



Kent Academic Repository

Oliveira, Aline Alves, Guimarães, Amanda Ribeiro and Vianna, Carlos Alberto Fonseca Jardim (2024) *Ensino de geometria molecular utilizando software: uma proposta de unidade de ensino potencialmente significativa*. Revista Ciências & Idéias . ISSN 2176-1477.

Downloaded from

<https://kar.kent.ac.uk/115840/> The University of Kent's Academic Repository KAR

The version of record is available from

<https://doi.org/10.22407/2176-1477/2024.v15.2444>

This document version

Publisher pdf

DOI for this version

Licence for this version

UNSPECIFIED

Additional information

Versions of research works

Versions of Record

If this version is the version of record, it is the same as the published version available on the publisher's web site. Cite as the published version.

Author Accepted Manuscripts

If this document is identified as the Author Accepted Manuscript it is the version after peer review but before type setting, copy editing or publisher branding. Cite as Surname, Initial. (Year) 'Title of article'. To be published in **Title of Journal** , Volume and issue numbers [peer-reviewed accepted version]. Available at: DOI or URL (Accessed: date).

Enquiries

If you have questions about this document contact ResearchSupport@kent.ac.uk. Please include the URL of the record in KAR. If you believe that your, or a third party's rights have been compromised through this document please see our [Take Down policy](https://www.kent.ac.uk/guides/kar-the-kent-academic-repository#policies) (available from <https://www.kent.ac.uk/guides/kar-the-kent-academic-repository#policies>).

ENSINO DE GEOMETRIA MOLECULAR UTILIZANDO SOFTWARE: UMA PROPOSTA DE UNIDADE DE ENSINO POTENCIALMENTE SIGNIFICATIVA

*TEACHING MOLECULAR GEOMETRY USING SOFTWARE: A PROPOSAL FOR A POTENTIALLY
MEANINGFUL TEACHING UNIT*

*LA ENSEÑANZA DE LA GEOMETRÍA MOLECULAR UTILIZANDO SOFTWARE: UNA PROPUESTA DE
UNIDAD DE ENSEÑANZA POTENCIALMENTE SIGNIFICATIVA*

Aline Alves Oliveira

aline.oliveira67@educacao.mg.gov.br

<https://orcid.org/0000-0001-9605-6276>

Escola Estadual Francisco Escobar, Poços de Caldas, MG

Amanda Ribeiro Guimarães

amd_r_g@hotmail.com

<https://orcid.org/0000-0001-8732-1699>

Departamento de Química Orgânica I, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Donostia/San Sebastián/Spain

Carlos Alberto Fonseca Jardim Vianna

carlos.vianna@ifsuldeminas.edu.br

<https://orcid.org/0000-0001-9768-6296>

Instituto Federal do Sul de Minas, IFSULDEMINAS, campus Poços de Caldas, MG

RESUMO

O ensino de geometria molecular apresenta grandes desafios, uma vez que ele pode estar condicionado, por exemplo, à simples memorização de nomes e estruturas. Para que haja uma aprendizagem significativa desse conteúdo, a utilização de Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC) representa um caminho promissor para que o aluno esteja realmente engajado na aprendizagem. Nesse contexto, com o objetivo de subsidiar o professor de Química, propõe-se uma Unidade de Ensino Potencialmente Significativa (UEPS), apoiada no uso do software Avogadro® para o ensino de geometria molecular nas aulas de Química, no Ensino Médio. A UEPS proposta conta com a Atividade 01, na qual se realiza uma discussão sobre ligações covalentes, comprimento e ângulos de ligação e disposição de moléculas no espaço tridimensional. Já na Atividade 02, serão investigadas as geometrias que caracterizam sete moléculas: H₂O, NH₃, HCl, CH₄, BF₃, PCl₅ e SF₆. Na proposição das atividades, estão incluídas questões norteadoras para que o professor seja capaz de identificar conhecimentos prévios dos alunos e os auxiliem no processo de ampliação dos conhecimentos adquiridos. Ao final da UEPS, são propostas questões para uma percepção da aprendizagem significativa. O material conta, ainda, com um tutorial para uso do software Avogadro® e uma planilha de coleta de dados das simulações. Espera-se que a proposta da UEPS auxilie os docentes na elaboração e na condução das aulas sobre o tema geometria molecular, promovendo a aprendizagem significativa dos discentes.

PALAVRAS-CHAVE: Geometria molecular; UEPS; TDIC.

ABSTRACT

Teaching molecular geometry presents significant challenges, as it can be limited to simple memorization of names and structures. To achieve meaningful learning of this content, using Digital Information and Communication Technologies (DICT) represents a promising approach to engage students in the learning process. Aiming to support Chemistry teachers, this work proposes a Potentially Meaningful Teaching Unit (PMTU) based on the use of Avogadro® software for teaching molecular geometry in high school Chemistry classes. The proposed PMTU includes Activity 01, in which a discussion on covalent bonds, bond lengths, angles, and the arrangement of molecules in three-dimensional space takes place. In Activity 02, the geometries characterizing seven molecules (H₂O, NH₃, HCl, CH₄, BF₃, PCl₅ and SF₆) will be investigated. Guiding questions are included in the activity proposals to help the teacher identify students' prior knowledge and assist them in expanding their

acquired knowledge. At the end of the PMTU, questions are proposed to assess meaningful learning. The material also includes a tutorial for using Avogadro® software and a data collection spreadsheet for simulations. The PMTU proposal is expected to assist teachers in developing and conducting classes on molecular geometry, promoting meaningful learning for students.

KEYWORDS: Molecular Geometry; PMTU; DICT.

RESUMEN

La enseñanza de geometría molecular presenta grandes desafíos, pues puede condicionarse, por ejemplo, a la simple memorización de nombres y estructuras. Para que se tenga un aprendizaje significativo de ese contenido, la utilización de Tecnologías Digitales de Información y Comunicación (TDIC) representa un camino promisor para que el alumno esté realmente comprometido en el aprendizaje. En ese contexto, con el objetivo de ayudar al profesor de Química, se propone una Unidad de Enseñanza Potencialmente Significativa (UEPS), apoyada en el uso del software Avogadro® para la enseñanza de geometría molecular en las clases de Química, en la Enseñanza Media. La UEPS propuesta tiene la Actividad 01, en la cual se realiza una discusión sobre los enlaces covalentes, longitudes y ángulos de enlaces y disposición de moléculas en el espacio tridimensional. Ya en la Actividad 02, serán analizadas las geometrías que caracterizan siete moléculas: H_2O , NH_3 , HCl , CH_4 , BF_3 , PCl_5 y SF_6 . En la proposición de las actividades, están incluidas cuestiones orientadoras, para que el profesor pueda identificar conocimientos previos de los alumnos y los ayuden en el proceso de ampliación de los conocimientos adquiridos. Al final de la UEPS, son propuestas cuestiones para una percepción de aprendizaje significativa. El material tiene, todavía, un tutorial para el uso del software Avogadro® y una hoja de trabajo para la colecta de datos de las simulaciones. Se pretende que la propuesta de la UEPS auxilie los docentes en la elaboración y en la conducción de las clases sobre el tema geometría molecular, propiciando el aprendizaje significativo de los discentes.

PALABRAS CLAVE: Geometría molecular; UEPS; TDIC.

INTRODUÇÃO

O conteúdo de geometria molecular no ensino de Química é um tema de discussão por parte de diferentes pesquisadores que destacam, principalmente, as limitações dos estudantes na compreensão desses conceitos (Martins, Freitas e Vasconcelos, 2020; Almeida e Lima, 2020). Tal situação se torna um desafio para o professor, ao desenvolver assuntos químicos tão complexos, exigindo um elevado grau de abstração por parte dos estudantes, como o caso da estrutura de moléculas. Além disso, muitas vezes o desinteresse pelas aulas nesse componente curricular pode estar associado à falta de correlações com o cotidiano e ao uso apenas de práticas pedagógicas tradicionais, entendidas como aquelas nas quais o ensino é centrado no professor. Portanto, a proposição de novas abordagens no ensino de Química que visem uma aprendizagem efetiva e significativa é fundamental para o envolvimento do aluno nesse processo.

Dentre os diversos conteúdos abordados no ensino de Química, em especial no ensino médio, o estudo da geometria das moléculas é um tema que demanda uma busca por estratégias diferenciadas para o processo de ensino, como evidenciam pesquisas realizadas recentemente, a exemplo de Lorençon (2019), que utilizou um aplicativo como recurso didático no ensino de geometria; Almeida e Lima (2020), ao desenvolverem um holograma como produto educacional para o ensino de geometria molecular, e Souza e colaboradores (2020), apresentando o "Dominó geométrico", como um meio lúdico para a mesma finalidade.

A observação da representação de uma fórmula química, estrutural, em um quadro branco ou no papel, por parte do estudante, sendo necessário, às vezes, imaginar a sua estrutura em três dimensões não é algo simples. Por isso, a utilização de modelos de

representação ou de softwares de visualização tridimensional são recursos que podem facilitar o processo de ensino-aprendizagem desse conteúdo.

Embora se fale sobre a utilização de novas abordagens no ensino de geometria molecular, em especial de softwares de simulação computacional, é fundamental que durante os cursos de formação inicial e continuada de professores de Química esse recurso seja compreendido e explorado. Ramos e Serrano (2011) defendem a introdução de tópicos de modelagem nos cursos de formação, para que o uso desse recurso em sala de aula contribua para uma aprendizagem significativa. A disponibilização de materiais auxiliares direcionados, como sequências didáticas, por exemplo, também pode auxiliar o professor na condução de aulas envolvendo modelagem molecular, de forma que sejam mais interativas e dinâmicas.

Diante do exposto, será desenvolvida uma Unidade de Ensino Potencialmente Significativa (UEPS), seguindo as diretrizes propostas por Moreira (2011), que por sua vez estão embasadas na teoria da Aprendizagem Significativa de David Ausubel (Ausubel, 1968; Moreira, 1982; Moreira, 1999).

A UEPS proposta está apoiada no uso do software Avogadro® (Hanwell, 2012) para a investigação da disposição tridimensional dos átomos e características das ligações nas moléculas de etano, eteno e etino e para o estudo da geometria das moléculas H_2O , NH_3 , HCl , CH_4 , BF_3 , PCl_5 e SF_6 . Trata-se de um software gratuito e de fácil utilização para a construção e a visualização de moléculas. É possível construir moléculas em três dimensões, realizar cálculos como otimização de geometria, fazer medições de comprimentos de ligação e ângulos ou mesmo calcular propriedades dessas moléculas, além de diversas outras funções. Ele está disponível para Windows, Linux e Mac OS X e pode ser configurado para uso em diferentes idiomas, como o português. O acesso ao link para download, bem como o manual do usuário e informações adicionais, está disponível em: <https://two.avogadro.cc/>.

Propõem-se uma UEPS que aborda a análise da geometria molecular de algumas estruturas químicas a partir de simulações computacionais, buscando subsidiar os professores por materiais direcionados, adaptáveis às suas necessidades e práticas de aula, de forma a contribuir para uma aprendizagem significativa desse conteúdo.

REFERENCIAL TEÓRICO

O estudo da Química no Ensino Médio recebe muitas críticas no que diz respeito à sua complexidade, falta de correlações com o cotidiano e exigência de abstrações na compreensão de muitos conceitos. Soma-se a esse fato as atuais mudanças curriculares relativas à implementação do Novo Ensino Médio (NEM), que se iniciaram no ano de 2022, e que trouxeram redução no número de aulas de componentes de Formação Geral Básica, como a Química, por exemplo. Em outras palavras, além dos conteúdos de Química serem complexos, exigindo um maior tempo para a aprendizagem ocorrer de forma efetiva, precisam ser ofertados em um tempo reduzido, o que pode, de alguma forma, comprometer o processo de ensino-aprendizagem.

Portanto, o professor desse componente curricular se depara com grandes desafios para que a aprendizagem seja efetiva. Nesse contexto, a utilização de Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC) abre espaço para novas estratégias de ensino capazes de permitir que os alunos assumam o papel de protagonistas no processo de ensino-aprendizagem, uma vez que contribuem para a motivação dos alunos, para o desenvolvimento da criatividade e de competências tecnológicas (Lorduy, 2020). Dentre as TDIC, destacam-se aquelas que envolvem simulações, jogos, vídeos, dentre outros recursos digitais, que

permitem utilizar representações e modelos que auxiliam para que aconteça uma aprendizagem significativa.

Segundo a teoria da aprendizagem significativa, proposta por David Ausubel, o processo de aprendizagem ocorre quando uma nova informação se relaciona a conceitos prévios já existentes na estrutura cognitiva daquele que aprende, cuja estrutura de conhecimento específica é denominada subsunção. Dessa forma, o conhecimento se constrói através da conexão de conceitos, o que torna a aprendizagem significativa para o indivíduo (Ausubel, 1968; Moreira, 1982; Moreira, 1999).

Dentro da proposta de uma aprendizagem significativa, Moreira (2011) sugere a organização de uma UEPS. Ela se constitui como uma sequência didática fundamentada na aprendizagem significativa, na qual um determinado tema é abordado a partir de atividades que relacionem o conhecimento prévio do estudante aos novos conhecimentos apresentados, de forma que ele seja capaz de compreender de fato os significados e não apenas memorizá-los, além de ser capaz de aplicá-los em situações mais complexas. É importante ressaltar que mesmo usando os melhores materiais em uma UEPS, se o aluno não estiver disposto a aprender, a aprendizagem não será significativa. Por isso, utiliza-se o termo "potencialmente", para enfatizar que o processo de aprendizagem depende também daquele que aprende.

A organização de uma UEPS, segundo Moreira (2011), também deve se basear em oito passos: definição do tema a ser abordado; proposição de situações que levem o aluno a externalizar o seu conhecimento prévio sobre o assunto; proposição de situações-problema em nível introdutório e considerando o conhecimento prévio; apresentação do conhecimento a ser ensinado/aprendido, levando em conta a diferenciação progressiva; retomada de aspectos gerais, mas em nível mais alto de complexidade; conclusão da unidade retomando as características mais importantes, de forma a buscar a reconciliação integrativa e registro de todas as evidências de aprendizagem durante a aplicação da UEPS, além da avaliação do desempenho do aluno. Por fim, caso a avaliação forneça evidências de aprendizagem significativa, tais como a compreensão de significados e a capacidade de explicar e aplicar o conhecimento na resolução de situações-problema, a UEPS será considerada bem-sucedida.

Para proporcionar uma aprendizagem significativa de conceitos da área de Ciências da Natureza, em especial da Química, alguns autores têm desenvolvido UEPS apoiadas em diferentes abordagens metodológicas (Ronch, Zoch e Locatelli, 2015; Locatelli, Santos e Zoch, 2016; Santana, Mazzé e Silva Júnior, 2017; Costa Gomes e Souza, 2023). Para o estudo de estereoquímica cis/trans, por exemplo, Ramos e Serrano (2015) propõem uma UEPS na qual se utiliza a modelagem molecular e se observa a construção de novos significados de forma mais abrangente. Outra abordagem interessante, apresentada por Rockenbach e colaboradores (2020), conta com uma UEPS para o estudo de estereoquímica de compostos presentes em plantas medicinais, na qual uma das atividades propostas envolve o uso de visualização tridimensional de moléculas.

Dentre os diversos conceitos abordados no ensino da Química, o estudo do tema geometria molecular possibilitaria o desenvolvimento das seguintes habilidades, elencadas na BNCC, Base Nacional Comum Curricular (Brasil, 2018):

(EM13CNT302) Comunicar, para públicos variados, em diversos contextos, resultados de análises, pesquisas e/ou experimentos – interpretando gráficos, tabelas, símbolos, códigos, sistemas de classificação e equações, elaborando textos e utilizando diferentes mídias e tecnologias digitais de informação e comunicação (TDIC), de modo a promover debates em torno de temas científicos e/ou tecnológicos de relevância sociocultural (Brasil, 2018, p. 545).

(EM13CNT301) Construir questões, elaborar hipóteses, previsões e estimativas, empregar instrumentos de medição e representar e interpretar modelos explicativos, dados e/ou resultados experimentais para construir, avaliar e justificar conclusões no enfrentamento de situações problema sob uma perspectiva científica (Brasil, 2018, p. 559).

Entretanto, o estudo da geometria molecular é abordado, muitas vezes, apenas com representações no quadro ou em materiais impressos, o que pode dificultar a compreensão da forma assumida pelas substâncias segundo as suas estruturas bi e tridimensionais, dificultando, também, o desenvolvimento das habilidades previstas na BNCC.

Diante dessa problemática, muitos professores têm buscado utilizar modelos tridimensionais para que o aluno possa realmente compreender os conceitos associados à geometria das moléculas (Jesus e Nunes, 2023; Martins, Freitas e Vasconcelos, 2019; Setti, Gibin e Ferreira, 2019). O trabalho desenvolvido por Martins, Freitas e Vasconcelos (2020), por exemplo, relata a utilização de materiais alternativos em uma aula sobre geometria molecular. Os alunos receberam bolas de isopor de diferentes tamanhos para representar os átomos e palitos de dente para representar as ligações covalentes. De posse do material, os alunos constroem os modelos tridimensionais das moléculas indicadas pelo professor. Os alunos relataram uma melhor compreensão dos conceitos a partir da utilização dos modelos tridimensionais, o que contribuiu para que a aprendizagem ocorresse de forma efetiva.

A busca por objetos de aprendizagem capazes de auxiliar nas aulas de Química, em especial quando se aborda a questão da geometria molecular, também conta com a disponibilidade de programas computacionais, aplicativos e simuladores capazes de permitir a visualização tridimensional de moléculas. O uso de TDIC no estudo de geometria molecular tem contribuído para que o aluno desperte maior interesse no assunto e para que a aprendizagem se torne significativa. Existem diversos softwares, aplicativos e plataformas de uso livre que auxiliam o professor nesse processo, dentre os quais pode-se citar o simulador Geometria Molecular, implementado na plataforma PhET, e o software Avogadro® (Alves, Pontes e Lima-Júnior, 2021; Santos, Cirino e 2021; Ferreira, 2021).

Quando se fala na utilização de softwares de modelagem molecular no ensino de Química, é importante destacar que os professores da área nem sempre possuem domínio do uso dessas tecnologias, exceto quando tais recursos são apresentados durante cursos de formação inicial ou continuada. Por isso, é importante a proposição e divulgação de materiais de suporte que possam ser utilizados de forma prática nas aulas desses professores. A proposição de sequências didáticas para o ensino de geometria molecular utilizando softwares de modelagem molecular requer também a proposição de um material didático prático e detalhado, capaz de auxiliar o professor na condução das aulas.

Partindo desses pressupostos, propõe-se uma UEPS com o tema geometria molecular para ser empregada nas aulas de Química do Ensino Médio, de forma que a utilização de modelos tridimensionais de moléculas, construídos no software Avogadro®, possa contribuir para uma aprendizagem significativa e que aconteça de forma mais dinâmica e atrativa.

METODOLOGIA

A UEPS sobre geometria molecular proposta é apoiada no uso do software Avogadro®, versão 1.97.0 (Hanwell *et al.*, 2012), no qual os alunos poderão investigar a disposição tridimensional dos átomos e características das ligações nas moléculas de etano, eteno e etino. Além disso, o software será utilizado no estudo da geometria das moléculas de água (H₂O),

amônia (NH_3), cloreto de hidrogênio (HCl), metano (CH_4), trifluoreto de boro (BF_3), pentacloreto de fósforo (PCl_5) e hexafluoreto de enxofre (SF_6).

O professor que desejar usufruir da UEPS proposta poderá desenvolver e executar a unidade em quatro aulas de 50 minutos cada, todas sendo conduzidas em uma sala com acesso a computadores. A UEPS está dividida em Atividade 01 e Atividade 02, seguidas por sugestões de questões para uma percepção da aprendizagem significativa.

A UEPS poderá ser utilizada nas aulas do componente curricular Química no Ensino Médio ou mesmo aulas de itinerários formativos de Ciências da Natureza, nas escolas em que haja disponibilidade de computadores, nos quais tenha sido instalado o software Avogadro®.

As atividades propostas incluem o preenchimento de uma planilha de coleta de dados cujo modelo está disponível no endereço: <https://drive.google.com/drive/folders/1FBQ-q95hZ6iV-X-liHTqSJaoIGshM1r?usp=sharing>. No mesmo endereço está disponibilizado também um tutorial para o uso das ferramentas principais do software Avogadro®, necessário para o desenvolvimento das atividades propostas.

Além de considerar os princípios de uma UEPS, como a valorização do conhecimento prévio do aluno, a proposição de situações-problema que avancem em nível de complexidade e a busca pela construção dos conceitos de forma contrária à simples memorização, dentre outros aspectos, a UEPS proposta foi construída considerando também os oito passos sugeridos por Moreira (2011). No Quadro 1 é apresentada a correspondência entre tais passos e as atividades que compõem a UEPS proposta.

Quadro 1: Passos de uma UEPS sugeridos por Moreira (2011) e a UEPS proposta

Passos da UEPS segundo Moreira (2011)		UEPS proposta
Passo 1	Definição do tema a ser abordado	As atividades foram propostas para o estudo do tema geometria molecular. Dentro dessa temática podem ser abordados conceitos sobre as ligações químicas e as suas características, além da análise da disposição tridimensional de moléculas
Passo 2	Proposição de situações que levem o aluno a externalizar o seu conhecimento prévio sobre o assunto	Discussão a partir das questões norteadoras sugeridas na Atividade 01 e levantamento dos principais conceitos apresentados pelos alunos (utilização da lousa)
Passo 3	Proposição de situações-problema em nível introdutório e considerando o conhecimento prévio	Desenvolvimento da Atividade 01 para o estudo das ligações químicas das moléculas de etano, eteno e etino
Passo 4	Apresentação do conhecimento ensinado/aprendido, levando em conta a diferenciação progressiva	Aula expositiva dialogada sugerida para a introdução da Atividade 02
Passo 5	Retomada de aspectos gerais, mas em nível mais alto de complexidade	Desenvolvimento da Atividade 02 para o estudo da geometria das moléculas selecionadas
Passo 6	Conclusão da unidade retomando as características mais importantes, de forma a buscar a reconciliação integrativa	Discussão a partir das questões norteadoras sugeridas após a coleta de dados da Atividade 02
Passo 7	Registro de todas as evidências de aprendizagem durante a aplicação da UEPS, além da avaliação do	Acontecerá durante a aplicação da UEPS, seja por registros feitos pelo professor, a partir das discussões levantadas, ou mesmo pela coleta

	desempenho do aluno	de informações realizadas pelos alunos durante as simulações
Passo 8	A UEPS será considerada bem-sucedida caso a avaliação forneça evidências de aprendizagem significativa, tais como a compreensão de significados e a capacidade de explicar e aplicar o conhecimento na resolução de situações-problema	As evidências de aprendizagem poderão ser percebidas nas discussões levantadas a partir das questões norteadoras, além dos resultados entregues pelos alunos durante a realização das simulações

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023

RESULTADOS E ANÁLISES

A UEPS proposta está organizada em duas atividades sequenciais, finalizando com uma avaliação. A Atividade 01 tem por objetivo identificar conceitos prévios sobre ligações covalentes e ampliar o conhecimento ao abordar cálculos de comprimento de ligações. Além disso, o desenvolvimento dela permitirá ao aluno compreender a distribuição espacial dos átomos de uma determinada molécula. Na sequência, a Atividade 02 aborda o estudo da geometria de moléculas contendo átomos centrais e átomos ligantes, além de permitir aos alunos compreenderem as características de cada ligação química em particular. Ao final, são propostas algumas questões para a verificação da aprendizagem.

Retomando o conceito de ligação covalente - Atividade 01

Uma ligação química representa a junção de dois átomos e o arranjo resultante tem menor energia do que se forem considerados os átomos isolados. Quando ocorre a transferência completa de um ou mais elétrons de um átomo para outro, há formação de íons de cargas opostas, os cátions e os ânions. A atração eletrostática entre esses íons permite a formação de uma ligação de caráter iônico. Já quando um par de elétrons é compartilhado entre dois átomos, diz-se que a ligação possui caráter covalente e o composto formado pode ser denominado molécula. Por fim, no caso em que cátions metálicos são mantidos juntos por um mar de elétrons, observa-se a formação de ligação metálica (Fonseca, 2016; Atkins e Jones, 2012).

A proposição da formação de ligações covalentes nos compostos químicos foi desenvolvida por Lewis, em 1916, que afirmava que na formação de uma ligação covalente os átomos tendem a completar os seus octetos a partir do compartilhamento de pares de elétrons. Segundo esse modelo, quando um par de elétrons é compartilhado entre dois átomos, tem-se uma ligação simples. Quando são compartilhados dois pares de elétrons, tem-se uma ligação dupla, e quando há o compartilhamento de três pares de elétrons entre dois átomos, forma-se uma ligação tripla (Fonseca, 2016; Atkins e Jones, 2012).

Dentre as propriedades das ligações químicas, o comprimento de ligação no equilíbrio em uma molécula consiste na distância entre os núcleos dos dois átomos ligados. Para determinar esses valores, são utilizadas técnicas como difração de raios X em sólidos ou espectroscopia na região do infravermelho ou de micro-ondas para moléculas na fase gasosa (Shriver *et al.*, 2008). Com isso, na literatura são disponibilizadas informações precisas sobre comprimentos de ligações, que são utilizadas nos cálculos realizados em softwares de modelagem molecular.

Com o propósito de identificar os conhecimentos prévios trazidos pelos alunos sobre as ligações químicas, o professor conduzirá durante a aula alguns questionamentos para a turma. A partir das respostas dos alunos, o professor deverá colocar na lousa os principais conceitos

levantados pelos alunos, fazendo intervenções que forem necessárias. A seguir, são propostas algumas questões norteadoras:

- a) O que são ligações químicas covalentes?
- b) Quais os tipos de ligações covalentes existentes?
- c) Quais tipos de elementos químicos estão envolvidos nas ligações covalentes?
- d) Dê exemplos de compostos formados por ligações covalentes e explique como seriam representados a partir das fórmulas estruturais.

Após a discussão e a retomada dos conceitos básicos sobre ligações covalentes, o professor deverá investigar se os alunos apresentam algum conhecimento sobre comprimento de ligação, a partir da representação na lousa de três compostos orgânicos: etano, eteno e etino (Figura 1).

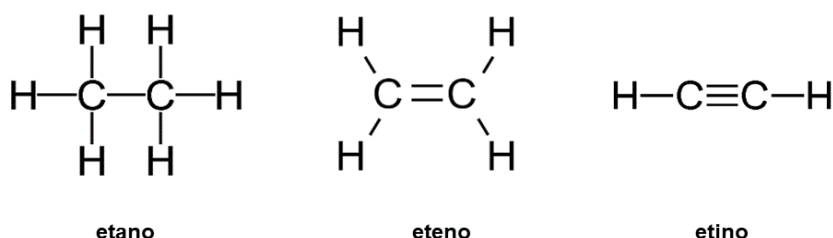


Figura 1: Estrutura química das moléculas etano, eteno e etino

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

O professor poderá realizar os seguintes questionamentos:

- a) O que seria o comprimento de uma ligação química?
- b) Como poderiam ser medidos os comprimentos de ligações covalentes?
- c) Existe alguma diferença no comprimento das ligações simples, duplas e triplas?

Nesta fase, espera-se que os alunos ainda demonstrem dificuldades em estabelecer relações concretas entre tipos de ligação química e comprimentos de ligação. Por isso, o professor deverá sugerir aos alunos que realizem um processo investigativo para conhecer mais sobre as ligações covalentes. Conforme já mencionado na seção de Metodologia, foi disponibilizado um tutorial para a realização da proposta de Atividade 01, bem como a planilha de coleta de dados, na qual os alunos deverão inserir os resultados obtidos durante as simulações para posterior encaminhamento ao professor.

Para iniciar as simulações da Atividade 01, o professor deverá projetar a tela inicial do software Avogadro® e explicar o funcionamento dele aos alunos, iniciando com a construção da molécula de etano, seguida da otimização da geometria para que a molécula seja representada na sua forma de menor energia, conforme apresentado na Figura 2. Nesse momento, o professor deverá questionar os alunos sobre o processo de otimização da geometria e fazer intervenções necessárias: "Por que a molécula de etano encontrou uma nova conformação após o comando de otimização de geometria?"

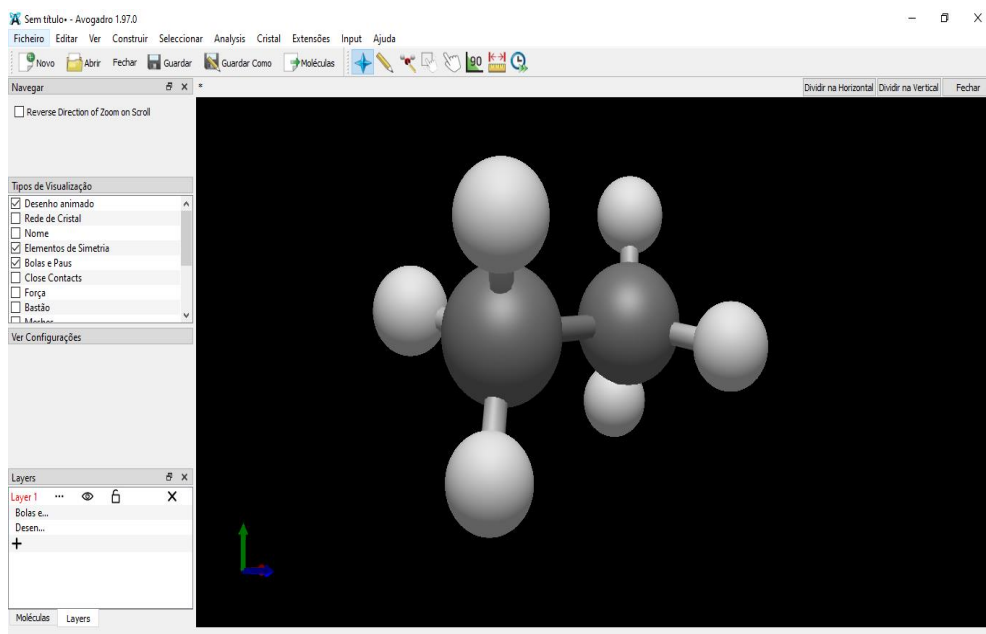


Figura 2: Representação da molécula de etano após otimização no software Avogadro®

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

Em seguida, o professor deverá explicar aos alunos como se determina o comprimento de uma ligação química a partir das ferramentas de medição disponíveis no software (Figura 3) e solicitará que os alunos iniciem o preenchimento da planilha de coleta de dados, na qual consta o Quadro 2. O professor deverá investigar quais conhecimentos os alunos possuem sobre unidades de medida de comprimento, em especial o angstrom ($\text{\AA}$), e fazer intervenções que forem necessárias para a compreensão dessa unidade de medida.

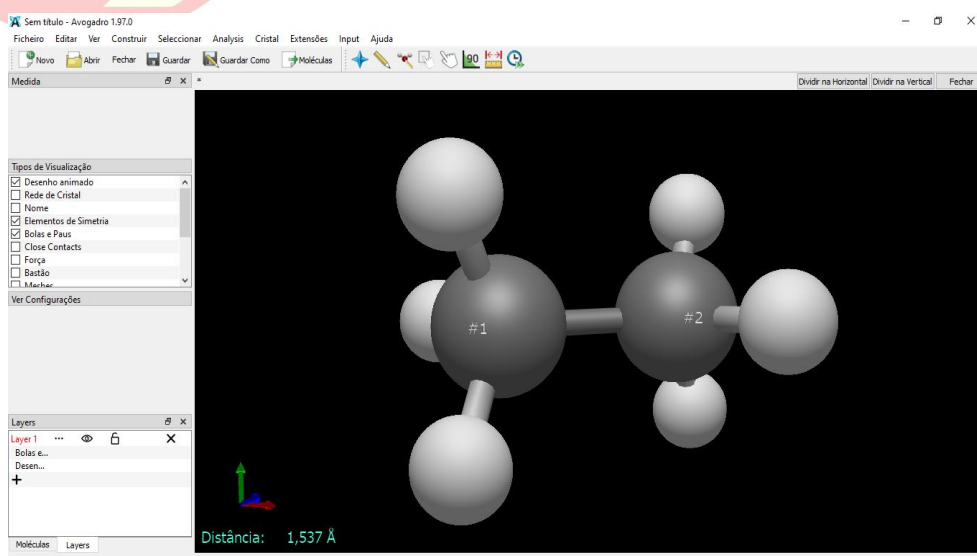


Figura 3: Determinação do comprimento de ligação entre átomos de carbono na molécula de etano utilizando o software Avogadro®

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

Quadro 2: Análise de comprimentos e ângulos de ligação das moléculas etano, eteno e etino

Moléculas	Número total de átomos de carbono	Número total de átomos de hidrogênio	Fórmula molecular	Tipo de ligação covalente formada entre átomos de carbono	Comprimento da ligação entre átomos de carbono (Å)	Comprimento da ligação entre um átomo de carbono e um átomo de hidrogênio diretamente ligado a ele (Å)
etano						
eteno						
etino						

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

Após o preenchimento dos dados sobre o etano, o professor deverá explicar aos alunos como inserir uma ligação dupla para a construção da molécula de eteno. Novamente, o docente deverá solicitar aos alunos que realizem a otimização da geometria, seguida da coleta de informações sobre o comprimento das ligações. Para finalizar, o professor deverá solicitar aos alunos que construam a molécula de etino, otimizem a geometria, realizem as medições e preencham a planilha de coleta de dados.

Finalizada a coleta de dados da Atividade 01, o docente poderá realizar uma discussão sobre as informações obtidas, utilizando as seguintes questões norteadoras:

- Qual é a relação entre o comprimento das ligações entre átomos de carbono e o tipo de ligação covalente?
- Por que o comprimento de ligação entre um átomo de carbono e um átomo de hidrogênio se difere do comprimento de ligação entre átomos de carbono de uma mesma molécula?
- Qual a importância de se realizar a otimização da geometria de uma molécula?
- Quando se faz a representação tridimensional de uma molécula, quais informações adicionais podem ser obtidas e que não seriam visualizadas utilizando apenas a fórmula estrutural?

Para a realização da Atividade 01 são previstas 2 aulas de 50 minutos cada, para que o professor tenha tempo suficiente para ajudar os alunos nesse primeiro contato com o software Avogadro® e sanar todas as dúvidas que surgirem ao longo do processo. Sugere-se que o professor identifique ao longo da atividade alunos com maior facilidade na utilização do software, para que se tornem monitores na atividade seguinte, ajudando os colegas durante o processo.

Investigando a geometria de moléculas de 2 a 7 átomos - Atividade 02

Uma vez que os alunos tiveram contato com representações tridimensionais das moléculas de etano, eteno, etino, discutiram e analisaram o comprimento de diferentes ligações covalentes, a próxima etapa consiste na investigação da geometria adotada por moléculas contendo átomos centrais e átomos ligantes. Para a realização da Atividade 02 são previstas 2 aulas de 50 minutos cada.

O modelo da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência (modelo RPECV) considera que as regiões de maior densidade eletrônica, pares de elétrons ligantes ou pares isolados, assumem posições de maior separação possível, de forma a minimizar a repulsão entre elas. Entretanto, o nome da geometria adotada pela molécula é determinado pelo arranjo

dos átomos e não pela distribuição das regiões de densidade eletrônica (Shriver *et al.*, 2008). A molécula de água, por exemplo, apresenta um arranjo tetraédrico para os pares de elétrons, ligantes e isolados, mas a sua geometria é angular. As geometrias do tipo linear, angular, trigonal plana, piramidal, tetraédrica, bipiramidal e octaédrica são exemplos de formas moleculares básicas adotadas por algumas moléculas (Figura 4).

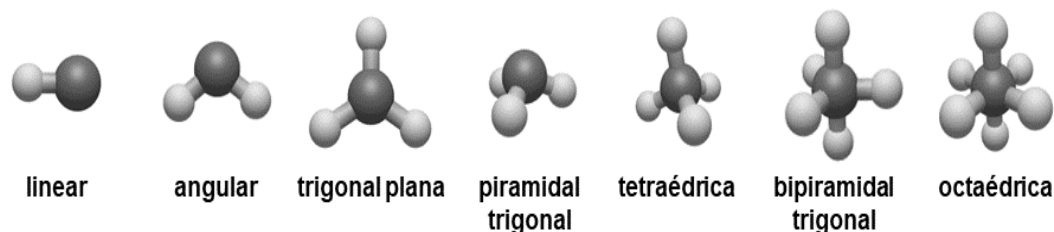


Figura 4: Formas moleculares básicas para moléculas contendo de 2 a 7 átomos

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

Antes de iniciar a Atividade 02, o professor deverá colocar na lousa as fórmulas estruturais das seguintes moléculas: H_2O , NH_3 , HCl , CH_4 , BF_3 , PCl_5 , SF_6 , conforme a Figura 5. Em seguida, o docente perguntará aos alunos o que eles esperam da disposição tridimensional dessas moléculas e colocará na lousa os comentários dos alunos para cada estrutura. Os estudantes serão convidados então a investigar se as suas expectativas condizem com os resultados a serem obtidos.

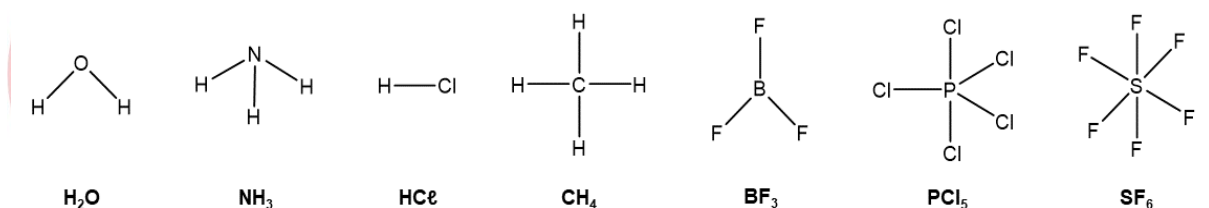


Figura 5: Fórmulas estruturais das moléculas H_2O , NH_3 , HCl , CH_4 , BF_3 , PCl_5 , SF_6

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

Inicialmente, os alunos deverão construir, uma a uma, cada uma das moléculas propostas e realizar a otimização de geometria (Figura 6). O professor poderá apenas acompanhar os alunos nos computadores, mas se for preciso, poderá projetar a tela do software e fazer as intervenções necessárias para o uso dele.

Uma vez que os alunos fizeram a investigação tridimensional das moléculas, o professor poderá iniciar uma explanação sobre geometria molecular, projetando a imagem das formas moleculares básicas para moléculas contendo átomos centrais e átomos ligantes (Figura 4), para que os alunos sejam capazes de identificar as geometrias adotadas pelas moléculas que estão investigando.

Em seguida, ele deverá solicitar aos alunos que preencham a planilha de coleta de dados para a Atividade 02, conforme o Quadro 3. Será necessário orientar os alunos em relação aos ângulos de ligação presentes nas moléculas de PCl_5 e SF_6 , uma vez que podem ser obtidas diferentes medições de acordo com os átomos que podem ser selecionados.

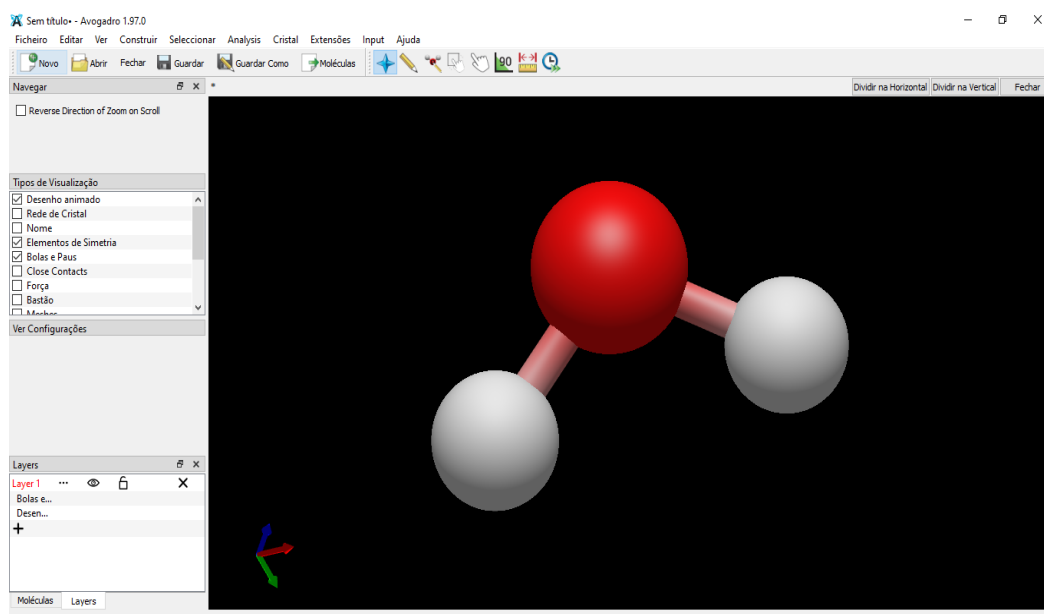


Figura 6: Representação da molécula de água após otimização no software Avogadro®

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023.

Quadro 3: Estudo da geometria molecular de moléculas contendo de 2 a 7 átomos

Moléculas	Comprimento de ligação (Å)		Ângulo de ligação (°)	Geometria Molecular
H₂O	O-H		HOH	
NH₃	N-H		HNH	
HCl	H-Cl		—	
CH₄	C-H		HCH	
BF₃	B-F		FBF	
PCl₅	P-Cl		ClPCl	
SF₆	S-F		SFS	

Fonte: Elaborada pelos autores, 2023

Finalizada a coleta de dados, o professor iniciará a discussão dos resultados obtidos nas simulações. Ele poderá utilizar as seguintes questões norteadoras:

a) Quais fatores contribuíram para que as moléculas adotassem a geometria apresentada?

b) O que pode contribuir para que os comprimentos e ângulos de ligação sejam diferentes de uma molécula para outra?

c) Em relação à molécula de água, por que ela apresenta geometria angular e não geometria linear?

d) Por que as moléculas NH₃ e BF₃ apresentam geometrias diferentes, já que possuem o mesmo número de átomos ligados ao átomo central?

Durante a discussão dessas questões, o professor deverá retomar conceitos sobre eletronegatividade para a explicação das diferenças nos comprimentos de ligação, bem como apresentar aos alunos o modelo RPECV para explicar a geometria adotada pelas moléculas. Nesse momento, o professor poderá projetar a tela do software, construir e otimizar molécula por molécula explicando a geometria adotada por ela. Dessa forma, o professor realizará uma sistematização do conhecimento construído durante a realização da atividade.

Proposta de percepção da aprendizagem significativa

Ao final das atividades desenvolvidas, o professor que se apropriar da UEPS poderá realizar alguns questionamentos gerais para auxiliar na percepção da aprendizagem significativa. São sugeridas questões como:

- a) Quais fatores podem influenciar no comprimento de uma ligação covalente?
- b) Qual a função da otimização da geometria no estudo das moléculas?
- c) O que pode influenciar na geometria de uma molécula?
- d) Como o uso do software Avogadro® contribuiu para o seu aprendizado sobre geometria molecular?

Entretanto, é importante que o professor retome ao longo do Ensino Médio os conceitos abordados nessa UEPS, com o propósito de verificar se a aprendizagem aconteceu de forma mecânica ou se, realmente, foi significativa. Nesse processo, o docente poderá utilizar diferentes instrumentos de avaliação, ao abordar novos conceitos que requerem conhecimentos prévios sobre geometria molecular. Por exemplo, ao iniciar o estudo de representações de moléculas na Química Orgânica, o professor pode investigar os conhecimentos construídos sobre a disposição tridimensional das moléculas, permitindo a verificação das aprendizagens consolidadas a partir da realização da UEPS sobre geometria molecular.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A UEPS apresentada considera os conhecimentos prévios trazidos pelos alunos, bem como contribui para que novas conexões e conhecimentos sejam estabelecidos e aprofundados. Além disso, propõe aos alunos atividades investigativas que utilizam as TDIC de forma a despertar seu interesse e participação real no processo, concordando, portanto, com as características de UEPS evidenciadas por Moreira (2011).

O material pode ser utilizado integralmente pelos professores ou adaptado à sua realidade de prática, de acordo com o seu planejamento de aula e de ensino, independentemente da sua familiaridade com o uso de softwares de simulação, uma vez que a UEPS apresentada é acompanhada por um tutorial de uso e uma planilha para coleta de dados.

Analisando as ideias observadas em Kaplun (2003, p. 46), que aborda sobre as características de um material educativo, tratado como um "objeto que facilita a experiência de aprendizado, em determinado contexto", espera-se que a UEPS proposta seja capaz de ampliar os conhecimentos sobre estrutura molecular, o que poderá levar os estudantes a compreenderem a geometria das moléculas, além do estudo de características das ligações químicas, encaminhando diversas possibilidades, dentre as quais a aprendizagem significativa de novos conceitos.

Pode-se, ainda, ampliar a UEPS sugerida incluindo o estudo de moléculas orgânicas, sejam fármacos, agrotóxicos, hormônios, dentre outras classes, o que pode encaminhar a construção de conhecimentos úteis ao estudo de conceitos da Química Orgânica no Ensino Médio.

O software Avogadro® apresenta outros recursos para análise de moléculas, a exemplo da geração de mapas de potencial eletrostático e do cálculo de cargas parciais. Assim, é possível inserir outros cálculos para o desenvolvimento de outras atividades que forem necessárias.

Agradecimentos

Agradecemos ao Instituto Federal do Sul de Minas e à Escola Estadual Francisco Escobar, Poços de Caldas, MG. Agradecemos à European Commission (MSCA-IF-101026616).

REFERÊNCIAS

ALMEIDA, Glayton Batista de; LIMA, José Ossian Gadelha de. Elaboração de Holograma para o Ensino de Geometria Molecular. **ENCITEC**, Ensino de Ciências e Tecnologia em Revista, v. 10, n. 1, p. 73-87, 2020.

ALVES, Breno Xavier Porto; PONTES, Liliana Fátima Bezerra Lira; LIMA-JUNIOR, Claudio Gabriel. Uso do aplicativo "moléculas" para o ensino de geometria molecular: uma abordagem na perspectiva do mobile learning. **Scientia Naturalis**, v. 3, n. 4, 2021.

ATKINS, Peter; JONES, Loretta. **Princípios de química**: questionando a vida moderna e o meio ambiente. Tradução de Ricardo Bicca de Alencastro. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.

AUSUBEL, David. **Educational psychology**: a cognitive view. Nova York: Holt, Rinehart and Winston: 1968.

BRASIL. Ministério da Educação. **Base Nacional Comum Curricular**. Brasília, 2018.

COSTA GOMES, Duliane da; SOUZA, Katiúscia dos Santos de. Unidades de Ensino Potencialmente Significativas (UEPS) e a aprendizagem da oxirredução. **REAMEC-Rede Amazônica de Educação em Ciências e Matemática**, v. 11, n. 1, p. e23004, 2023.

FERREIRA, Wellington de Souza. Análise da aplicação do software educacional: Avogadro como ferramenta didática no ensino de Química. **International Journal Education and Teaching (PDVL)**, v. 4, n. 2, p. 52-67, 2021.

FONSECA, Martha Reis Marques da. **Química**: ensino médio. 2. ed. São Paulo: Ática, 2016.

HANWELL, Marcus D.; CURTIS, Donald E.; LONIE, David C.; VANDERMEERSCH, Tim; ZUREK, Eva; HUTCHISON, Geoffrey R. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. **Journal of Cheminformatics**, v. 4, p. 17, 2012.

JESUS, Weslei Oliveira de; NUNES, Simara Maria Tavares. Construindo aprendizagens por meio de uma sequência didática: uma experiência no ensino de Geometria Molecular. **Revista Insignare Scientia-RIS**, v. 6, n. 2, p. 274-297, 2023.

KAPLÚN, Gabriel. Material educativo: a experiência de aprendizado. **Comunicação & Educação**, n. 27, p. 46-60, 2003.

LOCATELLI, Aline; SANTOS, Karine de Freitas dos; ZOCH, Alana Neto. Unidade de ensino potencialmente significativa para o ensino de química orgânica, abordando atemática dos agrotóxicos. **Revista Amazônica de Ensino de Ciências**, v. 9, n. 18, p. 158-172, 2016.

FLÓREZ, Danny José Lorduy; ZULUAGA, Claudia Patricia Naranjo. Tecnologias de informação e comunicação aplicadas ao ensino de ciências. **Praxis & Saber**, v. 11, n. 27, p. 1-16, 2020.

LORENÇON, Rubia. **Uso de aplicativo como recurso didático para o ensino de geometria molecular**. Orientador: Henry Charles Brandão. 2019. 68f. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Química) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Medianeira, 2019.

SANTOS, Anne Catherine da Luz dos; CIRINO, Marcelo Maia. Ensino de Geometria Molecular com App de simulação digital: possíveis contribuições para uma aprendizagem significativa. **Ensino & Multidisciplinaridade**, v. 5, n. 2, p. 36-52, 2021.

MARTINS, Malena Gomes; FREITAS, Geraldo Fernando Gonçalves de; VASCONCELOS, Pedro Hermano Menezes de. A dificuldade dos alunos na visualização de moléculas em três dimensões no ensino de geometria molecular. **Conexões - Ciência e Tecnologia**, v. 14, n. 3, p. 45-53, 2020.

MOREIRA, Marco Antonio. **Teorias de aprendizagem**. São Paulo: Editora Pedagógica e Universitária, 1999.

MOREIRA, Marco Antonio. Unidades de enseñanza potencialmente significativas - UEPS. **Aprendizagem Significativa em Revista**, v. 1, n. 2, p. 43-63, 2011.

MOREIRA, Marco Antonio; MASINI, Elcie Fortes Salzano. **Aprendizagem significativa: a teoria de David Ausubel**. Centauro: São Paulo, 1982.

RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Modelagem Molecular no Ensino de Ciências: Uma revisão da literatura no Período 2001-2011 acerca da sua aplicabilidade em atividades de ensino. **Acta Scientiae**, v. 15, n. 2, p. 363-382, 2013.

RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Uma proposta para o ensino de estereoquímica cis/trans a partir de uma unidade de ensino potencialmente significativa (UEPS) e do uso de modelagem molecular. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 10, n. 3, p. 94-106, 2015.

ROCKENBACK, Lara Colvero; RAUPP, Daniele Trajano; CAMPO, Leandra Franciscato; REPPOLD, Danielle Prazeres. Estereoquímica em plantas medicinais: uma proposta de unidade de ensino potencialmente significativa para o ensino médio. **REPPE-Revista de Produtos Educacionais e Pesquisas em Ensino**, v. 4, n. 1, p. 49-75, 2020.

RONCH, Sthefen Fernando Andrade da; ZOCH, Alana Neto; LOCATELLI, Aline. Aplicação da Unidade de Ensino Potencialmente Significativa (UEPS) para introdução dos conteúdos de química e biologia no ensino médio. **Revista Polyphonia**, v. 26, n. 2, p. 129-142, 2015.

SANTANA, Iany Silva de; MAZZÉ, Fernanda Marur; SILVA JÚNIOR, Carlos Neco da. Água como tema gerador em uma unidade de ensino potencialmente significativa para abordar conceitos químicos. **Aprendizagem Significativa em Revista**, v. 7, n. 3, p. 20-42, 2017.

SETTI, Grazielle de Oliveira; GIBIN, Gustavo Bizarria; FERREIRA, Luiz Henrique. Ensino de geometria molecular por meio do uso de modelo físico construído com materiais recicláveis e de baixo custo. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 14, n. 2, p. 542-557, 2019.

SHRIVER, Duward *et al.* **Química inorgânica**. Tradução de Roberto de Barros Faria. 4. ed. Porto Alegre: Bookman, 2008.

SOUZA, Kauany Andressa de Oliveira *et al.* "Dominó geométrico": uma ferramenta lúdica para o ensino de química sobre geometria dos pares de elétrons e geometria molecular. **Scientia Naturalis**, v. 2, n. 1, p. 293-311, 2020.



Revista
Ciências & Ideias