

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

INSTITUTO DE QUÍMICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO

JOÃO RIBEIRO FRANCO NETO

**TECNOLOGIAS NO ENSINO DE GEOMETRIA MOLECULAR**

Uberlândia  
2007



JOÃO RIBEIRO FRANCO NETO

## **TECNOLOGIAS NO ENSINO DE GEOMETRIA MOLECULAR**

Dissertação apresentada à Banca examinadora do Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Química.

Orientadora: Prof. Dra. Rejane Maria Ghisolfi da Silva

Uberlândia  
2007

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

---

F825t Franco Neto, João Ribeiro, 1962-  
Tecnologias no ensino de geometria molecular / João Ribeiro Franco  
Neto. - 2007.  
122 f. : il.

Orientador: Rejane Maria Ghisolfi da Silva

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Química.  
Inclui bibliografia.

1. Química - Estudo e ensino - Teses. 2. Ensino médio - Teses. I. Silva, Rejane Maria Ghisolfi da. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Química. III. Título.

CDU: 54:37



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
Instituto de Química  
Programa de Pós Graduação em Química- MESTRADO  
E-mail: [cpqquimica@ufu.br](mailto:cpqquimica@ufu.br) - Fone: 3239-4385

**ALUNO(A): JOÃO RIBEIRO FRANCO NETO**

**NÚMERO DE MATRÍCULA: 5052406**

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: QUÍMICA**

**PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA: NÍVEL MESTRADO**

**TÍTULO DA DISSERTAÇÃO:**

***“Tecnologias no Ensino de Geometria Molecular”***

**ORIENTADOR:**

**PROFª DRA. REJANE MARIA GHISOLFI DA SILVA**

A Dissertação foi **APROVADA** em apresentação pública realizada na Sala 1B 204 no Campus Santa Mônica, no dia 17 de agosto de 2007, às 08h30 horas, tendo como Banca Examinadora:

**NOME:**

**ASSINATURA:**

Profª Dra. Rejane Maria Ghisolfi da Silva

(Instituto de Química / UFU)

Prof. Dr. Arlindo José de Souza Júnior

(Faculdade de Matemática / UFU)

Profª Dra. Irene Cristina de Mello

(UFMT)

Uberlândia, 17 de agosto de 2007.



*Dedico esse trabalho à minha mãe, Mariana Ribeiro Franco Parreira e, postumamente, ao meu pai, Valteno Martins Parreira, que, pelos seus exemplos de vida, me ensinaram a enfrentar os desafios de cabeça erguida, não deixando que derrotas fossem causas de desistência, e sim um incentivo a mais para continuar lutando.*

*Dedico também a minha esposa Maria José Martins Soares, que foi minha razão em muitos sentidos, principalmente me ajudando a entender os meus caminhos, a perceber meus limites e a buscar sempre uma evolução.*

*Aos meus filhos, Thaís, Laís e Rafael, pela imensurável paciência e compreensão durante o período em que estive ocupado na realização deste trabalho.*

*Aos meus irmãos, Walteno e Vânia, pelo incentivo, pelo apoio, e principalmente pelo amor demonstrado durante toda minha vida.*

*Aos meus sobrinhos, Frederico, Verônica, Fernanda, Vanessa e Nayara, pela ausência nesse período.*

*Ao Link, companheiro inseparável nos momentos solitários de divagações durante este trabalho.*



## AGRADECIMENTOS

*A elaboração e a conclusão desta dissertação só foram possíveis com a colaboração e o auxílio de várias pessoas. Não poderia então terminá-lo sem lhes manifestar a minha mais sincera gratidão. Correndo o risco de, injustamente, omitir alguém, agradeço:*

*Primeiramente a Deus, por ter-nos dado o dom da inteligência e a coragem da perseverança.*

*À minha orientadora, Doutora Rejane Maria Ghisolfi da Silva, pela disponibilidade manifestada, pelo apoio e pelo incentivo prestados durante a elaboração da presente dissertação. A sua orientação foi fundamental na consecução do trabalho. Gostaria de lhe agradecer também pelas palavras de incentivo e compreensão, que permitiram que eu acreditasse cada vez mais na conclusão deste estudo.*

*Aos professores doutores Arlindo José de Souza Junior e Sandra Terezinha de Farias Furtado, que participaram do meu Exame de Qualificação e colaboraram para o aperfeiçoamento desta dissertação.*

*Aos colegas do mestrado: Juliano Soares Pinheiro e José Gonçalves Teixeira Júnior, pela acolhida e pela troca intensa de conhecimentos, pelas reflexões sobre as nossas ansiedades e esperanças sobre a Educação Química.*

*Às Irmãs da Congregação de São Carlos Borromeo Scalabrinianas: Umbelina, Madalena, Kelisane e Vicentina, pelo apoio e a disponibilidade em todos os momentos deste trabalho.*

*Aos colegas da E. E. Cel. Tônico Franco, que souberam entender a minha ausência em certos momentos.*

*À Pedagoga Ilza Moraes de Carvalho, pela amizade, compreensão e sabedoria de uma grande administradora.*

*À amiga Teresa Cristina Nascimento, pela revisão deste trabalho e pela amizade duradoura.*

*À amiga Marlise B. Moreira, pelo apoio, amizade e contribuições.*

*À colega Carmem Fabíola O. de Queiroz, pelos momentos vividos de incerteza no início do trabalho e a sólida amizade que daí acabou resultando.*



*Antes de nos atrevermos a censurar ou recomendar formas de uso, na sala de aula, de uma tecnologia decididamente incrustada na sociedade, devemos ser moderados e reconhecer que é necessário investigar o que ali se passa, com a única certeza de que buscamos respostas para perguntas que possam nos lançar para além da atmosfera conservadora que caracteriza os momentos de ruptura paradigmática.*

*Marcelo Giordan*



## RESUMO

Este estudo teve como objetivo investigar a utilização de diferentes tecnologias no ensino de Geometria Molecular e, fundamentalmente, identificar se o *software ChemSketch*<sup>®</sup> potencia ou desfavorece a elaboração de modelos mais adequados de estruturas químicas. Para subsidiar este trabalho, recorreu-se à pesquisa qualitativa, que se consolidou em um estudo de caso. O estudo de caso foi o método de procedimento adotado, voltado para uma turma de 28 alunos da 2ª série do Ensino Médio, de uma escola particular, do estado de Minas Gerais. Os alunos tiveram oportunidade de vivenciar diferentes situações de ensino de Química, com tecnologias, e também de avaliar sobre seus aspectos relacionados à aprendizagem em Química. Os dados foram coletados por meio de questionários; gravações, em áudio e vídeo das atividades; elaboração de um planejamento das atividades de Química, envolvendo as tecnologias: quadro e giz, bolas de isopor e varetas e o *software ChemSketch*<sup>®</sup>. As análises foram feitas segundo duas perspectivas: (i) avaliação dos alunos a respeito da utilização de tais tecnologias e (ii) observações e registros realizados nos ambientes de aprendizagem. A partir dessas análises, é possível perceber que o desenvolvimento das atividades de forma combinada entre tecnologias favorece a aprendizagem para os educandos, visto que, desse modo, eles constroem as estruturas de forma mais adequada. Embora o *software* proporcionasse uma visualização melhor das estruturas das moléculas, os alunos não obtiveram um desempenho satisfatório, o que sugere que, na utilização do computador, o professor desempenha um papel fundamental.

**Palavras-chave:** Tecnologias, Química, Geometria Molecular



## ABSTRACT

This study had as a principal aim, to investigate the use of different technologies in teaching Molecular Geometry and fundamentally, identify if the *software ChemSketch*<sup>®</sup> empowers or opposes the elaboration of more adequate models of chemical structures. To subsidize this study, it was needed to appeal to the quality research which resulted in a study of case. The study of the case was the procedure method which was adopted, aiming a 2<sup>nd</sup> high school class of 28 students, in a private school in the state of Minas Gerais. The students had the opportunity to deal with different situations while being taught chemistry with the use of technologies, and also to assess the aspects related to learning chemistry. The data was collected through questionnaires; recording of audio and video activities and the elaboration of a planning of the chemistry activities which involved the technology of blackboard and chalk, the technology of using isopor *Balls* and *Sticks* and the *software ChemSketch*<sup>®</sup>. The analyses were made following 2 perspectives: the evolution of the students due to the use of each of the technologies and the observations and registrations made in the learning environments. Regarding the analyses of the questionnaires, and the observations and registrations in the learning environments it was possible to realize that the development of the activities in a balanced way among the technologies supports the learning to students, due to the fact that it built the structures in a more adequate way. Although the *software* provided a better view of the molecules structures, the students did not come to a satisfactory performance, which suggests that in the use of the computer, the teacher performs a fundamental role.

**Keywords:** Technologies, Chemistry, Molecular Geometry



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

|                                                                                                                                |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1 – Microcomputador TK-82C .....                                                                                        | 19 |
| Figura 2 – Hierarquia para representar uma molécula. Gasteiger (2003).....                                                     | 28 |
| Figura 3 – Modelo <i>Sticks</i> do benzeno .....                                                                               | 29 |
| Figura 4 – Modelo <i>Balls e Sticks</i> do benzeno.....                                                                        | 29 |
| Figura 5 – Modelo <i>Spacefill</i> do benzeno .....                                                                            | 30 |
| Figura 6 – Fórmula estrutural completa do benzeno .....                                                                        | 30 |
| Figura 7 – Fórmula estrutural condensada do benzeno.....                                                                       | 31 |
| Figura 8 – Tela do <i>BKchem</i> ® .....                                                                                       | 32 |
| Figura 9 – <i>ChemDraw</i> ® .....                                                                                             | 32 |
| Figura 10 – <i>HyperChem 7</i> ® .....                                                                                         | 34 |
| Figura 11 – Tela do <i>HyperChem</i> ® .....                                                                                   | 35 |
| Figura 12 – Tela do <i>HyperChem Lite</i> ® .....                                                                              | 36 |
| Figura 13 – <i>Pocket HyperChem</i> ® .....                                                                                    | 37 |
| Figura 14 – <i>Isis Draw</i> ® .....                                                                                           | 38 |
| Figura 15 – Tela do <i>ChemWindow</i> ® versão 6.0.....                                                                        | 39 |
| Figura 16 – Tela do <i>AIM 2000</i> ® .....                                                                                    | 40 |
| Figura 17 – Tela do <i>Chem 4-D</i> ® .....                                                                                    | 41 |
| Figura 18 – <i>ChemSketch</i> ® - construindo a estrutura do 2-metil-1,3,5-trinitrobenzeno (TNT).....                          | 42 |
| Figura 19 - Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação Wireframe do TrinitroTolueno.....                             | 43 |
| Figura 20 - Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>Sticks</i> do TrinitroTolueno .....                        | 43 |
| Figura 21 - Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>Balls &amp; Sticks</i> do TrinitroTolueno.....             | 44 |
| Figura 22 -Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>Spacefill</i> do TrinitroTolueno .....                      | 44 |
| Figura 23 -Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>Dots Only</i> do TrinitroTolueno .....                      | 44 |
| Figura 24 - Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>Disks</i> do TrinitroTolueno .....                         | 45 |
| Figura 25 - Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>With Dots</i> do TrinitroTolueno.....                      | 45 |
| Figura 26 - Visualização do <i>ACD/3D Viewer</i> – Representação <i>With Dots e Balls &amp; Sticks</i> do TrinitroTolueno..... | 46 |
| Figura 27 – Sequência de rotação da molécula do TrinitroTolueno .....                                                          | 46 |
| Figura 28 – Metano – CH <sub>4</sub> .....                                                                                     | 52 |
| Figura 29 – Hexafluoreto de enxofre – SF <sub>6</sub> .....                                                                    | 52 |
| Figura 30 – Pentacloreto de fósforo– PCl <sub>5</sub> .....                                                                    | 53 |
| Figura 31 – água – H <sub>2</sub> O .....                                                                                      | 53 |
| Figura 32 – amônia – NH <sub>3</sub> .....                                                                                     | 54 |

|                                                                                                               |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 33 – Cloreto de berílio – $\text{BeCl}_2$ .....                                                        | 54  |
| Figura 34 – Trifluoreto de boro– $\text{BF}_3$ .....                                                          | 54  |
| Figura 35 – Eteno – $\text{C}_2\text{H}_4$ .....                                                              | 55  |
| Figura 36 – Estudo de caso – Adaptado de Lüdke e André (1986).....                                            | 57  |
| Figura 37 – Imagem da atividade com bolas de isopor.....                                                      | 58  |
| Figura 38 – Tela inicial do ScreenCam® .....                                                                  | 59  |
| Figura 39 – ScreenCam® em funcionamento .....                                                                 | 60  |
| Figura 40 – Alunos no início da atividade.....                                                                | 69  |
| Figura 41 – Material utilizado na pesquisa com bolas de isopor e varetas de madeira.....                      | 72  |
| Figura 42 – Alunos desenvolvendo a atividade com bolas de isopor .....                                        | 74  |
| Figura 43 – Durante a atividade no laboratório de tecnologia educacional .....                                | 76  |
| Figura 44 – Atividade sendo desenvolvida no laboratório de tecnologia educacional.....                        | 78  |
| Figura 45 – Pesquisa sendo desenvolvida com a utilização do <i>software ChemSketch</i> ®.....                 | 82  |
| Figura 46 – Área de trabalho .....                                                                            | 93  |
| Figura 47 – Dificuldade em salvar o trabalho .....                                                            | 93  |
| Figura 48 – Dificuldade em localizar a pasta de trabalho.....                                                 | 94  |
| Figura 49 – Tentando abrir mais de uma tabela periódica.....                                                  | 95  |
| Figura 50 – Criando mais de um composto na mesma área de trabalho .....                                       | 95  |
| Figura 51 – Abria a área de trabalho e não construía nenhum composto. ....                                    | 96  |
| Figura 52 – Tentava visualizar a estrutura mas não havia construído nenhuma .....                             | 96  |
| Figura 53 – Estruturas criadas que não existiam no trabalho proposto. ....                                    | 97  |
| Figura 54 – Estrutura espacial que não apresentava os átomos de hidrogênio existentes no composto. ....       | 97  |
| Figura 55 – Estrutura espacial que não apresentava os átomos de hidrogênio.....                               | 98  |
| Figura 56 – Estrutura espacial no <i>ACD/3D Viewer</i> que ocultava os átomos de hidrogênio. ....             | 98  |
| Figura 57 – Montagem inadequada para o composto $\text{SF}_6$ .....                                           | 99  |
| Figura 58 – Montagem com 2 fragmentos de compostos .....                                                      | 100 |
| Figura 59 – Montagem de fórmula completamente diferente da solicitada.....                                    | 100 |
| Figura 60 – Erro ao executar o <i>software</i> para construir uma molécula de gás ozônio - $\text{O}_3$ ..... | 100 |
| Figura 61 – Estrutura espacial do trióxido de enxofre - $\text{SO}_3$ .....                                   | 101 |
| Figura 62 – Estrutura espacial do dióxido de enxofre - $\text{SO}_2$ .....                                    | 101 |
| Figura 63 – Utilização da tabela periódica durante a atividade proposta.....                                  | 102 |
| Figura 64 – Montagem de acordo com o modelo VSEPR para o $\text{SF}_6$ .....                                  | 102 |
| Figura 65 – Montagem de acordo com o modelo VSEPR para o $\text{PCl}_5$ .....                                 | 103 |
| Figura 66 – Montagem de acordo com o modelo VSEPR para o $\text{COCl}_2$ .....                                | 103 |
| Figura 67 – $\text{PCl}_3$ segundo o aluno 7 (grupo D) na.....                                                | 110 |
| Figura 68 – $\text{COCl}_2$ segundo o aluno 7 (grupo D) na tecnologia quadro e giz .....                      | 111 |
| Figura 69 – $\text{CS}_2$ segundo o aluno 4 (grupo D) na tecnologia quadro e giz .....                        | 111 |
| Figura 70 – Estrutura do $\text{PCl}_5$ construída pelo participante 4 (grupo C) com bola de Isopor.....      | 114 |
| Figura 71 – Estrutura do $\text{PCl}_5$ construída pelo participante 1 (grupo C) com bola de Isopor.....      | 114 |

|                                                                                                           |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 72 – Estrutura do $\text{CCl}_4$ construída pelo participante 5 (grupo C) com bola de Isopor. .... | 115 |
| Figura 73 – Estrutura do $\text{CCl}_4$ construída pelo participante 6 (grupo B) com bola de Isopor.....  | 115 |
| Figura 74 – Estrutura do $\text{PCl}_3$ construída por um aluno (grupo B) com bola de Isopor .....        | 116 |

## LISTA DE GRÁFICOS

|                                                                                                       |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Gráfico 1 – Distribuição da amostra por gênero .....                                                  | 62  |
| Gráfico 2 – Atividade principal durante a semana .....                                                | 63  |
| Gráfico 3 – Atividade principal no final de semana.....                                               | 63  |
| Gráfico 4 – Conclusão do ensino fundamental.....                                                      | 64  |
| Gráfico 5 – Dificuldade em relação à utilização do <i>software</i> .....                              | 84  |
| Gráfico 6 – Execução das propostas na ordem solicitada .....                                          | 85  |
| Gráfico 7 – Análise dos ângulos durante a atividade.....                                              | 85  |
| Gráfico 8 – A utilização do <i>software</i> auxilia no entendimento de geometria molecular? .....     | 86  |
| Gráfico 9 – A utilização do <i>software</i> ajuda a compreender e executar melhor as tarefas? .....   | 86  |
| Gráfico 10 – Auto-avaliação do CS <sub>2</sub> na visão do <i>software</i> .....                      | 87  |
| Gráfico 11 – Auto-avaliação do SF <sub>6</sub> na visão do <i>software</i> .....                      | 87  |
| Gráfico 12 – Auto-avaliação do F <sub>2</sub> na visão do <i>software</i> .....                       | 88  |
| Gráfico 13 – Auto-avaliação do CCl <sub>4</sub> na visão do <i>software</i> .....                     | 88  |
| Gráfico 14 – Auto-avaliação do HCN na visão do <i>software</i> .....                                  | 89  |
| Gráfico 15 – Auto-avaliação do COCl <sub>2</sub> na visão do <i>software</i> .....                    | 89  |
| Gráfico 16 – Auto-avaliação do SO <sub>2</sub> na visão do <i>software</i> .....                      | 90  |
| Gráfico 17 – Auto-avaliação do SO <sub>3</sub> na visão do <i>software</i> .....                      | 90  |
| Gráfico 18 – Auto-avaliação do ClBr na visão do <i>software</i> .....                                 | 91  |
| Gráfico 19 – Auto-avaliação do PCl <sub>3</sub> na visão do <i>software</i> .....                     | 91  |
| Gráfico 20 – Auto-avaliação do PCl <sub>5</sub> na visão do <i>software</i> .....                     | 92  |
| Gráfico 21– Opção “foi fácil” nos grupos D e A na pesquisa quadro e giz.....                          | 104 |
| Gráfico 22 – Auto-avaliação do composto CS <sub>2</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz ..... | 105 |
| Gráfico 23 – Auto-avaliação do SF <sub>6</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz .....          | 105 |
| Gráfico 24 – Auto-avaliação do F <sub>2</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz .....           | 106 |
| Gráfico 25 – Auto-avaliação do CCl <sub>4</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz.....          | 106 |
| Gráfico 26 – Auto-avaliação do HCN pelos alunos na tecnologia quadro e giz .....                      | 107 |
| Gráfico 27 – Auto-avaliação do SO <sub>2</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz .....          | 107 |
| Gráfico 28 – Auto-avaliação do SO <sub>3</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz .....          | 108 |
| Gráfico 29 – Auto-avaliação do ClBr pelos alunos na tecnologia quadro e giz.....                      | 108 |
| Gráfico 30 – Auto-avaliação do PCl <sub>3</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz.....          | 109 |
| Gráfico 31 – Auto-avaliação do PCl <sub>5</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz.....          | 109 |
| Gráfico 32 – Auto-avaliação do COCl <sub>2</sub> pelos alunos na tecnologia quadro e giz.....         | 110 |
| Gráfico 33 – Opção “foi fácil” nos grupos B e C na pesquisa com bola de isopor .....                  | 113 |

## LISTA DE QUADROS

|                                                                                   |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------|----|
| Quadro 1 – Tipo de geometria dos pares de elétrons e a geometria da molécula..... | 49 |
| Quadro 2 – Programação das atividades da pesquisa .....                           | 57 |
| Quadro 3 – A ordem de aplicação dos episódios de ensino .....                     | 67 |

## LISTA DE TABELAS

|                                                                                                      |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tabela 1 – Distribuição etária dos alunos em função do gênero (N=28) .....                           | 62  |
| Tabela 2 – Utilização do computador (N=28) .....                                                     | 62  |
| Tabela 3 – A Química no dia-a-dia dos alunos (N=28) .....                                            | 64  |
| Tabela 4 – Atividade com quadro e giz - grupo A.....                                                 | 69  |
| Tabela 5 – Atividade com quadro e giz - grupo D.....                                                 | 71  |
| Tabela 6 – Atividade com varetas e bolas de isopor - grupo B .....                                   | 73  |
| Tabela 7 – Atividade com varetas e bolas de isopor - grupo C .....                                   | 75  |
| Tabela 8 – Atividade com o <i>software ChemSketch</i> - grupo C .....                                | 78  |
| Tabela 9 – Atividade com o <i>software ChemSketch</i> - grupo D .....                                | 80  |
| Tabela 10 – Atividade com o <i>software ChemSketch</i> - grupo A .....                               | 81  |
| Tabela 11– Atividade com o <i>software ChemSketch</i> - grupo B .....                                | 83  |
| Tabela 12 – Resultados com a opção “foi fácil” entre os grupos D e A na atividade quadro e giz ....  | 104 |
| Tabela 13 – Resultados encontrados entre os grupos B e C – Tecnologia: bola de isopor e vareta. .... | 112 |

## LISTA DE SÍMBOLOS

|                |                               |
|----------------|-------------------------------|
| $C_7H_5N_3O_6$ | 2-metil-1,3,5-trinitrobenzeno |
| $CH_4$         | Metano                        |
| $SF_6$         | Hexafluoreto de enxofre       |
| $PCl_5$        | Pentacloreto de fósforo       |
| $H_2O$         | Água                          |
| $NH_3$         | Amônia                        |
| $BeCl_2$       | Cloreto de berílio            |
| $BF_3$         | Trifluoreto de boro           |
| $C_2H_4$       | Eteno                         |
| $I_2$          | Iodo                          |
| $CS_2$         | Dissulfeto de carbono         |
| $F_2$          | Flúor                         |
| $HCN$          | Cianeto de hidrogênio         |
| $ClBr$         | Brometo de cloro              |
| $SO_2$         | Dióxido de enxofre            |
| $CCl_4$        | Tetracloreto de carbono       |
| $SO_3$         | Trióxido de enxofre           |
| $COCl_2$       | Fosfogênio                    |
| $PCl_3$        | Tricloreto de fósforo         |

## SUMÁRIO

|                                                                                                |            |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>DA PRÁTICA À NECESSIDADE DA PESQUISA.....</b>                                               | <b>18</b>  |
| <b>MODELAGEM .....</b>                                                                         | <b>26</b>  |
| REPRESENTAÇÃO EM 2D E 3D .....                                                                 | 27         |
| TIPOS DE MODELAGENS .....                                                                      | 28         |
| MODELAGEM <i>STICK</i> .....                                                                   | 29         |
| MODELAGEM <i>BALLS E STICKS</i> .....                                                          | 29         |
| MODELAGEM <i>SPACEFILL</i> .....                                                               | 30         |
| FÓRMULA ESTRUTURAL .....                                                                       | 30         |
| SOFTWARES DE MODELAGEM EM QUÍMICA .....                                                        | 31         |
| <i>BKCHEM</i> ® .....                                                                          | 31         |
| <i>CHEMDRAW</i> ® .....                                                                        | 32         |
| <i>CHEMDRAW ULTRA</i> ® .....                                                                  | 33         |
| <i>CHEMDRAW PRO</i> ® .....                                                                    | 34         |
| <i>HYPERCHEM 7</i> ® .....                                                                     | 34         |
| <i>HYPERCHEM LITE</i> ® .....                                                                  | 35         |
| <i>POCKET HYPERCHEM</i> ® .....                                                                | 36         |
| <i>ISIS DRAW</i> ® .....                                                                       | 37         |
| <i>CHEMWINDOW</i> ® .....                                                                      | 39         |
| <i>AIM2000</i> ® .....                                                                         | 40         |
| <i>CHEM 4-D</i> ® .....                                                                        | 41         |
| <i>CHEMSKETCH</i> ® .....                                                                      | 41         |
| <b>GEOMETRIA MOLECULAR – VSEPR.....</b>                                                        | <b>46</b>  |
| <b>CAMINHOS METODOLÓGICOS .....</b>                                                            | <b>56</b>  |
| <b>RESULTADOS E ANÁLISE DOS DADOS.....</b>                                                     | <b>65</b>  |
| AULA DE QUÍMICA: TECNOLOGIA - QUADRO E GIZ .....                                               | 67         |
| AULA DE QUÍMICA: TECNOLOGIA - VARETAS E BOLAS DE ISOPOR.....                                   | 72         |
| AULA DE QUÍMICA: TECNOLOGIA - <i>SOFTWARE CHEMSKETCH</i> ® .....                               | 76         |
| ANALISANDO OS RESULTADOS ENCONTRADOS ENTRE OS GRUPOS A E D: <i>SOFTWARE CHEMSKETCH</i> ® ..... | 84         |
| DIFICULDADES NA UTILIZAÇÃO DO <i>SOFTWARE CHEMSKETCH</i> ® .....                               | 92         |
| PONTOS POSITIVOS NA UTILIZAÇÃO DO <i>SOFTWARE</i> .....                                        | 101        |
| ANALISANDO OS RESULTADOS ENCONTRADOS ENTRE OS GRUPOS D E A: QUADRO E GIZ .....                 | 104        |
| ANALISANDO OS RESULTADOS ENCONTRADOS ENTRE OS GRUPOS B E C: BOLAS DE ISOPOR .....              | 112        |
| <b>CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>                                                              | <b>117</b> |

REFERÊNCIAS ..... 119



## DA PRÁTICA À NECESSIDADE DA PESQUISA

Em um mundo submetido ao impacto dos meios de comunicação e da alta tecnologia, a escola se vê desafiada a redefinir seus objetivos e suas práticas pedagógicas. Desse modo, os professores são confrontados de várias maneiras perante as demandas da contemporaneidade que exigem *“que a escola proponha dinâmicas pedagógicas que não se limitem a transmissão ou disponibilização de informações, inserindo nessas dinâmicas as tecnologias de informação e comunicação, de forma a reestruturar a organização curricular fechada e as perspectivas conteudistas que vêm caracterizando-a”*. (BONILLA, 2005, p. 91).

Nesse contexto, como professor de Ciências e Química do Ensino Básico, em escolas públicas e particulares, há mais de 24 anos, tenho vivenciado os inúmeros esforços em todos os níveis de intervenção no contexto escolar - incluindo órgãos e instâncias políticas - para introduzir as tecnologias de informação e comunicação na educação. E foram as próprias exigências vindas da sociedade atual, aliadas a minha preocupação com a melhoria do ensino de Ciências/Química, que começaram a impor-me uma necessidade de mudança nos processos de ensino-aprendizagem. Nesse sentido, mesmo inseguro diante do novo, ousei incorporar a informática nesses processos. Via nos recursos computacionais possibilidades de transformar a prática pedagógica, criando novas situações de aprendizagem que fossem mais significativas para os alunos. Entendia que era *“inegável a necessidade de introduzir as tecnologias na educação, até mesmo como forma de questionamento do paradigma tradicional de ensino ainda hegemônico no contexto educativo”* (SILVA, 2005, p. 33). Para isso, a preocupação primeira foi com minha formação, pois tinha os computadores em uma das escolas em que atuava, mas como fazer com que essa ferramenta apoiasse minhas atividades de ensino?

Assim, em 1985, fiz uma especialização, na UNIFRAN<sup>1</sup>, em *“Tecnologia no ensino de ciências”* e comecei a me preocupar com a utilização dessas tecnologias no ensino, buscando uma forma de aplicá-las na melhoria dos processos de ensino-aprendizagem.

---

<sup>1</sup> UNIFRAN – União das Faculdades Francanas – Franca - SP

Em 1986, já exercendo o magistério como professor de Química, encontrei-me com os primeiros microcomputadores. Lembro claramente que adquiri um TK-82C<sup>2</sup>, que pesava 340g e sua linguagem era o BASIC<sup>3</sup>.



Figura 1 – Microcomputador TK-82C

Era um computador pessoal, de pequeno porte, ideal para iniciantes que queriam aprender informática sem grandes investimentos. No seu interior, todos os circuitos eletrônicos eram compactados em 4 chips de circuitos integrados, acionados pelo microprocessador Z80A. Tinha memória ROM<sup>4</sup> de 8Kb, memória RAM<sup>5</sup> de 2Kb, expansível até 64 Kbytes através de cartuchos acoplados à parte posterior do micro. O teclado era do tipo membrana.

Na parte posterior da caixa, havia um soquete para a antena, uma parte da placa de circuito exposta, onde se podia conectar um gravador cassete. Não tinha chave interruptora; para ligá-lo, devia-se simplesmente conectar no alimentador. Para ver os resultados do seu trabalho, bastava ligá-lo em um aparelho de televisão, embora a imagem produzida era somente em preto e branco.

Em 1988 tive contato com o PC-XT<sup>6</sup>, cujo sistema operacional era o PC/MS-DOS, desenvolvido pela Microsoft para a IBM. A linguagem de programação continuava sendo o BASIC, mas com muito mais recursos de hardware.

---

<sup>2</sup> Produzido pela Microdigital Eletrônica Ltda - <http://www.mci.org.br/fabricante/microdigital.html>

<sup>3</sup> BASIC - *Beginners All-Purpose Symbolic Instruction Code* foi criada por J. Kemeny e T. Kurtz em 1963 no Dartmouth College no intuito de tornar claro o ensino dos conceitos da programação.

<sup>4</sup> ROM - *Read Only Memory* - Memória Apenas de Leitura

<sup>5</sup> RAM - *Random Access Memory*, ou memória de acesso aleatório (randômico),

<sup>6</sup> PC XT - *P*ersonal *C*omputer *e*Xtended *T*ecnology

Com o passar do tempo, o gosto e a inclinação por essa tecnologia aumentam e, na década de 90, trabalhei com o AT-286<sup>7</sup>, com memória cache, capaz de auxiliar o processador em suas funções. Mas os monitores eram monocromáticos, utilizando as telas com cores verde, laranja ou cinza.

Depois apareceram as máquinas 386, com a grande novidade de rodar sistemas operacionais mais avançados, como o *Windows 3.11*<sup>®</sup>. Começa uma verdadeira avalanche de máquinas, em uma velocidade incrível: o *486DX*, com as placas de vídeo SVGA, que poderiam atingir até 16 milhões de cores, novos sistemas operacionais: O *Windows 95*<sup>®</sup>, *Windows 98*<sup>®</sup>, as placas de rede, placas de memória e placas de vídeo. Concomitante a essa evolução estava a minha preocupação de como aplicar a nova tecnologia em sala de aula, de modo a levar para o aluno melhores e maiores condições de aprendizagem. Assim, em 1998, participei do Projeto de reformulação curricular e de capacitação de professores do Ensino Médio da rede estadual de Minas Gerais, oferecido pela Universidade Federal de Uberlândia em convênio com a Secretaria de Estado da Educação. Tal projeto tinha como preocupação a melhoria do ensino de Química.

Em 1999 participei de um curso de aperfeiçoamento em Informática aplicada à educação, ministrado pelo Núcleo de Tecnologia Educacional de Uberlândia (NTE-MG9), que era o passo inicial do ProInfo<sup>8</sup>, concluído no ano de 2000. Os objetivos desse curso eram voltados para as escolas: pretendia-se sensibilizá-las e motivá-las para incorporação da tecnologia de informações e comunicação; apoiá-las no processo de planejamento tecnológico, caso tivessem aderido ao projeto estadual de informática na educação, e capacitar-lhes os professores.

Novas teorias de aplicação da informática em sala de aula eram conhecidas, apesar de algumas bastante polêmicas, pois, para o ProInfo, o próprio professor é que deveria construir o seu material, e a base dos trabalhos era o *Microsoft Office*<sup>®</sup>. Nos novos laboratórios implantados pelo ProInfo hoje as máquinas são todas na plataforma *Linux*<sup>9</sup>.

---

<sup>7</sup> PC AT - Personal Computer Advanced Technology

<sup>8</sup> ProInfo – Programa Nacional de Informática na Educação

<sup>9</sup> Sistema operacional - programa responsável pelo funcionamento do computador, que faz a comunicação entre hardware (impressora, monitor, mouse, teclado) e software (aplicativos em geral).

Logo depois foi instalado, na escola municipal em que trabalho, um laboratório de informática, onde dei meus primeiros passos na escola pública utilizando as tecnologias.

Em outubro de 2000, o Instituto Ayrton Senna lançou o concurso “Sua escola a 2000 por hora”, que doaria, um laboratório de informática para as escolas escolhidas. Havia chegado a hora de a escola estadual conseguir o seu laboratório de informática. Idealizamos e coordenamos um grupo de trabalho para a criação de uma revista eletrônica que comemoraria o centenário de Ituiutaba, mobilizando toda a comunidade escolar. A maior parte dos professores e alunos não tinham nenhuma informação sobre a aplicação da informática no cotidiano escolar. O professor Dr. Eduardo Chaves, membro do Instituto Ayrton Senna e professor da Unicamp, esteve na escola verificando o projeto e as condições para a sua aplicação. Infelizmente, fomos derrotados na última etapa, para a cidade de Araxá, e continuamos sem o laboratório, somente conseguindo-o no final de 2006.

Em 2002, fiz especialização *lato sensu* em informática em educação, na Universidade Federal de Lavras, onde apresentei a monografia “Construção de uma apostila multimídia de Química usando o *Microsoft PowerPoint®*”, orientado pelo prof. Dr. André Luiz Zambalde. A aplicação dessa apostila na escola municipal foi algo indescritível, pois via claramente, no olhar dos alunos, o deslumbramento com aquela ferramenta pedagógica, a interação com a máquina, que os motivava e fazia com que a aprendizagem fosse facilitada. As turmas que vivenciaram essa nova realidade apresentavam um interesse maior, comparadas com práticas de ensino anteriores.

Em 2005, concluí a especialização *lato sensu* em Química na Universidade Federal de Lavras apresentando a monografia “As Soluções e suas aplicações no cotidiano”, orientado pelo prof. Dr. Nadiel Massahud. A pesquisa propunha que o conhecimento de Química não é abstrato, mas intimamente relacionado ao mundo em que vivemos, evidenciando, desse modo, a possibilidade de se estabelecerem relações entre o cotidiano e o ensino do conteúdo em questão. O tópico trabalhado, geralmente ministrado na 2ª série do Ensino Médio, foi *Soluções*, cuja aprendizagem revela dificuldades por parte dos alunos, justamente pela ausência de elo entre o dia-a-dia dos educandos com o conteúdo proposto, tornando-o totalmente abstrato. A abordagem pedagógica corrente sugere que esse tópico se aprende por meio de memorizações e que não é

aplicável em situações cotidianas efetivamente vivenciadas pelos indivíduos de modo geral. O objetivo da pesquisa era demonstrar que, por meio de atividades experimentais, relacionadas ao cotidiano, poderíamos reduzir as dificuldades de aprendizagem. Na proposta de ensino foram utilizadas algumas soluções do cotidiano, como: solução de água boricada a 3%, gasolina (com 22% de álcool), água sanitária comercial (teor de hipoclorito de sódio) e soro glicosado a 5%. Elas foram empregadas em práticas para explorar aspectos relacionados à preparação de soluções diluídas. Um dos principais resultados do trabalho revelou que as atividades experimentais contribuíram para uma melhor compreensão do tema estudado pelos alunos.

Com o curso de especialização concluído e com desafios ainda a enfrentar, decidi dar continuidade aos meus estudos, de modo a aprofundar conhecimentos sobre os temas relacionados à informática e à educação. Na coordenação de um laboratório de informática educativa na escola, busquei sempre, na medida do possível, explorar o computador nas situações de ensino.

Como professor do Ensino Médio, me incomodavam algumas situações de ensino em que os alunos tinham dificuldades para aprender determinados tópicos do conteúdo de Química, o que me levava a buscar alternativas – elaborar novos materiais, propor estratégias, metodologias, entre outros - para melhoria das aprendizagens. Um dos tópicos era Geometria Molecular. Meus alunos apresentavam dificuldades em determinar a geometria das moléculas.

As aprendizagens sobre esse tópico são importantes, visto que os estudantes de Química apresentam dificuldades em relacionar a fórmula molecular, estrutura geométrica, propriedades e nomenclatura (JOHNSTONE, 1991; GABEL; BUNCE, 1994). Nesse sentido, é necessário que eles desenvolvam habilidades específicas para visualizar moléculas no espaço, facilitando a resolução de exercícios em Química Geral e principalmente em Química Orgânica (BARNEA; DORI, 1999; DORI, 1995; DORI; HAMEIRI, 1998). Para isto é preciso que a representação seja dinâmica, podendo, desse modo, aprimorar a visualização tridimensional. (SEDDON; SHUBBER, 1985; SEDDON; MOORE, 1986; TUCKEY et al., 1991).

Muitos estudantes, também, demonstram dificuldades em relacionar as combinações orgânicas (BROOK, 1988; RYLES, 1990; SCHMIDT, 1992; SHANI; SINGERMAN, 1982; SIMPSON, 1983). Nesse sentido, pesquisadores têm

apresentado diferentes abordagens instrucionais como apoio ao ensino de Química, adaptando estratégias de ensino baseadas na mudança conceitual (KRAJCIK, 1991), integrando atividades práticas com a sala de aula (JOHNSTONE; LETTON, 1990), utilizando modelos concretos (COPOLLO; HOUNSHELL, 1995) e o emprego das tecnologias como ferramentas de aprendizado (BARNEA; DORI, 1999; KOZMA; RUSSEL; JONES; MARX; DAVIS, 1996; WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001).

A utilização de modelos concretos aliados às tecnologias produz uma nova ferramenta de aprendizagem promissora (WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001). De acordo com Taber (1997), existem concepções alternativas que podem ser adquiridas por experiência do dia-a-dia com o manuseio de objetos. Assim elas apresentam uma dificuldade maior para serem modificadas. Quando se refere às ligações químicas, devido ao seu grau de abstração, a dificuldade com o aluno aumenta, pois os mesmos não têm idéia sobre a forma como os átomos se ligam, dificultando a aprendizagem.

Segundo Giordan *“as representações dessas partículas submicroscópicas, cujo meio de veiculação pode variar desde o papel, passando pelos conjuntos plásticos, isopor e madeira, chegando à tela do computador ou à projeção holográfica. Varia-se o meio e também as formas de representação, nesse caso com o objetivo de destacar uma ou outra propriedade da molécula”*. (GIORDAN, 2005, p. 290).

As representações a que se refere o autor são fundamentalmente os modelos atômicos e moleculares utilizados para tornar possível a visualização de idéias complexas, processos e sistemas (BARNEA; DORI, 2000).

Desse modo, algumas perguntas me inquietavam: quais as tecnologias que poderiam ser exploradas em uma aula sobre Geometria Molecular? Como favorecer uma aprendizagem mais significativa e efetiva para os alunos sobre esse tema? Quais as possibilidades de as aprendizagens se efetivarem na integração das diferentes tecnologias? Será que a utilização do *software*<sup>10</sup> ChemSketch®, como tecnologia de apoio ao ensino, ajudará os alunos a compreenderem melhor o tópico Geometria Molecular? Quais são as possibilidades na utilização dessa tecnologia? Em que difere de outras?

---

<sup>10</sup> *Software*: Todo e qualquer conjunto de instruções executadas no computador. Sistema, aplicativo, programa, rotina.

Frente a tantas perguntas e inquietações, surge a necessidade de encontrar alternativas de mudanças em busca da criação de situações de ensino que proporcionassem aos alunos uma melhor compreensão sobre o tema em estudo.

Neste trabalho abordo a utilização de diferentes tecnologias de apoio ao ensino de Geometria Molecular, no Ensino Médio, destacando as dificuldades dos alunos na proposição de modelos. Meu objetivo é investigar a utilização de diferentes tecnologias no ensino de Geometria Molecular e, fundamentalmente, identificar se o *software ChemSketch*<sup>®</sup> potencia ou desfavorece a elaboração de modelos mais adequados de estruturas químicas.

Na tentativa de refletir sobre estas questões, tomo como pressupostos norteadores: que a utilização do computador, via *software ChemSketch*<sup>®</sup>, proporciona mudança no processo ensino-aprendizagem, facilitando o estabelecimento de aprendizagem significativa; que a integração das tecnologias nos processos de ensino-aprendizagem potencia a construção do conhecimento.

A relevância deste estudo reside na possibilidade de contribuir para a reflexão sobre as diferentes tecnologias que podem ser exploradas numa outra lógica no ensino de Geometria Molecular, contrariando o modelo usual de transmissão e recepção.

Para apresentar os movimentos realizados nesse processo investigativo, dividi o trabalho em 5 partes.

Na primeira, **Da prática à necessidade da pesquisa**, apresento a trajetória que foi percorrida para a construção do trabalho de pesquisa.

Em **Modelagem e Geometria Molecular** apresento a importância da construção dos modelos, os *softwares* que podem ser utilizados e explico a importância do estudo sobre o tema.

Na terceira parte, **Caminhos Metodológicos**, apresento de forma sucinta o que é pesquisa qualitativa e estudo de caso. Ainda, descrevo os sujeitos, procedimentos adotados e a busca e construção de dados.

O **Resultados e Análise dos Dados**, quinta parte do trabalho, recebeu o nome de **Tecnologias e a elaboração de modelos utilizando diferentes tecnologias de apoio**. Aqui discuti sobre as situações de ensino com as diferentes tecnologias.

E, por fim, trago as **Considerações Finais** e esboço algumas recomendações com base nos resultados da pesquisa realizada, que sugerem que a utilização do *software*, principalmente associado a outras tecnologias pode facilitar as aprendizagens em Química, nomeadamente, em Geometria Molecular.

## MODELAGEM

Uma forma de pensar sobre modelos é como instrumentos que relacionam a teoria com a suposta realidade.

Segundo Levine (1974), modelo pode ser definido como uma contribuição, uma ferramenta específica para compreender conceitos mais abstratos.

Ingham e Gilbert (1991) apresentam modelo como representação simplificada de um fenômeno no qual concentra a atenção em aspectos específicos e facilita o pensamento científico.

Conforme Hardwicke (1995), modelo é uma representação de um objeto ou de um conceito. A ciência busca investigar e representar o mundo natural para isso recorre à modelagem, tornando-se um dos aspectos centrais da ciência. Nesse sentido, a palavra “modelo” pode ter vários e diferentes usos.

Sant’anna (2002, p. 509) conceitua modelagem molecular como *“investigação das estruturas e das propriedades moleculares usando a química computacional e as técnicas de visualização gráfica visando fornecer uma representação tri-dimensional, sob um dado conjunto de circunstâncias”*.

Na esteira do debate, Santos (2001, p. 5) relata o domínio de atuação da modelagem molecular referindo-se *“a aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria”*.

Segundo Gilbert e Boulter (1995), o modelo pode ser compreendido como uma representação parcial de uma idéia, objeto, processo ou fenômeno para um determinado sistema. A utilização de modelos e modelagem no ensino tem sido um tema constante de pesquisa na área de educação (GILBERT; BOULTER, 2000).

Tiberghien (1994) dedicou-se a avaliar as formas e os resultados de modelização no ensino de ciências. Nersessian (1995) questiona até que ponto o conhecimento das práticas de pensamento dos cientistas pode auxiliar na elaboração de estratégias pedagógicas. Essas pesquisas apontam para a importância da utilização dos modelos na aprendizagem de conteúdos científicos.

## REPRESENTAÇÃO EM 2D E 3D

Segundo Gasteiger (2003), a representação<sup>11</sup> 2D (bidimensional) é o idioma universal natural dos químicos. Para o autor esses diagramas de estrutura são modelos e são projetados para fazer as moléculas mais concebíveis. Neles, os átomos são caracterizados pelos símbolos e os elétrons unidos, valendo-se de linhas. Porém o diagrama da estrutura química é incompleto, pois simplifica a representação da molécula ao demonstrar somente átomos unidos e o tipo de ligação existente.

A representação 3D (tridimensional) apresenta uma quantidade maior de informações, como a posição dos átomos no espaço, o ângulo e a distância entre eles na construção da molécula.

Gasteiger (2003) afirma que no início foram dados nomes a determinadas combinações para que pudessem ser caracterizadas. Na maioria dos casos eram nomes usuais que ainda são empregados. Assim, passaram a utilizar símbolos para abreviar esses nomes, criando uma classificação sistemática de combinações.

A teoria da estrutura e novas técnicas experimentais trouxeram um entendimento melhor para a estrutura da molécula, combinando os diagramas de estruturas famosas e o arranjo em 3D das moléculas, conforme figura 2 (GASTEIGER, 2003. p. 17).

---

<sup>11</sup> A origem do termo é do século XIII, chamando-se *représentation* aos manequins de cera exibidos junto ao cadáver dos reis franceses e ingleses durante as cerimônias funerárias. O manequim tinha a função de lembrar aos presentes que o rei havia assumido uma outra forma e que uma nova vida se iniciava para o morto. Dessa forma, apesar de morto o rei continuaria presente para seus súditos ("*re + présentation*") (GINZBURG, 2001).

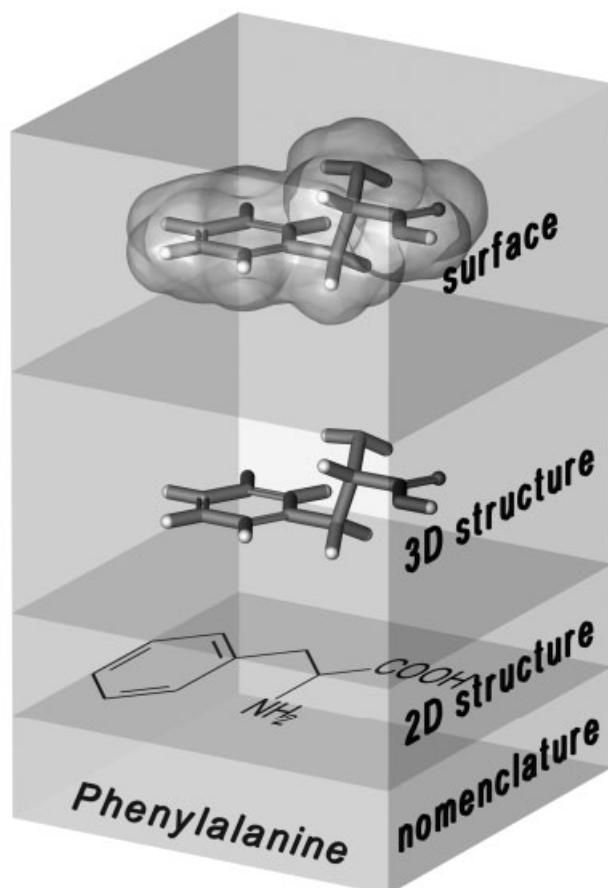


Figura 2 – Hierarquia para representar uma molécula. Gasteiger (2003)

Uma das metas mais importantes na utilização de *softwares* de modelagem é que ele deve representar as estruturas químicas e transferir os vários tipos de representação para os *softwares*, facilitando a visualização da estrutura.

São introduzidas quatro informações básicas: nomenclatura usual, nomenclatura sistemática, anotação química e matemática para as estruturas químicas a serem estudadas.

## TIPOS DE MODELAGENS

As representações mais utilizadas em Química, como referência em publicações ou livros didáticos, são as modelagem *stick* (figura 3), *balls* e *stick* (figura 4) e *spacefill* (figura 5).

### MODELAGEM *STICK*

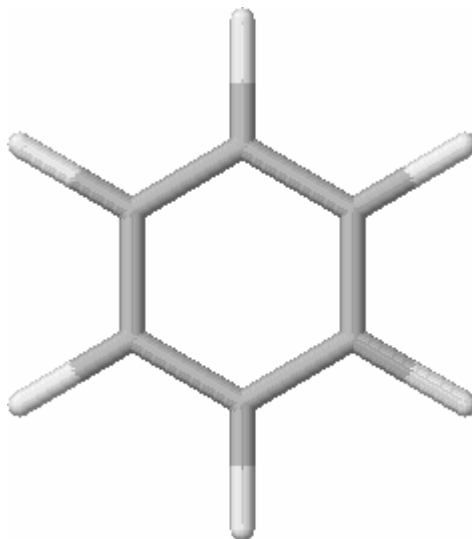


Figura 3 – Modelo *Sticks* do benzeno

### MODELAGEM *BALLS E STICKS*

Segundo Milagres (2001), o modelo “pau e bola” pode ser ótimo modelo de ensino, pois permite que os alunos “observem” os átomos. O problema é que essas representações são bidimensionais, dificultando a visualização tridimensional.

De acordo com Whitten (2003), os modelos de “pau e bola” usam bolas de cores diferentes para representar átomos e traços para representar as ligações.

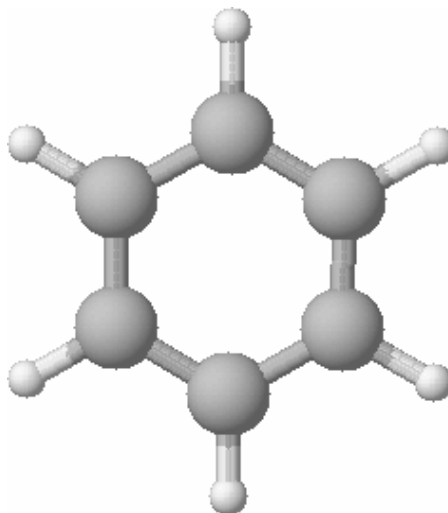


Figura 4 – Modelo *Balls e Sticks* do benzeno

## MODELAGEM *SPACEFILL*

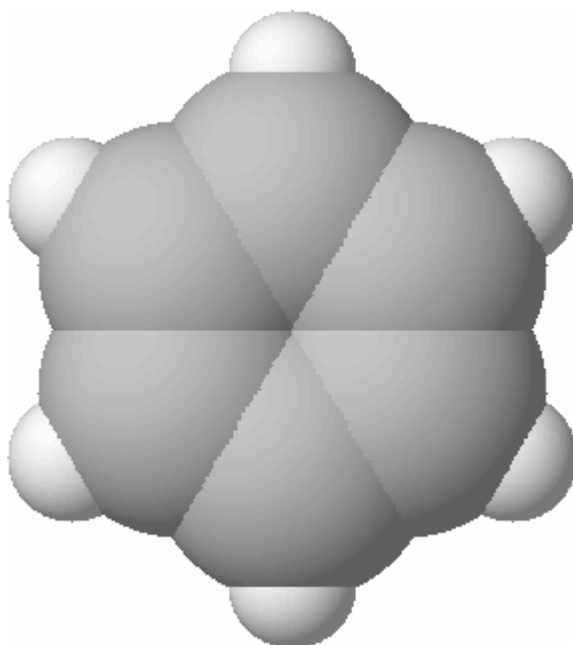


Figura 5 – Modelo *Spacefill* do benzeno

## FÓRMULA ESTRUTURAL

A fórmula estrutural, também conhecida como fórmula estrutural plana ou fórmula estrutural de Couper, demonstra as ligações entre os elementos, sendo cada par de elétrons entre dois átomos representado por um traço. Indica os átomos, a proporção entre eles, bem como as ligações covalentes existentes, que podem ser assim representadas como estrutural completa e condensada.

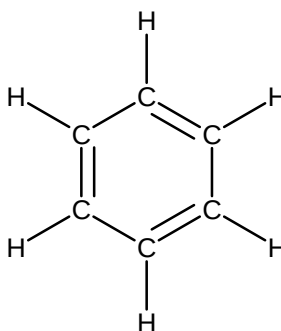


Figura 6 – Fórmula estrutural completa do benzeno

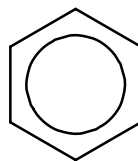


Figura 7 – Fórmula estrutural condensada do benzeno

## SOFTWARES DE MODELAGEM EM QUÍMICA

Atualmente, pesquisadores (ANJOS; GIORDAN, 2004; ANJOS, 2004; WU et al, 2001; KIBOSS, 2002; CHANG, 2001; EICHLER; DEL PINO, 2006) têm se dedicado a estudar a importância e os resultados da utilização de ferramentas computacionais em ensino-aprendizagem de Química.

Na Educação Química, nos últimos dez anos, houve um verdadeiro salto na produção de *softwares* educacionais, abrangendo diversas áreas do conhecimento químico.

Para desenvolver a pesquisa foram analisados alguns *softwares* de química que pudessem auxiliar no desenvolvimento da temática Geometria Molecular, tais como:

### **BKCHEM<sup>®</sup>**

*BKchem<sup>®</sup>* é um *software* livre<sup>12</sup> multiplataforma (*Windows*, *GNU* e *Linux*) que serve para representar estruturas químicas. É escrito na linguagem de programação *Python*<sup>13</sup> e desenvolvido por Beda Kosata.

<sup>12</sup> Disponível em <<<http://bkchem.zirael.org/index.html>>>. Acessado em 16 novembro 2006.

<sup>13</sup> Python é uma linguagem que foi elaborada por Guido Van Rossum em 1991 para o ensino de programação. Ela é orientada a objetos. É intuitiva e quem aprende uma vez, nunca se esquece, pois é muito próxima de um pseudo-código. Formada por grandes comunidades, é amplamente utilizada nos meios acadêmico, software livre, pesquisa (Google, NASA), jogos (Disney), dentre outros.

Um *software* útil, principalmente para as escolas de ensino médio que estão recebendo laboratórios de informática que rodam somente na plataforma *Linux*.

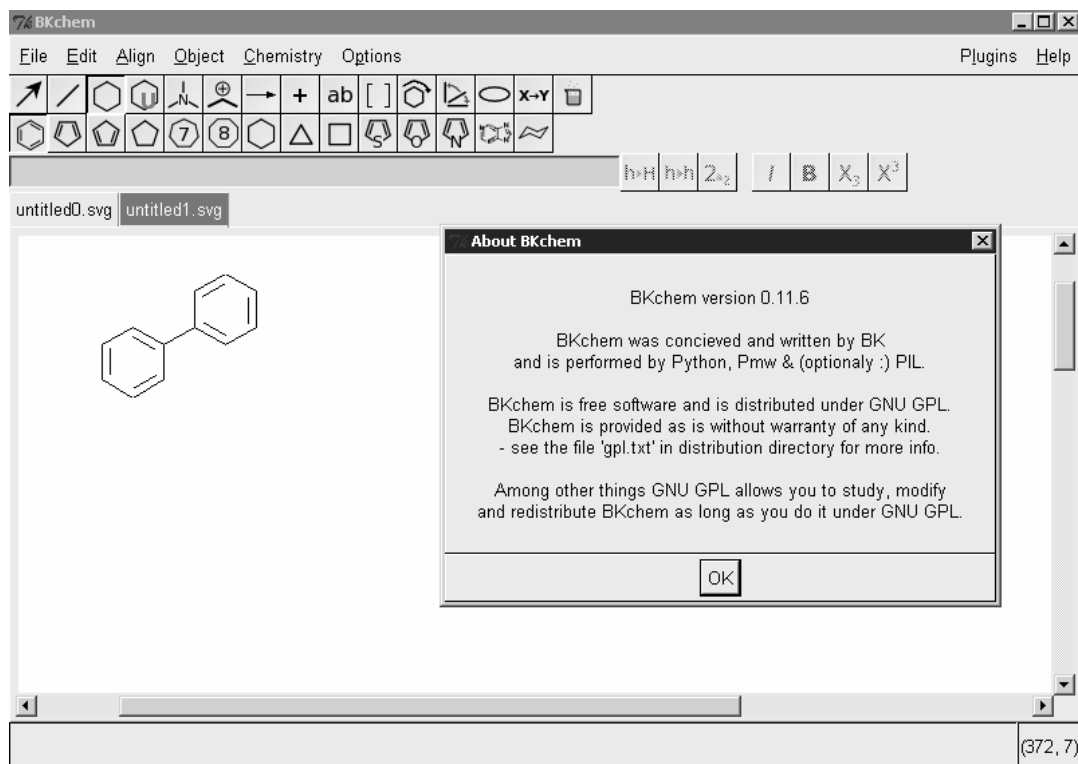


Figura 8 – Tela do *BKchem*<sup>®</sup>

Apresenta limitações no processo de visualização em 3D, o que dificultou a aplicação neste trabalho.

### **CHEMDRAW<sup>®</sup>**



Figura 9 – *ChemDraw*<sup>®</sup>

*ChemDraw*<sup>®</sup> é uma das mais importantes ferramentas de *software* para desenho de estrutura no padrão de publicação. Produzido pela *CambridgeSoft Corporation*<sup>14</sup>, recomendado pela *American Chemical Society* para suas publicações, tem capacidade de importar e exportar os mais diferentes formatos de arquivo para sistemas *Windows* e *Mac*. Pode ser adquirido como item de um pacote completo (*ChemOffice*) ou com opções de custo e benefícios, tais como *ChemDraw Ultra*<sup>®</sup> e *ChemDraw Pro*<sup>®</sup>.

Apresenta fácil integração com o usuário, facilitando a sua utilização. Tem uma tabela periódica que pode auxiliar nas consultas e na elaboração das estruturas químicas.

O alto custo desse *software* inviabiliza a sua utilização nos laboratórios de informática das escolas, principalmente por terem opções em que o custo/benefício é bem mais interessante.

### **CHEMDRAW ULTRA<sup>®</sup>**

O *ChemDraw Ultra*<sup>®</sup> é um conjunto de vários *softwares* que contém o *ChemDraw Pro*<sup>®</sup> e os seguintes recursos adicionais:

- Nome e Estrutura;
- Estrutura e Nome (*Autonom - Beilstein's*);
- Previsão de Ressonância Magnética Nuclear (*ChemNMR H e C*);
- *Chem3D Standard*, versão 5.0;
- *ChemFinder Standard*, versão 5.1.

O alto custo desse *software* inviabiliza a sua utilização nos laboratórios de informática das escolas, principalmente por terem opções em que o custo/benefício é bem mais interessante.

---

<sup>14</sup> Disponível em <http://www.cambridgesoft.com/>. Acessado em 16 mar 2006.

**CHEMDRAW PRO®**

É outra opção apresentada, pois contém o *ChemDraw®* Standard e os recursos adicionais:

- Editora e espectros, estruturas e anotações na mesma página;
- Propriedades Físico-Química: BP, Energia Livre *Gibbs*, Calor de formação, índice de refração e outros;
- *ISIS/Draw* compatível (copie e cole);
- Mostra espectro no formato SPC e JCAMP;
- *ClipArt* (vidraria e outros) *ChemDraw Standard*;
- Exporta no padrão de publicação da ACS:TIFF;PNG;
- Estereoquímica.

É uma versão mais simples, com menos recursos que as outras versões do software. A maior dificuldade é que roda na plataforma *Windows®*, ficando incompatível com os atuais laboratórios de informática das escolas públicas que utilizam o sistema operacional *Linux®*.

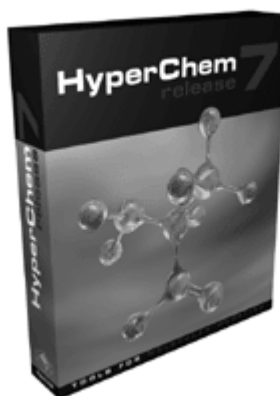
**HYPERCHEM 7®**

Figura 10 – *HyperChem 7®*

O software *HyperChem®* é um ambiente de modelagem molecular sofisticado, conhecido pela sua qualidade, flexibilidade e facilidade no manuseio. Une a visualização 3D (figura 11) e a animação com cálculos de mecânica quântica,

mecânica molecular, e dinâmica. É produzido pela *Hypercube, Inc*<sup>15</sup>. Pode ser feita uma avaliação do *software* durante 30 dias<sup>16</sup>.

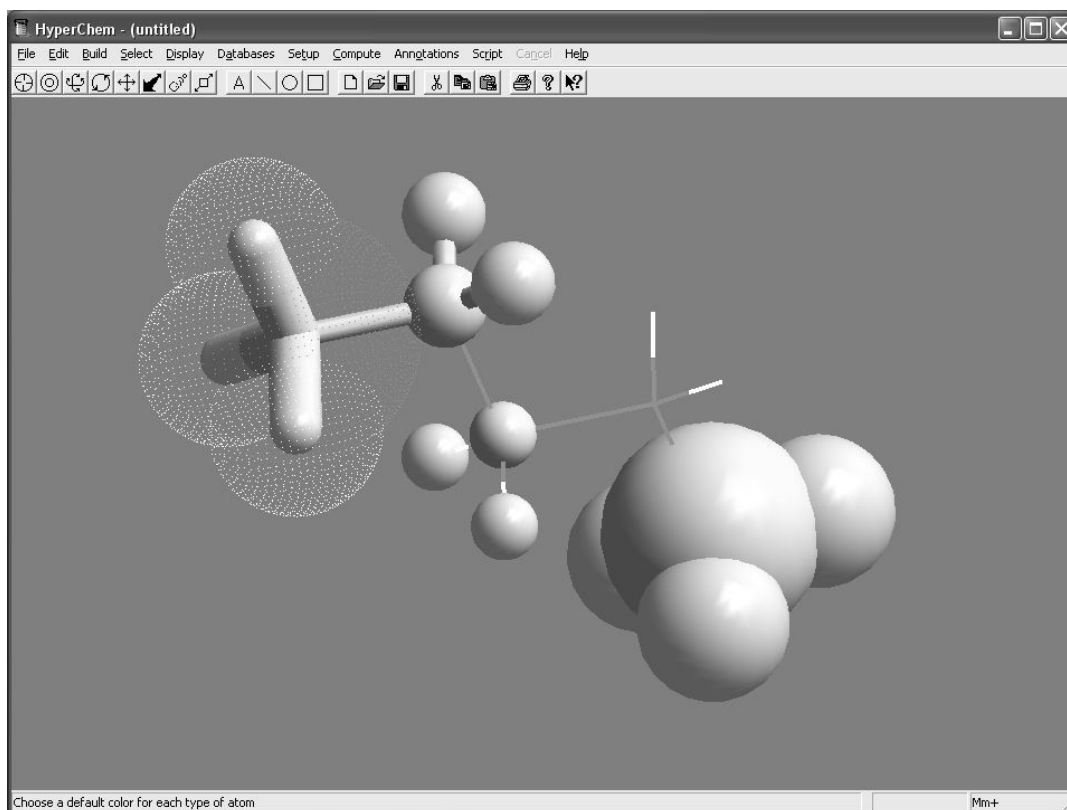


Figura 11 – Tela do *HyperChem*<sup>®</sup>

O *HyperChem*<sup>®</sup> é bastante utilizado profissionalmente, com uma grande quantidade de informações, o que dificulta o acesso dos alunos a sua interface.

## **HYPERCHEM LITE<sup>®</sup>**

*HyperChem Lite*<sup>®</sup> é um produto de modelagem molecular flexível (figura 12) para pesquisadores, educadores e estudantes. Possui capacidades de visualização, análise e simulação de moléculas.

<sup>15</sup> [www.hyper.com](http://www.hyper.com). Acessado em 16 mar 2006.

<sup>16</sup> Disponível em <<http://www.hyper.com/products/evaluation/hyper75/default.html>> acessado em 14 mar 2006.

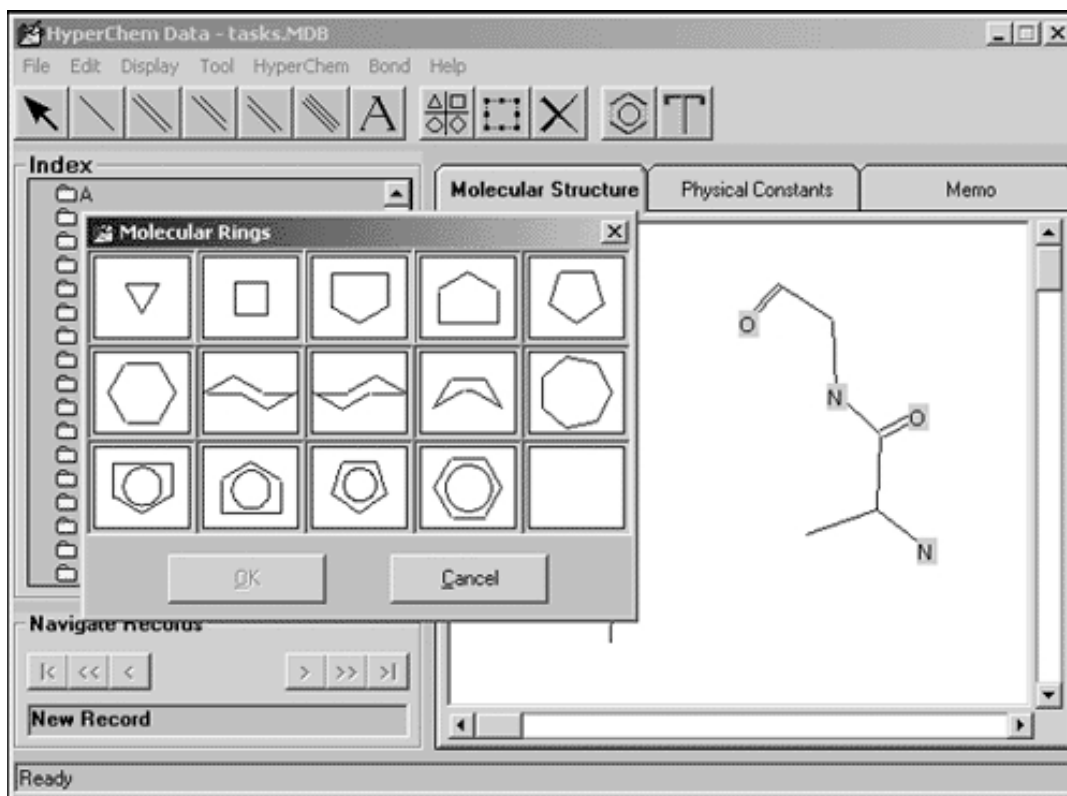


Figura 12 – Tela do HyperChem Lite®

É executado somente na plataforma *Windows*®, o que dificulta a sua utilização nos laboratórios de informática das escolas públicas, que rodam o sistema operacional *Linux*®.

### **POCKET HYPERCHEM®**

O *Pocket HyperChem*® fornece modelagem molecular básica e a funcionalidade química computacional do *HyperChem* na plataforma do *Palmtop PC* (figura 13). Um pacote para a previsão do NMR *spectra dimensional*. *HyperNMR* pode ser usado como único produto ou em conjunto com o *HyperChem*.



Figura 13 – Pocket HyperChem®

É uma versão do *HyperChem*® utilizada em computadores portáteis – Palmtop, dando uma funcionalidade e praticidade ao produto.

Nas escolas públicas e particulares esse tipo de equipamento não é comum. Nesse sentido, tem uma população-alvo bastante restrita.

### **ISIS DRAW®**

*Isis Draw*® é um *software* de estruturas químicas que permite construir fórmulas químicas, visualizar em 2D e 3D (figura 14), além de inserir, em documentos de texto, apresentações e páginas de internet.

O *software Isis Draw*® é gratuito, mas é obrigatório o registro no site do distribuidor, pois o contrato, embora permita o seu uso integral para ensino, não permite a sua distribuição.

É um sistema integrado de informação científica e contém uma escala de banco de dados projetada para deparar-se com as necessidades da gerência de informação na Literatura Química.

O software é parte de um conjunto composto pelo “*Isis Desktop*”, que inclui um modelo padronizado com editoração computacional e também o “*Isis Base*”, um sistema químico com estrutura de orientação na base de dados.

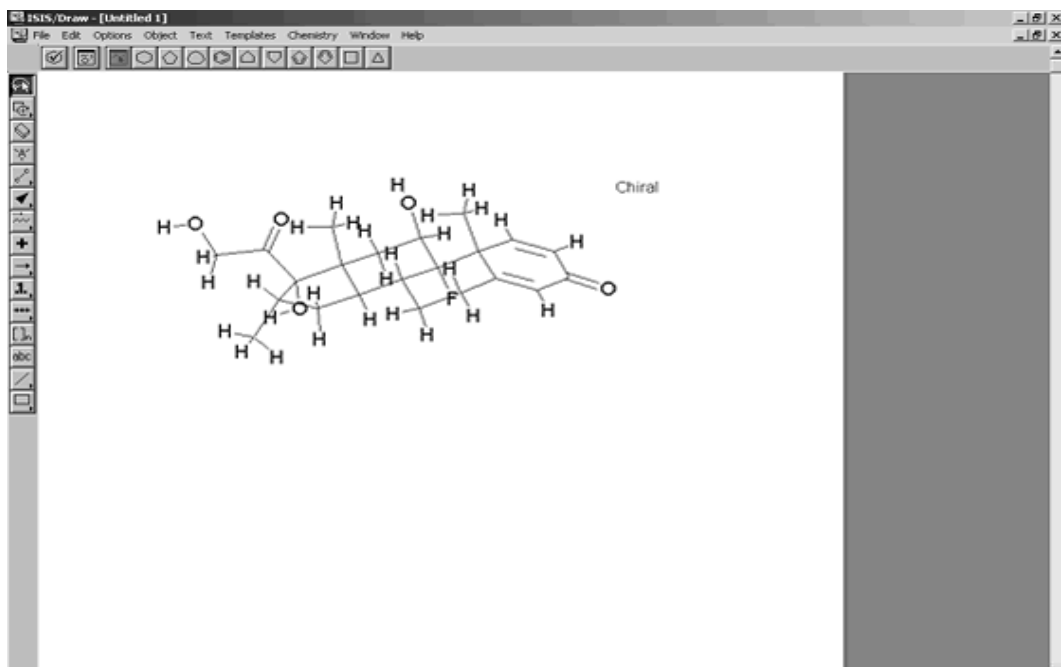


Figura 14 – Isis Draw®

O *software* é do tipo “*freeware*” e é direcionado à construção de moléculas químicas, estruturas químicas e reações químicas, dispondo de uma interface gráfica flexível, recursos de edição e estruturas de apoio à composição de figuras e diagramas diversos.

As figuras geradas pelo *software* podem ser coladas em documento tipo *Microsoft Word*®, sendo facilmente alteradas, clicando sobre a figura para que a mesma seja aberta, de forma automática e editada no programa *Isis Draw*®.

O *software* ainda é composto por ferramentas que permitem a visualização de moléculas orgânicas em distintas dimensões.

Roda na plataforma *Windows*®, inviabilizando assim a sua utilização nos laboratórios das escolas públicas, que rodam *Linux*®.

**CHEMWINDOW<sup>®</sup>**

O *ChemWindow<sup>®</sup>* desenvolvido pela *KnowItAll<sup>®</sup> Informatics System<sup>17</sup>*, é projetado para o químico que necessita extrair estruturas químicas e publicar os relatórios profissionais completos com as estruturas, os espectros, as reações químicas, as instalações da experiência do laboratório, os diagramas da engenharia química, as tabelas dos dados.

Desenvolvido somente para *Windows 2000<sup>®</sup>* e *XP<sup>®</sup>*, necessita de 512 MB de memória RAM, um processador *Pentium IV* (ou equivalente) de pelo menos 3 GHz, 500 MB de espaço livre no disco rígido, além de uma placa de vídeo que suporta *OpenGL<sup>18</sup>*.

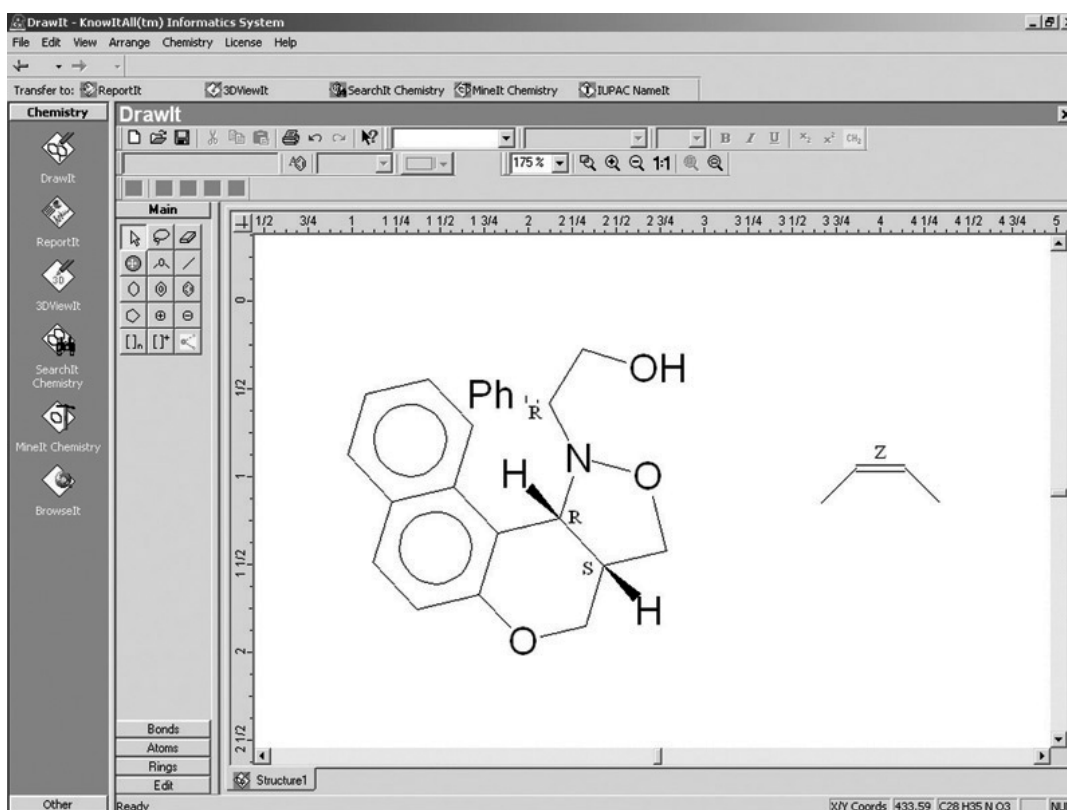


Figura 15 – Tela do *ChemWindow<sup>®</sup>* versão 6.0

Não há também nenhuma versão de *Macintosh*, de *Unix* ou de *Linux* para o *software*, o que dificulta a sua utilização nos laboratórios de informática das escolas de ensino médio que trabalham na plataforma *Linux*.

<sup>17</sup> Disponível em <http://www.bio-rad.com>. Acessado em 15 mar 2006.

<sup>18</sup> *OpenGL* é uma biblioteca de rotinas gráficas para trabalhar em duas e três dimensões.

**AIM2000<sup>®</sup>**

O AIM2000<sup>®</sup> é um *software* de análise e visualização de átomos e moléculas, desenvolvido por Friedrich Biegler-König e Jens Schönbohm<sup>19</sup>. Sua versão de demonstração é bastante limitada, trabalhando no máximo com 8 núcleos e 14 orbitais. Apresenta um arquivo de ajuda e um projeto de exemplo.

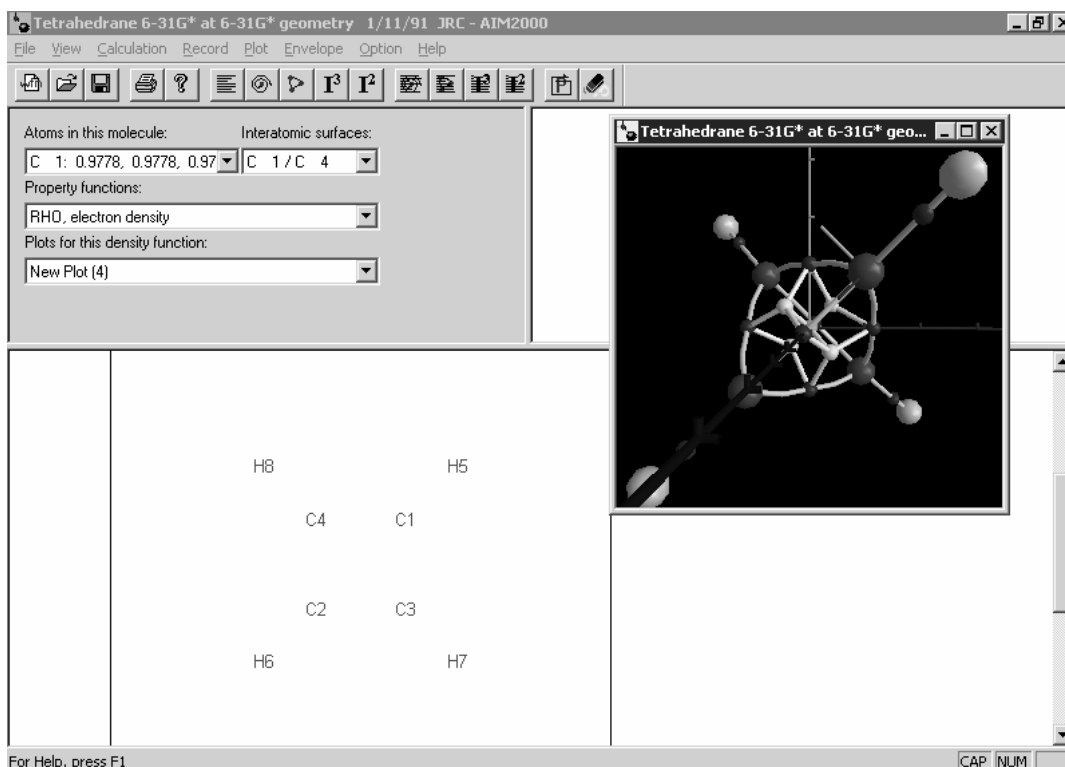


Figura 16 – Tela do AIM 2000<sup>®</sup>

A última versão foi lançada em 2002 (figura 16) e roda nas plataforma Windows<sup>®</sup> 95, 98, Millenium, NT 4, 2000 e XP. Necessita de um processador *pentium* II ou superior, com pelo menos 64 MB de memória RAM.

<sup>19</sup> Disponível em <http://www.aim2000.de>. Acessado em 18 mar 2006.

**CHEM 4-D<sup>®</sup>**

*Chem 4-D* é um software<sup>20</sup> de análise e construção de compostos orgânicos (figura 17), tem uma versão de demonstração que roda por 30 dias no computador e é produzido para rodar na plataforma *Windows<sup>®</sup>* 95/98/NT/2000/Me/XP. Roda em qualquer processador superior a 386 e necessita de 2Mb de memória *RAM* e 4 Mb de espaço livre no disco rígido.

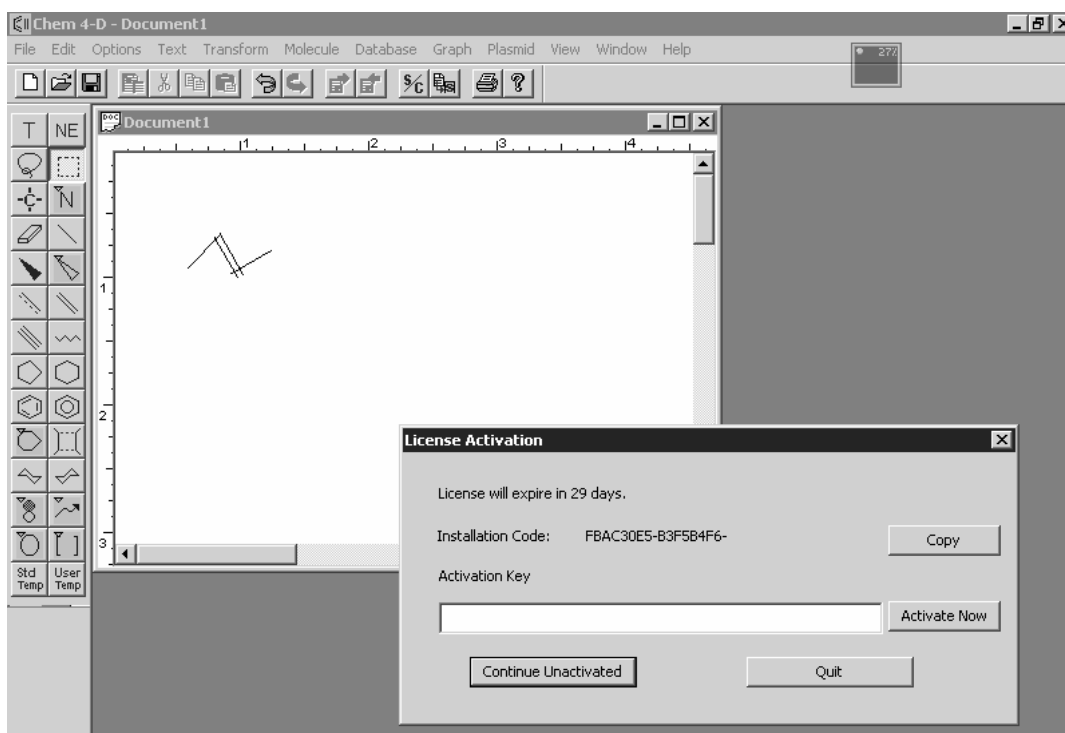


Figura 17 – Tela do *Chem 4-D<sup>®</sup>*

É uma ferramenta de fácil utilização, com uma ótima interface gráfica, todavia não roda na plataforma *Linux<sup>®</sup>*, o que inviabiliza a sua utilização nas escolas.

**CHEMSKETCH<sup>®</sup>**

*ChemSketch<sup>®</sup>* é um software desenvolvido pela *ACD/LABS - Advanced Chemistry Development, Inc.*<sup>21</sup> - para ser rodado na plataforma *Windows<sup>®</sup>*, podendo

<sup>20</sup> Disponível em <http://www.cheminnovation.com/products/chem4d.asp>. Acessado em 16 mar 2006.

<sup>21</sup> Disponível em <http://www.acdlabs.com>. Acessado em 16 mar 2006.

ser baixado da Internet por professores ou alunos e usado para construir equações químicas, estruturas moleculares e esquemas de aulas práticas, com determinada facilidade.

Esse *software* incorpora avançadas características, como a capacidade de girar moléculas no espaço, visualizá-las de diferentes maneiras (figura 18). Há uma versão comercial incompatível com a versão livre, pois somente esta é liberada para professores e estudantes.

Para que seja instalado, o *software* necessita que o computador tenha um processador *Pentium* ou compatível de pelo menos 1 GHz, espaço livre no disco rígido de pelo menos 20 MB, plataforma *Windows 2000 (Service Pack 4)*, *Windows XP (Service Pack 2)* ou *Windows Server 2003 (Service Pack 1)*, com um mínimo de 512 MB de memória *RAM* e uma placa de vídeo *VGA*<sup>22</sup> com resolução mínima de 800x600<sup>23</sup> em 256 cores.

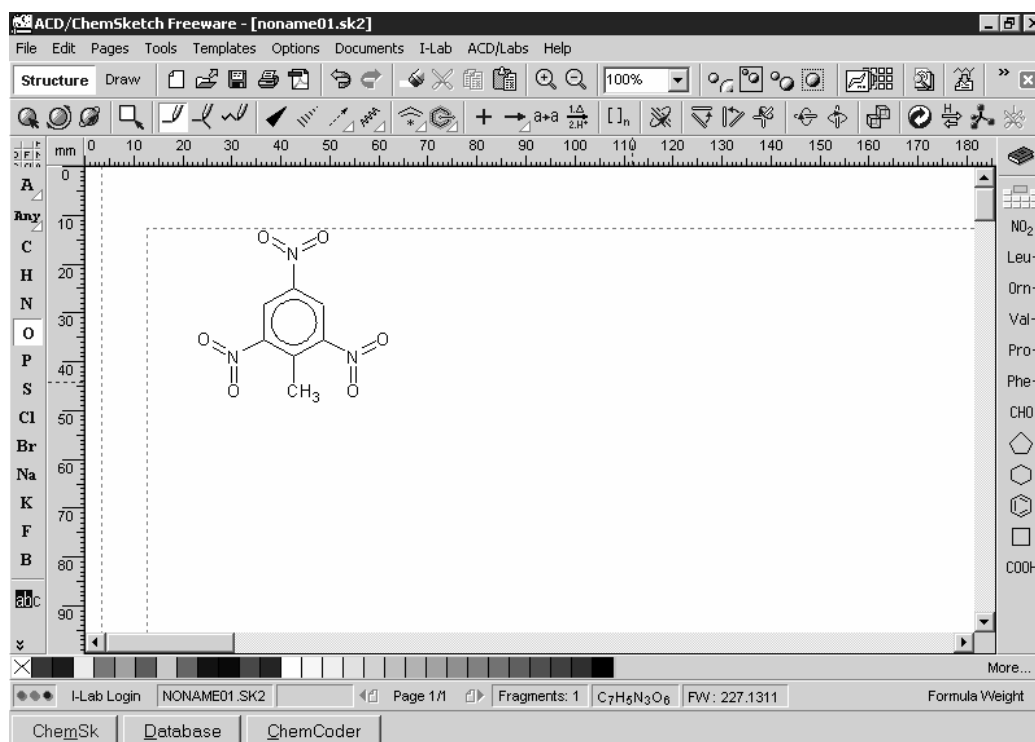


Figura 18 – *ChemSketch*<sup>®</sup> - construindo a estrutura do 2-metil-1,3,5-trinitrobenzeno (TNT)

<sup>22</sup> *VGA* é a sigla para **V**ideo **G**raphics **A**rray. Trata-se de um padrão que representa a resolução do vídeo mais as cores suportadas. Existiram muitos outros padrões, mas, como durante um bom tempo os computadores usaram poucas cores (2 a 8), o *VGA* trouxe um grande avanço, pois proporcionou imagens com resolução de 640x480 e 256 cores. Posteriormente, o *VGA* foi aperfeiçoado e passou a suportar resoluções de até 800x600 com 16 cores. O *VGA* também era compatível com padrões mais antigos, o que permitia o funcionamento correto de programas que surgiram antes do *VGA*.

<sup>23</sup> 800 pontos na horizontal e 600 pontos na vertical. Quanto maior for a quantidade de pontos (*pixels*), melhor será a definição da imagem na tela.

Além da estrutura plana, o *ChemSketch*<sup>®</sup> possui um módulo de geração e visualização de moléculas em 3D, o *ACD/3D Viewer*<sup>®</sup>, que apresenta várias formas de representação de uma estrutura química:

- **Wireframe**: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de “linhas” (figura 19);

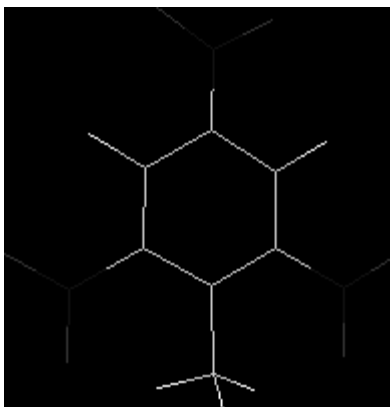


Figura 19 - Visualização do *ACD/3D Viewer* – Representação Wireframe do TrinitroTolueno

- **Sticks**: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de “varas” (figura 20);

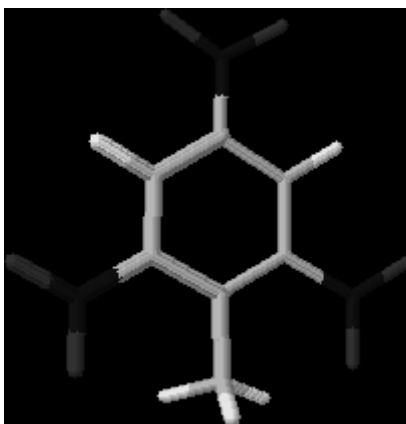


Figura 20 - Visualização do *ACD/3D Viewer* – Representação Sticks do TrinitroTolueno

- **Balls & Sticks**: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma “bolas e varas” (figura 21);

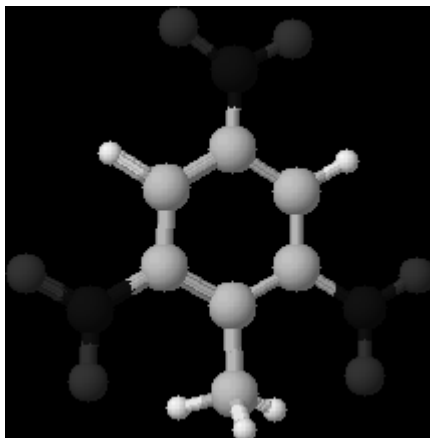


Figura 21 - Visualização do ACD/3D Viewer – Representação *Balls & Sticks* do TrinitroTolueno

- **Spacefill:** Tipo de representação 3D que mostra os espaços vazios da molécula “preenchidos” (semelhante ao modelo Stuart) (figura 22);

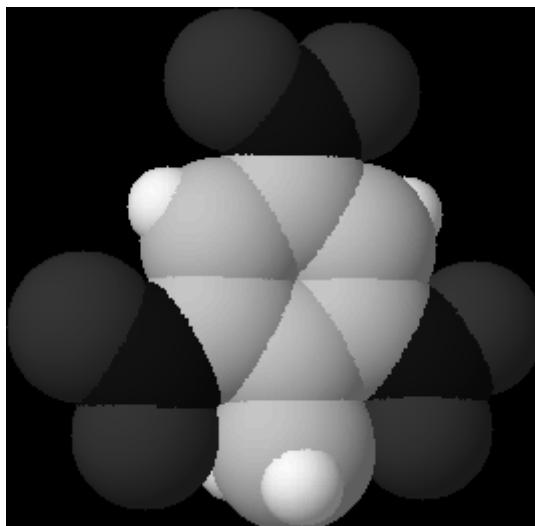


Figura 22 -Visualização do ACD/3D Viewer – Representação *Spacefill* do TrinitroTolueno

- **Dots Only:** Tipo de representação 3D que mostra “somente pontos” representando os átomos e ligações da molécula (figura 23);

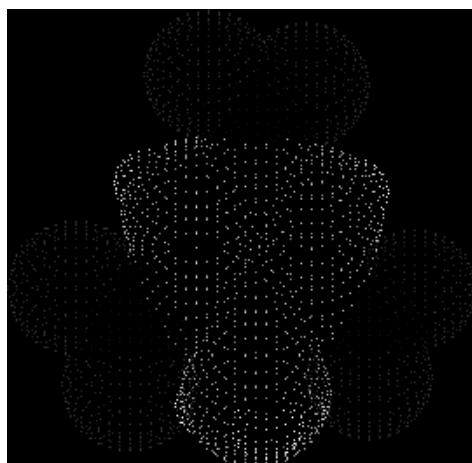


Figura 23 -Visualização do ACD/3D Viewer – Representação *Dots Only* do TrinitroTolueno

- **Disks:** Tipo de representação que mostra os átomos na forma de discos, muito semelhante à forma *Spacefill*, porém sem o efeito 3D (figura 24);

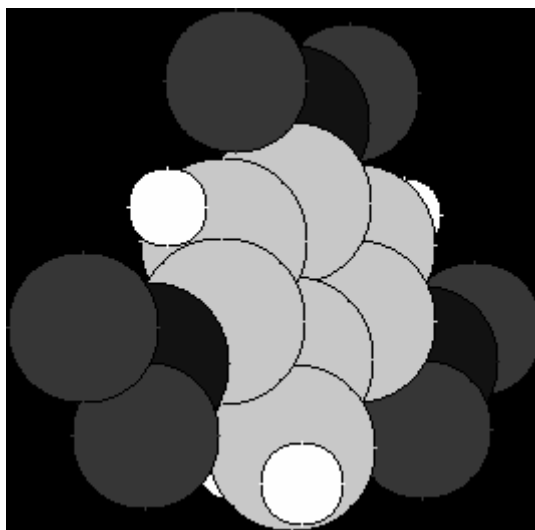


Figura 24 - Visualização do ACD/3D Viewer – Representação *Disks* do TrinitroTolueno

- **With Dots:** Marcado mostra os “pontos” da representação 3D em qualquer forma de visualização (figura 25).

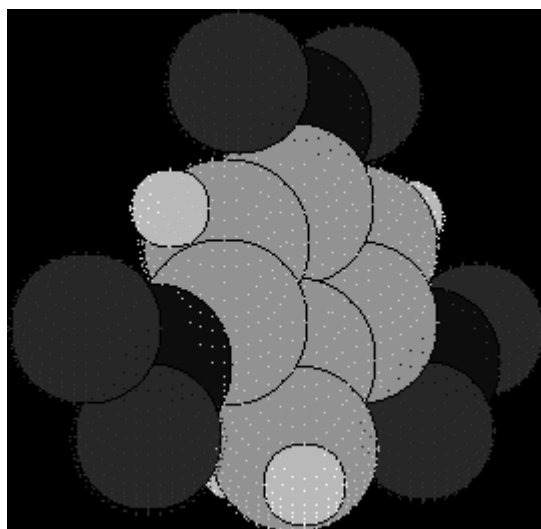


Figura 25 - Visualização do ACD/3D Viewer – Representação *With Dots* do TrinitroTolueno

- **With Dots** combinando com **Balls & Sticks** (figura 26)

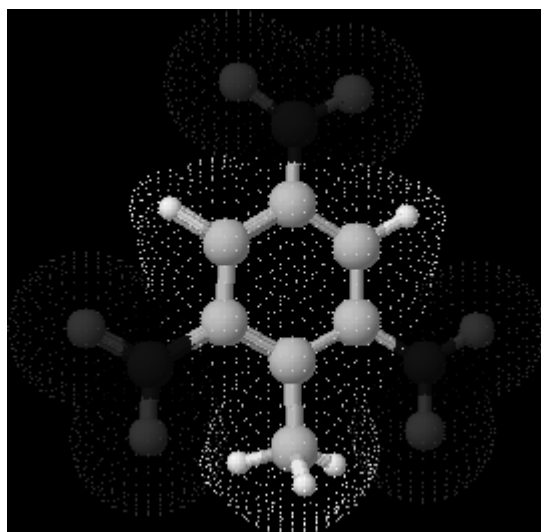


Figura 26 - Visualização do ACD/3D Viewer – Representação *With Dots* e *Balls & Sticks* do Trinitro-Tolueno

O *ChemSketch*® foi escolhido para ser utilizado em situações de ensino por ser um *software* com fácil interação com o usuário, compatível com a maioria de editores de texto existente no mercado e que tem uma ótima capacidade para girar as moléculas, facilitando a visualização da geometria (figura 27).

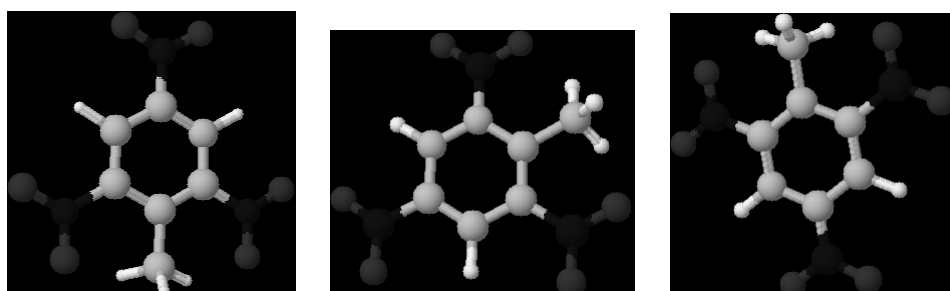


Figura 27 – Seqüência de rotação da molécula do TrinitroTolueno

## GEOMETRIA MOLECULAR – VSEPR

Prever a Geometria Molecular é fundamental para a identificação da polaridade de uma molécula. Esta, por sua vez, permite inferir sobre o tipo e intensidade das interações intermoleculares que podem ser estabelecidas entre moléculas no composto puro, ou com átomos, ou moléculas de outras substâncias. Contudo, a previsão da Geometria Molecular, até de moléculas simples, representa freqüentemente um problema que muitos alunos do Ensino Médio e, por vezes, do superior, não conseguem superar (BIRK; KURTZ, 1999; FURIÓ; CALATAYUD, 1996). Essas dificuldades estão usualmente relacionadas com a suposta

necessidade de determinar, previamente, a estrutura de Lewis (ou a fórmula estrutural) para as moléculas, observando a quantidade de elétrons que cada elemento apresenta no seu nível mais externo.

A discussão mais simples da ligação covalente se baseia no compartilhamento dos pares de elétrons. Isso foi introduzido por Gilbert Lewis, em 1916. Ele propôs que a ligação covalente é formada quando dois átomos vizinhos compartilham um par de elétrons. Um único par de elétrons compartilhados é simbolizado por A–A; ligações duplas, por dois pares ( $A=A$ ) e ligações triplas, por três pares ( $A\equiv A$ ). Pares de elétrons de valência não compartilhados em átomos são denominados pares isolados. Embora esses pares de elétrons isolados não contribuam diretamente para a ligação, eles influenciam na forma da molécula e em suas propriedades químicas.

Segundo Shriver (2003), Lewis percebeu que poderia justificar a existência de um grande número de moléculas, propondo a regra do octeto: *“cada átomo compartilha elétrons com seus vizinhos para atingir um total de oito elétrons de valência”*.

A regra do octeto fornece uma forma simples de construir a estrutura de Lewis, que mostra o padrão de ligações e os pares isolados em uma molécula. Para isso, deve-se proceder da seguinte forma:

- Determinar o número de elétrons que podem ser incluídos na estrutura, somando todos os elétrons de valência fornecidos pelos átomos;
- Escrever os símbolos químicos dos átomos no arranjo, mostrando quais são unidos;
- Distribuir os elétrons em pares, de forma que haja um par de elétrons entre cada par de átomos unidos e, então, acrescentar pares de elétrons até que cada átomo tenha o seu octeto.

A geometria tridimensional das moléculas é determinada pela orientação relativa de suas ligações covalentes. A idéia do modelo VSEPR foi primeiro explorado pelos químicos ingleses Nevil Sidgwick e Herbert Powell em 1940.

Sidgwick e Powell sugeriram ser possível prever a forma aproximada de uma molécula com base no número de pares de elétrons na camada de valência do átomo central, no caso de moléculas que contêm somente ligações simples. O seu

método de previsão tem como base a minimização da repulsão dos pares de elétrons, isto é, a orientação dos orbitais deve ser tal que as distâncias entre elas sejam o maior possível. Segundo eles:

- Dois pares de elétrons mostram um máximo no seu afastamento quando os respectivos orbitais se dispõem linearmente, formando um ângulo de  $180^\circ$ ;
- Moléculas onde o átomo central tem três pares de elétrons na sua camada de valência têm estrutura triangular-planar com ângulos de  $120^\circ$ ;
- No caso de quatro pares de elétrons, a molécula tem a estrutura de um tetraedro. O ângulo de ligação é de  $109^\circ$ ;
- Quando o átomo central apresenta cinco ou seis pares de elétrons, a molécula tem uma estrutura trigonal bipirâmidal (com ângulos de  $120^\circ$  e  $90^\circ$ ) ou uma estrutura de octaedro (com ângulos de  $90^\circ$ ), respectivamente.

Em 1957 o químico Ronald Gillespie, baseando-se em trabalhos prévios de Sidgwick e Powell, criou uma ferramenta muito simples para prever a geometria das moléculas, tendo uma maior exatidão na Geometria Molecular.

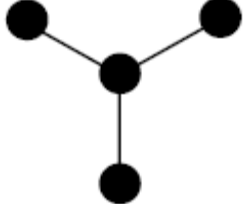
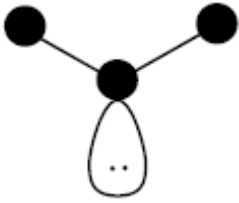
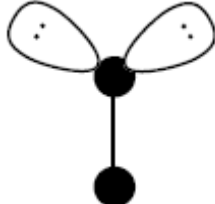
A teoria recebeu o nome de *Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory* (VSEPR) ou Teoria de Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência e se baseia em um simples argumento de que os grupos de elétrons se repelem uns com os outros e a forma adotada pela molécula será aquela em que a repulsão dos grupos eletrônicos seja mínima (GILLESPIE, 2004; GILLESPIE; ROBINSON, 1996).

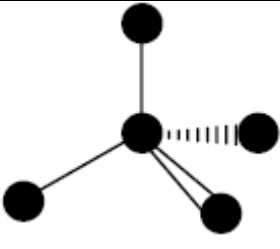
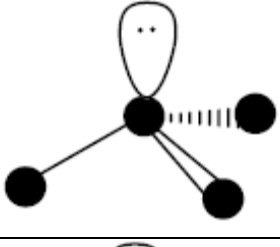
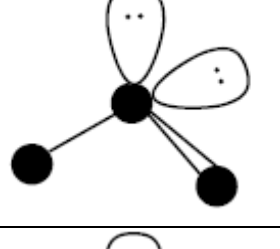
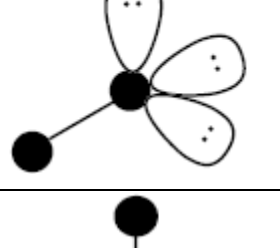
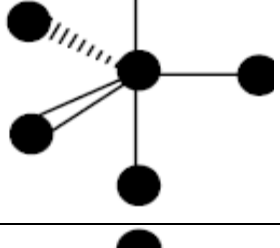
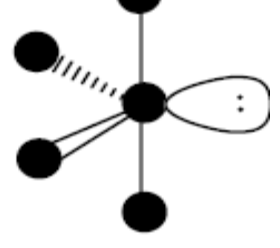
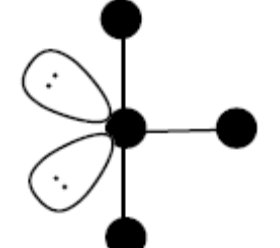
Segundo a Teoria de Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência (VSEPR):

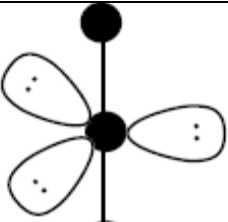
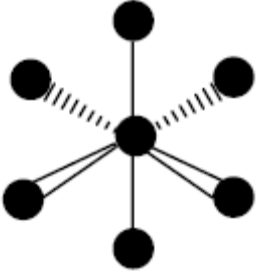
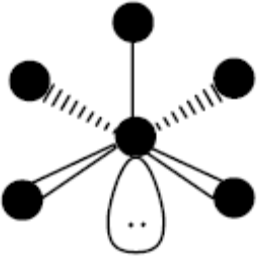
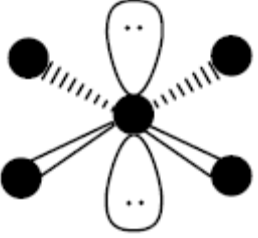
- O arranjo das ligações à volta de um átomo central depende do número de elétrons existentes;
- A forma da molécula é determinada pela repulsão entre todos os pares de elétrons presentes na camada de valência. O arranjo preferencial é aquele em que tem lugar a minimização da repulsão entre as diferentes orbitais (maximização da distância entre elas). Esse aspecto já havia sido introduzido anteriormente por Sidgwick e Powell;

- O par de elétrons livres ocupa maior espaço que um par de elétrons ligantes, pois este último está sujeito à ação de dois núcleos, enquanto o par de elétrons livres tem maior liberdade. A repulsão entre dois pares de elétrons livres é maior que a repulsão entre um par de elétrons livres e um par ligante ou mesmo entre dois pares ligantes. Como consequência, a presença de pares de elétrons livres na molécula força os pares ligantes a ocuparem um menor espaço, aspecto que causa uma distorção dos ângulos ideais da ligação. Na presença de pares de elétrons livres, o ângulo entre pares ligantes passa a ser menor.

Quadro 1 – Tipo de geometria dos pares de elétrons e a geometria da molécula.

| Número total de pares de elétrons em torno do átomo central | Número de Pares Isolados | Geometria dos pares de elétrons | Geometria da molécula | Representação                                                                         |
|-------------------------------------------------------------|--------------------------|---------------------------------|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| 2                                                           | 0                        | Linear                          | Linear                |  |
|                                                             | 1                        | Linear                          | Linear                |  |
| 3                                                           | 0                        | Trigonal Planar                 | Trigonal Planar       |  |
|                                                             | 1                        | Trigonal Planar                 | Angular               |  |
|                                                             | 2                        | Trigonal Planar                 | Linear                |  |

|   |   |                     |                     |                                                                                       |
|---|---|---------------------|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| 4 | 0 | Tetraédrica         | Tetraédrica         |    |
|   | 1 | Tetraédrica         | Piramidal           |    |
|   | 2 | Tetraédrica         | Angular             |    |
|   | 3 | Tetraédrica         | Linear              |   |
| 5 | 0 | Bipirâmide trigonal | Bipirâmide trigonal |  |
|   | 1 | Bipirâmide trigonal | Gangorra            |  |
|   | 2 | Bipirâmide trigonal | Forma "T"           |  |

|   |   |                     |                           |                                                                                       |
|---|---|---------------------|---------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
|   | 3 | Bipirâmide trigonal | Linear                    |    |
| 6 | 0 | Octaedro            | Octaedro                  |    |
|   | 1 | Octaedro            | Pirâmide da base quadrada |   |
|   | 2 | Octaedro            | Quadrado planar           |  |

Segundo Atkins (2006), pode-se descrever o VSEPR:

- Regiões de alta concentração de elétrons ocupam posições que as afastam o máximo possível;
- Todas as ligações se repelem da mesma maneira, independentemente de serem simples, duplas ou triplas;
- A ligação em torno de um átomo central não depende do número de “átomos centrais” da molécula;
- Os pares de elétrons isolados contribuem para a forma da molécula, embora eles não sejam incluídos na descrição da forma molecular;
- Os pares de elétrons isolados exercem uma repulsão maior do que os pares de elétrons de ligação e tendem a comprimir os ângulos de ligação.