA (K)	E (kJ/mol)	C _v (cal/mol.K)
298		
600		
900		
1200		
1500		

Passo 4: Visualizar os modos vibracionais, as geometrias das moléculas, os gráficos de energias e os espectros após os cálculos no Gaussian 09W.

I. Os modos vibracionais e as suas frequências podem ser observadas após o cálculo ao clicar sobre a opção **Results > Vibrations** na barra de menus do GaussView 5.0. Nessa janela pode-se:

Mode #	Freq	Infrared	Raman Activity	Depolar-P	Depolar
1	466.38	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	466.38	0.0000	0.0000	0.0000	0.5256
3	698.37	0.0000	0.0000	3.5645	0.7500
4	698.37	0.0000	0.0000	3.5645	0.7500
5	784.97	152.4400	0.0000	0.0000	0.0000
6	819.83	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
7	995.59	0.0000	0.0000	5.0167	0.7500
8	995.59	0.0000	0.0000	5.0167	0.7500
9	1078.25	0.0000	0.0000	53.6976	0.1196
10	1136.80	3.6440	0.0000	0.0000	0.0000
11	1136.80	3.6440	0.0000	0.0000	0.0000
12	1148.01	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
13	1156.74	0.0000	0.0000	0.0000	0.7421

Animate Vibration:

- Iniciar uma animação em **Start Animation**, demonstrando cada modo vibracional e o seu deslocamento vetorial na molécula;
- Salvar uma sequência de imagens dos modos vibracionais em **Save Movie**;

- Obter os espectros de *Infrared* (IR) e *Raman* do composto ao clicar sobre a opção **Spectrum**.

II. Para visualizar as geometrias intermediárias, direciona-se a barra de menus do *GaussView* e clica sobre a opção **File > Open**, com isso abrirá uma janela onde dará acesso aos arquivos salvos. Em seguida:

- Selecione a extensão (***.out *.log**) e o arquivo desejado;
- Marque na parte inferior da janela a opção **Read Intermediate Geometries (Gaussian Optimizations Only)** e clique em Abrir;
- Logo depois clique sobre a opção **Results > Optimization** na barra de menus para obter o gráfico da relação entre a *Energia total x Número de otimizações* do composto.
- Para obter outras relações gráficas (coordenadas cartesianas, ligações, ângulos, diedro, cargas atômicas, vetor dipolo) basta clicar sobre a opção **Plots > Plot Molecular Property** da janela *Optimization plot*.

Passo 5: Exportar e utilizar dados para a construção de gráficos de energias.

I. Os dados gráficos podem ser salvos (.txt) e exportados em várias extensões (.svg .png .jpeg .jpg .bmp) para outros softwares, tais como o *Excel*, *Origin*, *InKscape*, outros. Para isso é preciso que clique com o botão direito do mouse sobre o gráfico e escolha a opção **Save** ou **Export**.

II. A partir dos dados registrados na tabela 4S, pode-se construir um gráfico de *Energia térmica x Temperatura* e outro de *Capacidade calorífica a volume constante x Temperatura*, utilizando o software *Origin* ou *Excel*. Adicionam-se as energias ao eixo y do gráfico e as temperaturas ao eixo x, plota-o no formato de linhas e o salva.

APÊNDICE - F

Questionário II

01. Ao realizar os cálculos, você conseguiu observar as diferenças entre os valores de energias para os átomos e moléculas utilizados? De que forma? Justifique.

() SIM () SIM, PARCIALMENTE () NÃO () OUTRA: _____

02. O que ocorreu com as energias internas e as capacidades caloríficas a volume constante das moléculas quando foram submetidas a diferentes temperaturas? Justifique.

03. O pacote computacional Gaussian 09W realiza a resolução de equações matemáticas para o cálculo de diferentes energias. Isso facilita a resolução e obtenção de cálculos termoquímicos? Justifique.

04. Após a obtenção dos cálculos e a interpretação dos resultados, o seu entendimento melhorou a cerca dos conteúdos trabalhados em sala de aula? Justifique.

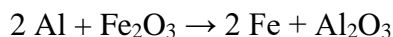
05. Relate os pontos positivos e negativos da aula prática sobre os cálculos termoquímicos utilizando os softwares Avogadro, GaussView 5.0 e Gaussian 09W.

ESCALA DE LIKERT CT - Concordo Totalmente; C – Concordo; I – Indiferente; D – Discordo; DT - Discordo Totalmente					
1. Com os resultados dos cálculos foi possível analisar os conteúdos energéticos em diferentes compostos.	CT	C	I	D	DT
2. Foi possível observar a relação da variação de temperatura com a capacidade calorífica e a energia interna nas substâncias.	CT	C	I	D	DT
3. A utilização dos softwares facilitaram a execução dos cálculos energéticos, diminuindo os obstáculos impostos pelos cálculos matemáticos.	CT	C	I	D	DT
4. A aula prática complementou os conteúdos trabalhados em sala de aula.	CT	C	I	D	DT
5. A interpretação dos resultados após os cálculos foram claros e satisfatórios.	CT	C	I	D	DT

APÊNDICE - G

Avaliação Diagnóstica III

01. Calcule o ΔH° para a redução do óxido férrico pelo alumínio (reação térmica) a 25 °C. Sabendo-se que a entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$) do Fe_2O_3 equivale a -824,2 kJ/mol e o $\Delta_f H^\circ$ do Al_2O_3 equivale a -1675,7 kJ/mol.

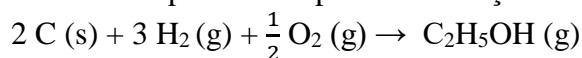


02. Defina o sinal do ΔS para as reações a seguir:

- a) $\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{O}(\text{g})$
- b) $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{NH}_3(\text{g})$
- c) $\text{Br}_2(\text{l}) \rightarrow \text{Br}_2(\text{g})$
- d) $\text{N}_2(\text{g}, 10 \text{ atm}) \rightarrow \text{N}_2(\text{g}, 1 \text{ atm})$
- e) $\text{C}(\text{s}, \text{grafite}) \rightarrow \text{C}(\text{s}, \text{diamante})$

03. Calcule o ΔS , em kJ/k . mol, para as transições de fase, sabendo que o ΔH de fusão do gelo = 1,44 Kcal/mol e o ΔH de vaporização da água = 9,72 kcal/mol. a) O ΔS de fusão do gelo a 0°C e b) O ΔS vaporização da água.

04. Calcule o $\Delta_f G^\circ$ a 25 °C e defina a espontaneidade para a reação de formação de um mol de etanol a partir dos valores de entalpias e entropias de formação das substâncias.



Dados: ΔS° , em J/mol, do $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{g}) = 282,6$; $\text{C}(\text{s}) = 5,74$; $\text{O}_2(\text{g}) = 205,03$; $\text{H}_2(\text{g}) = 130,57$. $\Delta_f H^\circ \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{g}) = -235 \text{ kJ/mol}$.

05. Os programas computacionais para química quântica são utilizados em química computacional para implementar os métodos de química quântica. Dessa forma eles incluem diferentes métodos de cálculos, quais são os mais utilizados na literatura?

APÊNDICE - H

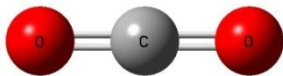

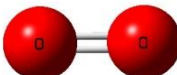
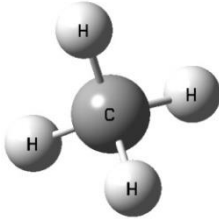
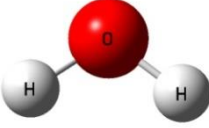
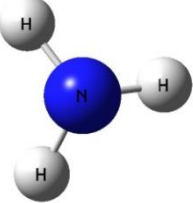
Tutorial III

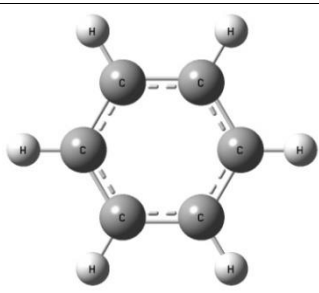
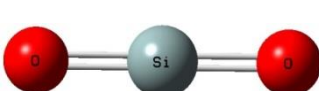
Pacote Gaussian 09W

Objetivo: Calcular e analisar os dados termodinâmicos utilizando o pacote computacional Gaussian 09W para pequenas moléculas, assim como as suas variações de energias em reações químicas. O arquivo com todas as informações sobre os cálculos termoquímicos no Gaussian 09W encontra-se no endereço eletrônico: http://www.gaussian.com/g_whitepap/thermo.htm

Passo 1. Seleccionar na Tabela 1 as moléculas que serão utilizadas nas Tabelas 2 e 5 desse tutorial para serem construídas no software GaussView 5.0.

Tabela 1. Relação das substâncias químicas com os nomes, fórmulas moleculares, modelos pau e bola, entropia molar e estados físicos a 298,15 K

Nome	Fórmula molecular	Modelo pau e bola*	Entropia molar (S_m°)** $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$	Estado físico a 25 °C
Dióxido de carbono	CO ₂		213.79	Gás
Gás hidrogênio	H ₂		130.68	Gás
Gás oxigênio	O ₂		205.14	Gás
Metano	CH ₄		186.37	Gás
Água	H ₂ O		188.84	Líquido
Amônia	NH ₃		192.77	Líquido

Benzeno	C ₆ H ₆		269.30	Líquido
Dióxido de silício	SiO ₂		228.72	Sólido

* Modelos moleculares construídos no GaussView 5.0.

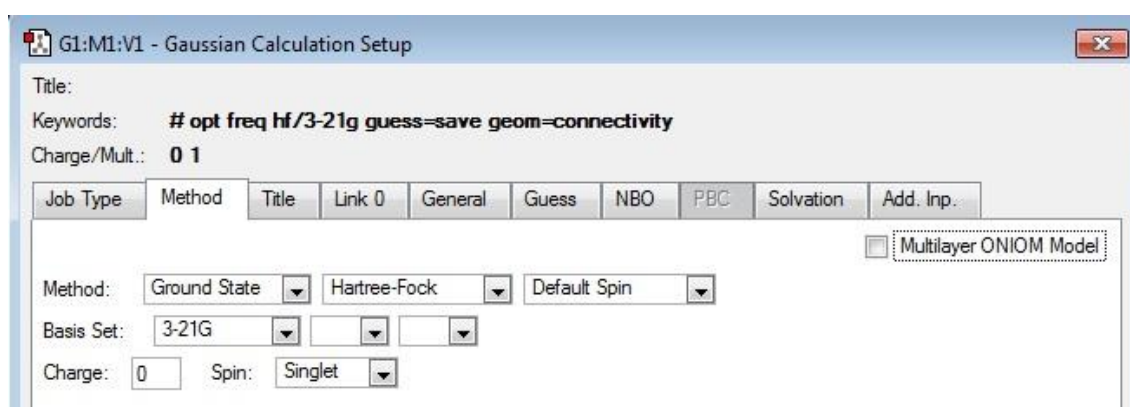
**Valores experimentais disponíveis em <http://cccbdb.nist.gov/introx.asp>.

Passo 2: Submeter aos cálculos termoquímicos no Gaussian 09W

I. Após a construção da molécula é necessário submeter à estrutura aos cálculos termoquímicos a fim de se obter os seguintes dados energéticos:

- Soma eletrônica térmica com a entalpia de correção ($\epsilon^\circ + H_{corr}$)
- Soma eletrônica térmica com a energia livre de correção ($\epsilon^\circ + G_{corr}$)
- Entropia molar (S°_m)
- Entalpia da reação ($\Delta_r H^\circ$)
- Entropia da reação ($\Delta_r S^\circ$)
- Energia livre de Gibbs da reação ($\Delta_r G^\circ$)

II. Após a construção das substâncias presentes nas Tabelas 2 e 5, deve-se direcionar para a barra de menus e clicar sobre a opção **Calculate > Gaussian Calculation Setup**, assim uma nova janela surgirá e nela será preciso informar o tipo de trabalho, método e base a serem utilizados.



- Em seguida clica em **Submit > Save > nome.gjf > Ok**

Aviso: Ao salvar os arquivos de entrada (*input*) deve-se utilizar a extensão (.gjf)

III. Com isso os cálculos serão realizados pelo Gaussian 09W e ao concluí-lo aparecerá o aviso de término. Os resultados poderão ser visualizados como arquivos de saída (*Output*) ao

selecionar a extensão (.log ou .out) ou direcionar-se para a opção **Results** na barra de menus do GaussView 5.0.

- Registrar os resultados para as energias termoquímicas presentes no *Output* na Tabela 2 e calcular as variações de energias e registrar na Tabela 3:

Tabela 2. Cálculos termodinâmicos no Gaussian 09W para moléculas na temperatura de 298, 15 K

SUSTÂNCIAS	CH ₄ (g)	O ₂ (g)	CO ₂ (g)	H ₂ O (g)
ENERGIAS	a.u (Hartree)	a.u (Hartree)	a.u (Hartree)	a.u (Hartree)
$\epsilon^\circ + H_{corr}$				
$\epsilon^\circ + G_{corr}$				
S°_m (*cal. K ⁻¹ . mol ⁻¹)				
S°_m (J . K ⁻¹ . mol ⁻¹)				

*1 cal equivale exatamente a 4,184 J.

Tabela 3. Cálculos das variações das energias termodinâmicas para a reação de combustão do metano a temperatura de 298, 15 K

VARIAÇÕES DE ENERGIAS	CH ₄ (g) + 2 O ₂ (g) → CO ₂ (g) + 2H ₂ O (g)
Entalpia da reação ($\Delta_r H^\circ$)	
Energia livre de Gibbs da reação ($\Delta_r G^\circ$)	
*Valor experimental do ΔH°_c para o CH ₄ (g)	- 890 kJ.mol ⁻¹

*(ATIKINS; JONES, 2012). Obs: 1 Hartree equivale aproximadamente a 627, 51 kcal.mol⁻¹.

Passo 3: Registrar as propriedades térmicas das moléculas para diferentes temperaturas.

I. Escolha uma molécula e realize o procedimento do passo 2 em diferentes temperaturas, alterando-se apenas o título e a palavra chave. Por exemplo: **Additional KeyWords > temperature=600**. Devendo-se utilizar os seguintes valores de temperaturas para a realização dos demais cálculos: 600 K, 900 K, 1200 K e 1500 K.



II. Os resultados para as energias em diferentes temperaturas devem ser registrados na Tabela 4:

Tabela 4. Cálculo da entalpia e entropia da molécula de _____ para diferentes temperaturas.

TEMPERATURA (K)	$\epsilon^\circ + H_{corr}$ (Hartree)	S (cal . mol ⁻¹ . K ⁻¹)
298		
600		
900		
1200		
1500		

Passo 4: Realizar os cálculos de entropia para as substâncias na Tabela 5 e registrar os seus valores.

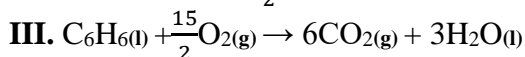
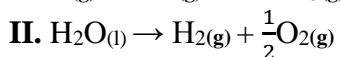
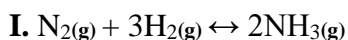
Tabela 5. Valores de entropias para algumas substâncias de diferentes estados físicos na temperatura de 298, 15 K

ESTADO FÍSICO	SÓLIDO	LÍQUIDO		GASOSO	
SUBSTÂNCIAS	SiO ₂	H ₂ O	C ₆ H ₆	H ₂	CO ₂
S ^o _m (cal. K ⁻¹ . mol ⁻¹)					
S ^o _m (J . K ⁻¹ . mol ⁻¹)					

Passo 5: Utilizar os dados para a construir gráficos de energias.

I. A partir dos dados registrados na Tabela 4, pode-se construir um gráfico de *Entalpia x Temperatura* e um de *Entropia x Temperatura*, utilizando o software *Origin ou Excel*. Adicionam-se as energias ao eixo y do gráfico e as temperaturas ao eixo x, plota no formato de linhas e salva.

Passo 6: A partir das moléculas disponíveis na Tabela 1 e com o uso dos softwares, execute os mesmos passos anteriores para as reações químicas a seguir:



APÊNDICE - I

Questionário III

01. O pacote computacional Gaussian 09W ao realizar cálculos computacionais resolve as equações matemáticas para os cálculos termoquímicos facilitando a obtenção de resultados sem ter que superar as limitações matemáticas. Qual a sua opinião a cerca dessa afirmação?

02. Após a realização dos cálculos pelo Gaussian 09W e análise do arquivo *output* para mais de uma temperatura a pressão constante, qual foi a relação observada com os valores de entropias a diferentes temperaturas? Justifique.

03. Após os cálculos, quais foram as interpretações a respeito dos valores de entropias encontrados para as diferentes substâncias líquidas e para diferentes substâncias gasosas da Tabela 5 do tutorial? Justifique.

04. De acordo com os valores encontrados para a entalpia de reação ($\Delta_r H^\circ$) e a energia livre de Gibbs de reação ($\Delta_r G^\circ$) na combustão do metano, o que se pode concluir a partir desses dados?

05. Ao relacionar os valores teóricos das energias obtidas com os valores experimentais para as substâncias a 298, 15 K, o que foi possível analisar?

06. A utilização de softwares como ferramenta de ensino na disciplina de Físico-Química I contribuiu para um melhor entendimento dos cálculos termodinâmicos? De que forma?
() SIM () SIM, PARCIALMENTE () NÃO () OUTRA: _____

07. Relate os pontos positivos e negativos da terceira aula prática sobre os cálculos termodinâmicos utilizando os softwares GaussView 5.0 e Gaussian 09W.

ESCALA DE LIKERT					
CT - Concordo Totalmente; C – Concordo; I – Indiferente; D – Discordo; DT - Discordo Totalmente					
1. As aulas práticas fizeram com que houvesse um melhor entendimento sobre o assunto.	CT	C	I	D	DT
2. Foi possível determinar a espontaneidade de uma reação a partir dos cálculos da energia livre de Gibbs da reação ($\Delta_r G^\circ$).	CT	C	I	D	DT
3. Os dados termodinâmicos teóricos obtidos se aproximaram dos valores experimentais para as substâncias a 298, 15 K.	CT	C	I	D	DT
4. Ficaram claras as relações estabelecidas entre os valores de entropias e as diferentes temperaturas.	CT	C	I	D	DT
5. Os softwares ajudaram a ampliar o campo de visão e o conhecimento a cerca das leis da termodinâmica.	CT	C	I	D	DT

APÊNDICE - J

Avaliação Diagnóstica IV

01. O MOPAC é um software livre de química quântica utilizado para a previsão de propriedades químicas e de modelagem de reações químicas. Quais são as suas versões?

02. Cite exemplos de interfaces gráficas de usuários para a versão MOPAC2016.

03. Qual(ais) método(s) são utilizados para a realização dos cálculos quânticos pelo software MOPAC2016?

04. Qual (ais) extensão(ões) deve(m) ser utilizada(s) para salvar os arquivos de entrada (*input*)?

05. Qual(ais) extensão(ões) deve(m) ser utilizada(s) para salvar os arquivos de saída (*output*)?

APÊNDICE - K

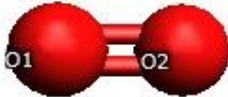

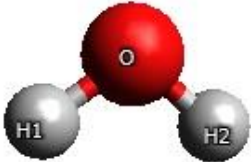
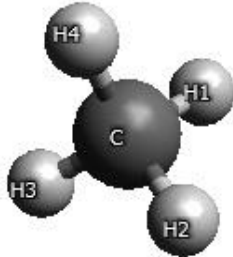
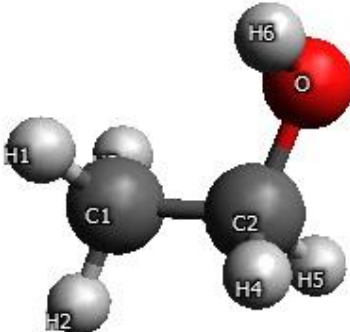
Tutorial IV

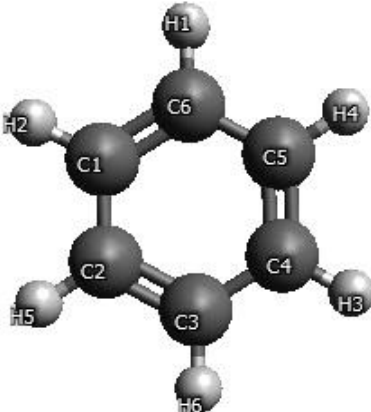
Avogadro e MOPAC2016

Objetivo: Calcular e analisar os parâmetros termodinâmicos e variações de entalpias em reações de combustão utilizando o pacote computacional MOPAC2016. Esse software é livre e encontra-se disponível na versão acadêmica no endereço eletrônico: http://openmopac.net/Download_MOPAC_Executable_Step2.html

Passo 1: Selecione na Tabela 1 e construa com o software Avogadro as moléculas que serão utilizadas nas Tabelas 2 e 3 desse tutorial.

Tabela 1. Relação das substâncias químicas com os nomes, fórmulas moleculares, modelos pau e bola e entalpias de formação a 298,15 K

Nome	Fórmula molecular	Modelo pau e bola*	Entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$)** kJ.mol ⁻¹
Gás oxigênio	O ₂		0
Dióxido de carbono	CO ₂		-393.51
Água	H ₂ O		-241.81
Metano	CH ₄		-74,60
Etanol	C ₂ H ₆ O		-234.80

Benzeno	C ₆ H ₆		82.93
---------	-------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------	-------

* Modelos moleculares construídos no Avogadro 1.1.1.

**Valores experimentais disponíveis em <http://cccbdb.nist.gov/introx.asp>.

Passo 2: Submeter aos cálculos termoquímicos ao MOPAC2016

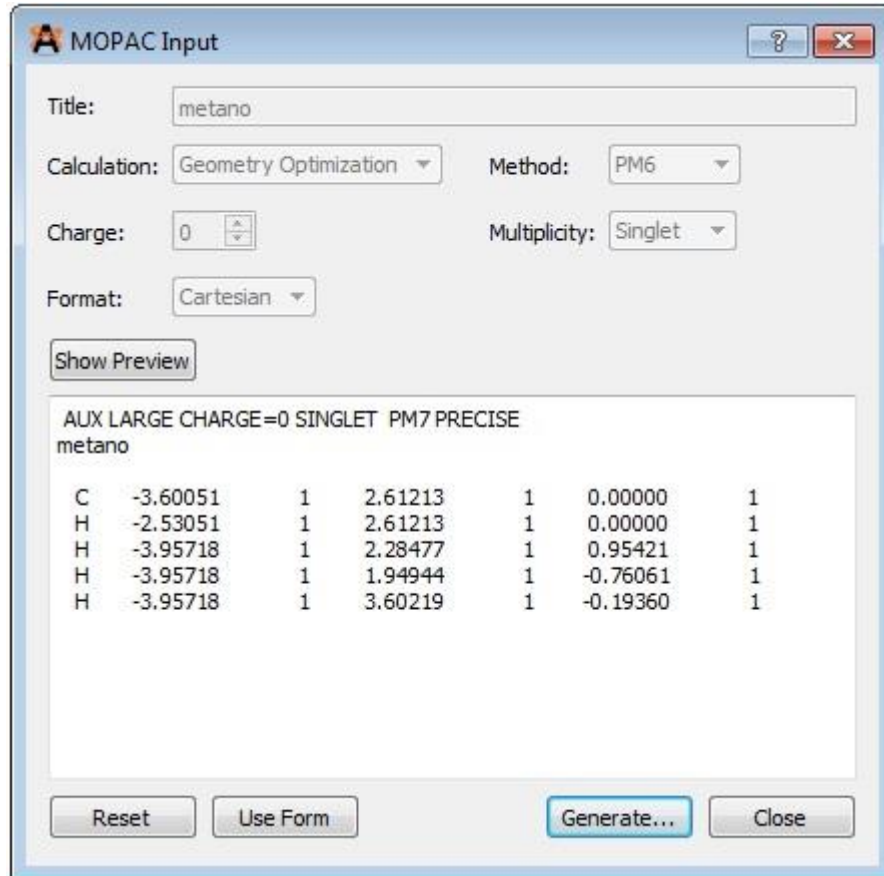
I. Após a construção da molécula é necessário submeter à estrutura aos cálculos de química quântica a fim de se obter os seguintes dados energéticos:

- Entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$)
- Energia total
- Energia eletrônica
- Potencial de ionização
- Entalpia da reação ($\Delta_r H^\circ$)
- Geometrias Otimizadas

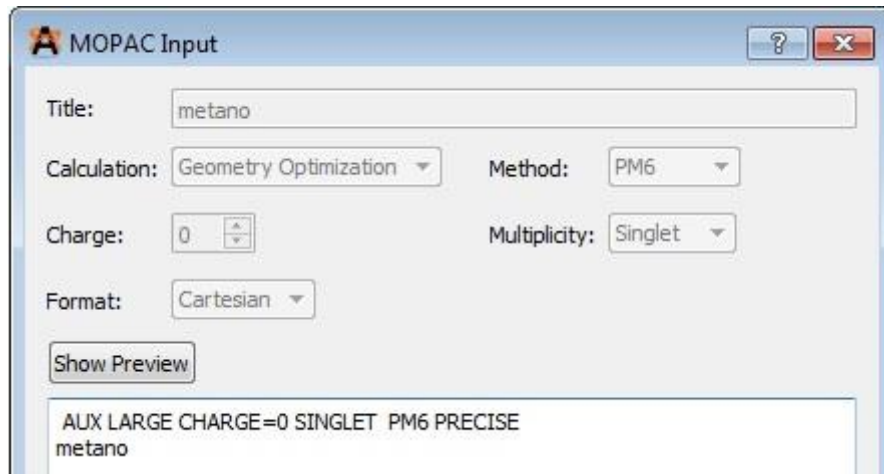
II. Após a construção das moléculas no Avogadro, deve-se otimizar a estrutura e em seguida direcionar-se para a barra de menus e clicar sobre a opção **Extensions > MOPAC**, assim uma nova janela surgirá e nela será preciso informar o tipo de cálculo, método, carga, multiplicidade, formato, título e palavras chave a serem utilizadas.

III. Na opção *Calculation* na janela *Input* do MOPAC será possível obter o *Single Point Energy*, *Geometry Optimization* e *Frequencies*. Usaremos os métodos Semi-Empírico (SE) PM6 e PM7.

- Deve-se adicionar o termo PM7 como palavra chave na caixa de visualização, já que não se encontra disponível dentre as opções de métodos do *software*. Ao adicionar a palavra PRECISE, aumenta em 100 vezes a precisão dos resultados. Todas as palavras-chave para o MOPAC2016 encontram-se disponíveis em <http://openmopac.net/Manual/index.html>



- Em seguida clica em **Generate > nome.mop > Salvar**
- Aviso:** Ao salvar os arquivos de entrada (*input*) deve-se utilizar a extensão (.mop)



- Em seguida clica em **Generate > nome.mop > Salvar**
- Passo 3:** Após o arquivo salvo, deve-se clicar duas vezes sobre o mesmo para que o cálculo seja realizado pelo MOPAC2016, o qual irá gerar três arquivos de saída (*output*) com as extensões (.out, .aux, .arc).
- Registrar e comparar os resultados para as entalpias de formação na Tabela 2 e calcular a variação de entalpia de combustão na Tabela 3:

Tabela 2. Valores de entalpias de formação para as moléculas calculadas pelo MOPAC2016 para diferentes métodos e seus valores experimentais a 298,15 K

SUSTÂNCIAS	CH ₄ (g)	O ₂ (g)	CO ₂ (g)	H ₂ O (g)
$\Delta_f H^\circ$ (kJ.mol ⁻¹) – PM6				
Tempo computacional (s)				
$\Delta_f H^\circ$ (kJ.mol ⁻¹) – PM7				
Tempo computacional (s)				

Tabela 3. Valores de variação de entalpia de combustão do metano calculados pelo MOPAC2016 para diferentes métodos e os valores experimentais a 298,15 K

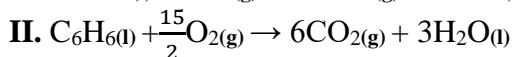
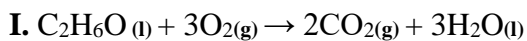
VARIAÇÕES DE ENTALPIA	CH ₄ (g) + 2 O ₂ (g) → CO ₂ (g) + 2H ₂ O (g)
$\Delta_r H^\circ$ (kJ.mol ⁻¹) – PM6	
$\Delta_r H^\circ$ (kJ.mol ⁻¹) – PM7	
*Valor experimental $\Delta_r H^\circ$ (kJ.mol ⁻¹)	- 890

*(ATIKINS; JONES, 2012).

Passo 4: Utilizar os dados para a construção de gráficos (*Excel, Origin, etc*) comparativos a partir dos resultados obtidos pelo *software* MOPAC2016 com os valores experimentais das substâncias disponíveis nos sites da *Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase (CCCBDB)* e *Nist WebBook Chemistry*.

I. Calcular e comparar os valores de entalpia de formação, energia total, energia eletrônica e potencial de ionização de compostos orgânicos para diferentes métodos semiempíricos.

Passo 5: A partir das moléculas disponíveis na Tabela 1 e com o uso dos *softwares*, execute todos os passos anteriores para as seguintes reações de combustão:



APÊNDICE - L

Questionário IV

01. O uso do software livre MOPAC2016 contribuiu para aprendizagem a cerca dos conteúdos de termodinâmica? De que forma?

02. Como futuro docente, você pretende aplicar softwares educacionais como ferramentas complementares ao ensino de química com os seus alunos? Justifique.

03. Ao relacionar os valores teóricos das energias obtidas com os valores experimentais para as substâncias a 288,15 K, o que foi possível analisar? Qual dos dois métodos mais se aproximou?

04. Qual a sua opinião a cerca da proposta de ensino em termodinâmica inserida no currículo da disciplina de Físico-Química I no curso de Licenciatura em Química? Justifique.

() Ótima () Boa () Razoável () Ruim () Péssima () Outra: _____

05. Relate os pontos positivos e negativos da aula prática sobre os cálculos termodinâmicos utilizando os softwares Avogadro e MOPAC2016.

ESCALA DE LIKERT

CT - Concordo Totalmente; C – Concordo; I – Indiferente;
D – Discordo; DT - Discordo Totalmente

1. A química computacional através do uso do software MOPAC2016 TM complementa o ensino de entalpia das reações.	CT	C	I	D	DT
2. Essa é uma boa metodologia a ser aplicada ao ensino-aprendizado de graduandos nos conteúdos de termodinâmica na disciplina de Físico-Química I	CT	C	I	D	DT
3. Os dados termodinâmicos teóricos obtidos aproximaram-se dos valores experimentais para as substâncias a 25°C.	CT	C	I	D	DT
4. O uso dos softwares químicos repassam aos computadores a função de realizar os cálculos, os quais são complicados e demorados se executados manualmente.	CT	C	I	D	DT
5. Em geral nos cálculos de Química computacional, percebe-se a necessidade de conhecimentos desenvolvidos de informática, mas com o auxílio do tutorial não tive dificuldades para executa-los.	CT	C	I	D	DT

6. Os cálculos de simulação sugeridos envolvem conhecimentos químicos para a sua execução, não apenas noções de informática.	CT	C	I	D	DT
7. O software MOPAC2016 TM utiliza princípios quânticos e termodinâmicos, além de um pouco de matemática bastante avançada. No entanto, o usuário não precisa estar proficiente com estes tópicos para utilizá-lo.	CT	C	I	D	DT
8. Foi possível relacionar a aula prática com os conteúdos trabalhados em sala de aula, servindo como uma revisão para o conteúdo de entalpia das reações.	CT	C	I	D	DT

APÊNDICE - M

ESCALA DE LIKERT CT - Concordo Totalmente; C – Concordo; I – Indiferente; D – Discordo; DT - Discordo Totalmente					
1. Os tutoriais facilitam no desenvolvimento das aulas práticas computacionais.	CT	C	I	D	DT
2. A execução dos tutoriais nas aulas práticas da disciplina colaborou para uma melhor fixação dos conteúdos trabalhados.	CT	C	I	D	DT
3. A inserção dos tutoriais e práticas computacionais no plano da disciplina de Físico-Química I contribui para a formação acadêmica dos discentes.	CT	C	I	D	DT
4. O uso dos tutoriais no Ensino de Química facilitam o processo de ensino e aprendizagem dos graduandos.	CT	C	I	D	DT
5. A utilização de tutorias associados aos softwares computacionais são ferramentas úteis na compreensão de conteúdos termodinâmicos.	CT	C	I	D	DT

ANEXO - A

PARECER CONSUBSTANCIADO DO CEP

DADOS DO PROJETO DE PESQUISA

Título da Pesquisa: Termodinâmica: uma proposta de ensino a partir da química computacional.

Pesquisador: FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA

Área Temática:

Versão: 1

CAAE: 49617315.3.0000.5209

Instituição Proponente: UNIVERSIDADE ESTADUAL DO PIAUÍ

Patrocinador Principal: Financiamento Próprio

DADOS DO PARECER

Número do Parecer: 1.256.569

Apresentação do Projeto:

Os pesquisadores têm sugerido várias abordagens pedagógicas aos estudantes por meio da explicação e investigação de fenômenos, processos e ideias abstratas, bem como o desenvolvimento da capacidade de representação em seus distintos níveis e auxiliado na competência representativa, onde nos últimos anos tem destacado o uso de simulações computacionais e de ferramentas de modelização. Essas ferramentas visuais (modelos concretos 3D, imagens estáticas e dinâmicas, simulações, animações, cálculos, softwares interativos, etc.) têm sido usadas frequentemente em diversos espaços de educação (formal e informal, pesquisa científica, etc). Partindo-se desse contexto o trabalho busca promover uma proposta de ensino para facilitar à compreensão dos estudantes a partir das dificuldades apresentadas nos assuntos de termodinâmica na disciplina de Físico-química I. Esta é uma pesquisa descritiva-explicativa, que terá como procedimento uma pesquisa de campo de cunho quantitativo, a ser realizada numa universidade pública do Piauí no período de janeiro a novembro de 2016, com uma amostra de 60 alunos entre 18 e 26 anos. Aplicará como instrumento de coleta de dados um questionário e uma entrevista. Após explicação dos objetivos e da metodologia do projeto, os sujeitos serão convidados para participarem da pesquisa. Como critério de inclusão os estudantes deverão estar matriculados, cursando a disciplina de Físico-Química I e disponíveis a participarem voluntariamente da pesquisa e o critério de exclusão volta-se para aqueles que não participarem de todas as etapas da pesquisa. Inicialmente serão levantadas as principais dificuldades na disciplina de termodinâmica, e em seguida serão construídos os tutoriais a partir das dificuldades identificadas na atividade diagnóstica e em sala de aula e logo depois aplicá-los as funcionalidades dos softwares Avogadro, Arguslab e do pacote computacional Gaussian 09 fazendo-se uma nova abordagem, como também instruí-los para a construção de moléculas, realização de cálculos e produção de gráficos e animações. A obtenção dos dados se dará através da aplicação de atividades diagnósticas, questionários mistos com questões objetivas e subjetivas e de gravações de entrevistas estruturadas, as quais serão transcritas na íntegra. Para a análise dos dados será adotado um estudo quanti-qualitativo decorrentes dos dados e informações presentes nos meios de coleta e em seguida aplicando-se um tratamento estatístico.

Objetivo da Pesquisa:

Objetivo Primário:

Investigar o desempenho dos estudantes acerca do ensino-aprendizagem da termodinâmica na disciplina de Físico-química I no curso de Licenciatura em Química.

Objetivo Secundário:

Promover uma proposta de ensino para facilitar à compreensão dos estudantes a partir das dificuldades apresentadas nos assuntos de termodinâmica na disciplina de Físico-química I utilizando-se tutoriais voltados a aplicação de softwares computacionais.

Avaliação dos Riscos e Benefícios:

Riscos:

Ao realizar investigações que envolvem seres humanos, os sujeitos estão suscetíveis a sofrer algum tipo de risco. Neste particularmente, o risco está na exposição dos dados produzidos à crítica de alguém externo ao processo, visto que o objeto de análise pode sofrer críticas depreciativas. Visando evitar esse risco será garantido o anonimato dos alunos envolvidos na pesquisa. Mesmo assim, caso sejam identificados e comprovados danos provenientes desta pesquisa, o aluno tem assegurado o direito à indenização por qualquer dano que venha a sofrer pela sua participação.

Benefícios:

O trabalho mostra-se de grande relevância acadêmica e social. Como está centralizado no ensino de química, contribui para transformar a prática docente dos professores do ensino superior, na medida em que apontará caminhos para adoção de uma prática contextualizada, o que favorecerá aos sujeitos da pesquisa, melhoria no seu desempenho acadêmico e nas necessidades diárias. Além disso, o estudo não acarretará nenhuma despesa para o sujeito participante.

Comentários e Considerações sobre a Pesquisa:

Pesquisa viável.

Considerações sobre os Termos de apresentação obrigatória:

Foram apresentados:

- Folha de Rosto preenchida, assinada, carimbada e datada.
- Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE) em linguagem clara e objetiva com todos os aspectos metodológicos a serem executados e/ou Termo de Assentimento;
- Carta de Anuência da Instituição Coparticipante em papel timbrado da instituição, carimbada, datada e assinada ou Declaração do Pesquisador Responsável;
- Link do Currículo Lattes do pesquisador responsável;
- Projeto de pesquisa na íntegra (word/pdf);

- Instrumento de coleta de dados (questionário/entrevista/formulário);

Recomendações:

Sem recomendações.

Conclusões ou Pendências e Lista de Inadequações:

De acordo com a análise, conforme a Resolução CNS/MS N°466/12 e seus complementares, o presente projeto de pesquisa apresenta o parecer APROVADO por se apresentar dentro das normas de eticidade vigentes.

Considerações Finais a critério do CEP:

Este parecer foi elaborado baseado nos documentos abaixo relacionados:

Tipo Documento	Arquivo	Postagem	Autor	Situação
Informações Básicas do Projeto	PB_INFORMAÇÕES_BÁSICAS_DO_PROJETO_588857.pdf	11/09/2015 16:00:01	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito
Outros	Entrevista.pdf	11/09/2015 15:52:19	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito
Outros	Questionario.pdf	11/09/2015 15:51:17	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito
Recurso Anexado pelo Pesquisador	AtividaDeDiagnostica.pdf	11/09/2015 15:48:18	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito
Declaração de Instituição e Infraestrutura	Declaracao.pdf	11/09/2015 15:47:06	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito
Projeto Detalhado / Brochura Investigador	ProjetoComiteDeEtica.pdf	11/09/2015 15:44:03	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito
TCLE / Termos de Assentimento /	TCLE.pdf	11/09/2015 15:42:15	FRANCISCO DAS CHAGAS	Aceito

Justificativa de Ausência			ALVES LIMA	
Folha de Rosto	FolhaDeRosto.pdf	11/09/2015 15:41:37	FRANCISCO DAS CHAGAS ALVES LIMA	Aceito

Situação do Parecer:

Aprovado

Necessita Apreciação da CONEP:

Não

TERESINA, 02 de Outubro de 2015.

Assinado por:
LUCIANA SARAIVA E SILVA
(Coordenador)

ANEXO - B

Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE)

Prezado participante, você está sendo convidado (a) para participar da pesquisa intitulada “**Termodinâmica: uma proposta de ensino a partir da química computacional**” desenvolvida por **Ézio Raul Alves de Sá** da Universidade Federal do Piauí, sob orientação do professor **Dr. Francisco das Chagas Alves Lima**. O objetivo central deste estudo é promover uma proposta de ensino para facilitar a compreensão dos estudantes a partir das dificuldades apresentadas nos assuntos de termodinâmica da disciplina de Físico-Química I utilizando-se tutoriais voltados a aplicação de softwares computacionais.

Quanto aos procedimentos, trata-se de uma pesquisa de campo que será realizada com 40 alunos do 5º período do curso de Licenciatura em Química de uma Universidade Pública do Piauí, em Teresina-PI, com idades igual ou acima de 18 anos, os quais deverão estar matriculados e cursando a disciplina de Físico-Química I. Em seguida, o pesquisador esclarecerá os objetivos e a importância da pesquisa, solicitando a participação dos alunos de forma voluntária e a esses deixando clara a livre desistência da pesquisa a qualquer momento. Em toda investigação que envolve seres humanos os sujeitos estão suscetíveis a sofrer algum tipo de risco. **Os riscos estarão na participação dos sujeitos da pesquisa, na assinatura do termo de compromisso e na exposição dos dados produzidos à crítica de alguém alheio ao processo, visto que o objeto de análise pode sofrer críticas depreciativas.** Visando evitar esse risco será garantido o anonimato dos alunos envolvidos na pesquisa. Mesmo assim, caso sejam identificados e comprovados danos provenientes desta pesquisa, o aluno tem assegurado o direito à indenização por qualquer dano que venha a sofrer pela sua participação. **Os benefícios nessa ferramenta metodológica mostram-se de grande relevância acadêmica e social. Como está centralizado no ensino de química, contribui para transformar a prática docente dos professores do ensino superior, na medida em que apontará caminhos para adoção de uma prática contextualizada, o que favorecerá aos sujeitos da pesquisa, melhoria no seu desempenho acadêmico e nas necessidades do dia a dia. Além de tudo isso, o estudo não acarretará nenhuma despesa para o sujeito participante.**

Na possível publicação dos resultados desta pesquisa, sua identidade será mantida no mais rigoroso sigilo. Serão omitidas todas as informações que permitem identifica-lo (a). Mesmo não tendo benefícios diretos em participar, indiretamente você

estará contribuindo para a compreensão do fenômeno estudo e para a produção de conhecimento científico e prático do ensino aprendizagem.

Teresina, _____ de _____ de _____.

Assinatura do pesquisador(a) responsável
Centro de Ciências Natureza (CCN)-UESPI
Departamento de Química

Assinatura do participante da pesquisa ou
Responsável legal

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO PIAUÍ – COMITÊ DE ÉTICA EM PESQUISA

Endereço: Rua Olavo Bilac, 2335

Bairro: Centro/Sul

CEP: 64.001-280

TERESINA/PI

ANEXO - C

INPUT e OUTPUT do <i>software</i> Gaussian 09W para o cálculo e obtenção das propriedades termodinâmicas do gás carbônico (CO₂) nas condições padrão

➤ **INPUT (.gjf)**

```
%chk=C:\Users\Ézio\Desktop\DADOS\gascarbonico.chk
# opt freq hf/3-21g guess=save geom=connectivity
```

```
gascarbonico
```

```
0 1
C      -0.37084399  1.13810740  0.00000000
O       0.88755601  1.13810740  0.00000000
O      -1.62924399  1.13810740  0.00000000
```

```
1 2 2.0 3 2.0
2
3
```

➤ **OUTPUT (.out ou .log)**

```
-----
- Thermochemistry -
-----
```

```
Temperature 298.150 Kelvin. Pressure 1.00000 Atm.
```

```
Atom 1 has atomic number 6 and mass 12.00000
```

```
Atom 2 has atomic number 8 and mass 15.99491
```

```
Atom 3 has atomic number 8 and mass 15.99491
```

```
Molecular mass: 43.98983 amu.
```

```
Principal axes and moments of inertia in atomic units:
```

	1	2	3
Eigenvalues --	0.00000	152.59469	152.59469
X	0.00000	1.00000	0.00000
Y	0.00000	0.00000	1.00000
Z	1.00000	0.00000	0.00000

```
This molecule is a prolate symmetric top.
```

```
Rotational symmetry number 2.
```

```
Rotational temperature (Kelvin) 0.56761
```

```
Rotational constant (GHZ): 11.827025
```

```
Zero-point vibrational energy 31157.6 (Joules/Mol)
```

```
7.44684 (Kcal/Mol)
```

```
Vibrational temperatures: 948.16 948.16 2054.03 3544.43
(Kelvin)
```

```
Zero-point correction= 0.011867 (Hartree/Particle)
```

Thermal correction to Energy= 0.014495
 Thermal correction to Enthalpy= 0.015439
 Thermal correction to Gibbs Free Energy= -0.008822
 Sum of electronic and zero-point Energies= -186.549390
 Sum of electronic and thermal Energies= -186.546763
 Sum of electronic and thermal Enthalpies= -186.545818
 Sum of electronic and thermal Free Energies= -186.570079

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	9.096	6.886	51.061
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	37.270
Rotational	0.592	1.987	13.057
Vibrational	7.615	1.918	0.733

	Q	Log10(Q)	Ln(Q)
Total Bot	0.114185D+05	4.057610	9.342992
Total V=0	0.328227D+10	9.516174	21.911800
Vib (Bot)	0.379113D-05	-5.421231	-12.482845
Vib (V=0)	0.108977D+01	0.037333	0.085963
Electronic	0.100000D+01	0.000000	0.000000
Translational	0.114679D+08	7.059484	16.255062
Rotational	0.262638D+03	2.419357	5.570776

***** Axes restored to original set *****

Center Number	Atomic Number	Forces (Hartrees/Bohr)		
		X	Y	Z
1	6	0.000000000	0.000000000	0.000000000
2	8	0.000016694	0.000000000	0.000000000
3	8	-0.000016694	0.000000000	0.000000000

Cartesian Forces: Max 0.000016694 RMS 0.000007869

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad
 Berny optimization.

Internal Forces: Max 0.000016694 RMS 0.000011804

Search for a local minimum.

Step number 1 out of a maximum of 2

All quantities printed in internal units (Hartrees-Bohrs-Radians)

Second derivative matrix not updated -- analytic derivatives used.

The second derivative matrix:

	R1	R2	A1	A2
R1	1.11788			
R2	0.11579	1.11788		
A1	0.00000	0.00000	0.17105	
A2	0.00000	0.00000	0.00000	0.17105

Eigenvalues --- 0.17105 0.17105 1.00210 1.23367

Angle between quadratic step and forces= 0.00 degrees.

Linear search not attempted -- first point.

Iteration 1 RMS(Cart)= 0.00000957 RMS(Int)= 0.00000000

Iteration 2 RMS(Cart)= 0.00000000 RMS(Int)= 0.00000000

ClnCor: largest displacement from symmetrization is 1.95D-14 for atom 1.

Variable	Old X	-DE/DX	Delta X (Linear)	Delta X (Quad)	Delta X (Total)	New X
R1	2.18406	0.00002	0.00000	0.00001	0.00001	2.18407
R2	2.18406	0.00002	0.00000	0.00001	0.00001	2.18407
A1	3.14159	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	3.14159
A2	3.14159	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	3.14159

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000017	0.000450	YES
RMS Force	0.000012	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.000014	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000010	0.001200	YES

Predicted change in Energy=-2.258946D-10

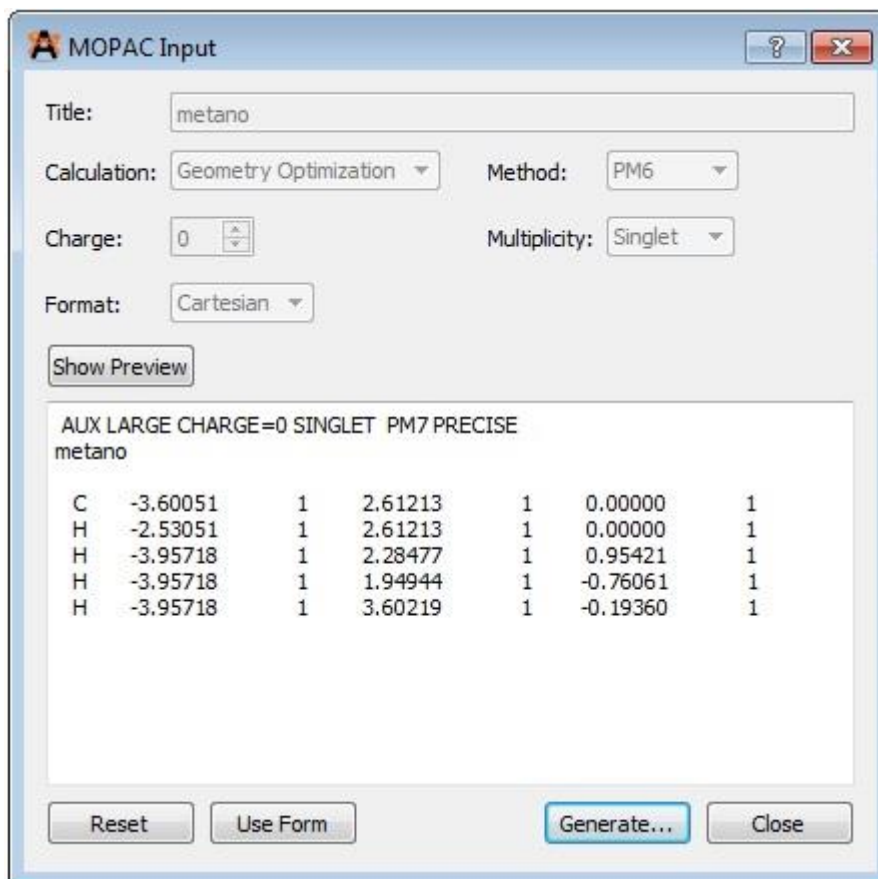
Optimization completed.

-- Stationary point found.

ANEXO - D

INPUT e OUTPUT do *software* MOPAC2016 para o cálculo e obtenção das propriedades termodinâmicas do gás metano (CH₄) nas condições padrão

➤ INPUT (.mop)



➤ OUTPUT (.arc)

SUMMARY OF PM7 CALCULATION, Site No: 25374

MOPAC2016 (Version: 16.175W)
Wed Sep 14 14:03:33 2016
No. of days remaining = 283

Empirical Formula: C H₄ = 5 atoms

AUX LARGE CHARGE=0 SINGLET PM7
METANO

GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).
SCF FIELD WAS ACHIEVED

HEAT OF FORMATION = -14.40297 KCAL/MOL = -60.26204 KJ/MOL
 TOTAL ENERGY = -177.04317 EV
 ELECTRONIC ENERGY = -390.53958 EV
 CORE-CORE REPULSION = 213.49641 EV
 GRADIENT NORM = 0.97382
 DIPOLE = 0.00699 DEBYE POINT GROUP: C1
 NO. OF FILLED LEVELS = 4
 IONIZATION POTENTIAL = 13.717368 EV
 HOMO LUMO ENERGIES (EV) = -13.717 5.907
 MOLECULAR WEIGHT = 16.0426
 COSMO AREA = 54.81 SQUARE ANGSTROMS
 COSMO VOLUME = 37.12 CUBIC ANGSTROMS

MOLECULAR DIMENSIONS (Angstroms)

Atom	Atom	Distance
H 5	H 3	1.77354
H 4	H 2	1.77082
H 2	H 3	1.25230
SCF CALCULATIONS	=	9
WALL-CLOCK TIME	=	0.086 SECONDS
COMPUTATION TIME	=	0.047 SECONDS

FINAL GEOMETRY OBTAINED
 AUX LARGE CHARGE=0 SINGLET PM7
 METANO

C	-3.08337159 +1	2.63805321 +1	0.00006717 +1
H	-1.99813719 +1	2.63822830 +1	-0.00055596 +1
H	-3.44305225 +1	3.48898534 +1	0.56926834 +1
H	-3.44308326 +1	1.72036036 +1	0.45271319 +1
H	-3.44235591 +1	2.70513655 +1	-1.02164744 +1