



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA – UFPB
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA – CCEN
CURSO DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – LICENCIATURA

JOSÉ ALBERTO MAIA NETO

**O USO DOS PROGRAMAS TOPISO3D *VIEWER* E MOLVIEW COMO
FERRAMENTAS DE ENSINO PARA A COMPREENSÃO DA LIGAÇÃO
QUÍMICA PARA ALUNOS DO ENSINO SUPERIOR**

João Pessoa – PB

2023

JOSÉ ALBERTO MAIA NETO

**O USO DOS PROGRAMAS TOPISO3D VIEWER E MOLVIEW COMO
FERRAMENTAS DE ENSINO PARA A COMPREENSÃO DA LIGAÇÃO
QUÍMICA PARA ALUNOS DO ENSINO SUPERIOR**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal
da Paraíba, como requisito parcial para a obtenção do título
de Licenciado em Química.

Área de concentração: Ensino de Química

Orientador: Prof^o. Dr. Ary da Silva Maia

João Pessoa – PB

2023

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

M217u Maia Neto, José Alberto.

O uso dos programas Topiso3D Viewer e Molview como ferramentas de ensino para a compreensão da ligação química para alunos do ensino superior / José Alberto Maia Neto. - João Pessoa, 2023.

59 p. : il.

Orientação: Ary da Silva Maia.

TCC (Curso de Licenciatura em Química) - UFPB/CCEN.

1. Ligação química. 2. Ensino de química. 3. TIC's. 4. DFT. 5. TopIso3D Viewer. I. Maia, Ary da Silva. II. Título.

UFPB/CCEN

CDU 54(043.2)



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
COORDENAÇÃO DOS CURSOS DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Ata da sessão de defesa de Trabalho de Conclusão de Curso para obtenção do grau de Licenciado em Química do(a) discente José Alberto Maia Neto,

matrícula nº 11325915, realizada aos 10 (dez) dias do mês de novembro de 2023, às 14 h 00 min. Reuniram-se no(a) Auditório do NPE-LACOM, UFPB, Campus I, João Pessoa, os membros da Banca Examinadora composta pelos(as) professores(as) Karen Cacilda Weber e Arquimedes Mariano Pereira (examinadores) e Ary da Silva Maia (presidente/orientador(a)), com o objetivo de proceder à avaliação do Trabalho de Conclusão de Curso de intitulado “O USO DOS PROGRAMAS TOPISO3D VIEWER E MOLVIEW COMO FERRAMENTAS DE ENSINO PARA A COMPREENSÃO DA LIGAÇÃO QUÍMICA PARA ALUNOS DO ENSINO SUPERIOR”.

Após a apresentação do trabalho pelo(a) discente e a arguição pela banca examinadora, os membros reuniram-se para deliberar sobre a nota a ser atribuída ao referido Trabalho de Conclusão de Curso. O(A) presidente da sessão, Prof.(a) Ary da Silva Maia, comunicou ao aluno(a) e demais presentes que, por decisão da Banca, foi atribuída ao Trabalho de Conclusão de Curso a nota 8,5 (oito e meio). Nada mais havendo a tratar, lavrou-se a presente ata que vai assinada pelos membros da Banca.

João Pessoa, 10 de novembro de 2023.

Documento assinado digitalmente
gov.br ARY DA SILVA MAIA
Data: 14/11/2023 18:18:21-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Orientador(a) Documento assinado digitalmente
gov.br ARQUIMEDES MARIANO PEREIRA
Data: 14/11/2023 18:38:34-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Examinador(a) 1 Documento assinado digitalmente
gov.br KAREN CACILDA WEBER
Data: 15/11/2023 11:46:23-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Examinador(a) 2

Ciência do discente:

Documento assinado digitalmente
gov.br JOSE ALBERTO MAIA NETO
Data: 14/11/2023 16:24:05-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Dedico esse trabalho à Prof^a. Dr^a. Regiane C.M.U. de Araújo, minha primeira orientadora nessa jornada. Por inspirar, acreditar e impulsionar a minha carreira de docente.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, José Alberto Maia Filho e Maria Eliane Maia, por terem me dado todas as condições possíveis e inimagináveis para concluir mais essa etapa.

Aos meus irmãos Lígia Maia e Renato Maia por serem sempre fonte de inspiração na vida.

À minha companheira de vida Crícia Carolina por todo apoio emocional ao longo desses anos.

Ao meu orientador do presente trabalho, Prof. Dr. Ary Maia, pela amizade e por ter aceitado esse desafio.

À minha orientadora de doutorado, Prof^a. Dr^a. Ieda Maria Garcia dos Santos, pela amizade e por ter cedido o espaço de sua aula para que esse trabalho fosse desenvolvido.

Ao amigo que a química teórica dos sólidos me deu, Jerônimo Ferreira Silva, pela enorme contribuição no presente trabalho.

Aos amigos que a vida e a química me deram, por todo apoio e amizade ao longo desses anos.

“Ensinar não é transferir conhecimento,
mas criar possibilidades para a sua própria
produção ou a sua construção.”

(Paulo Freire)

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Interação dipolo-dipolo entre moléculas de HI. Fonte: Próprio autor.....	21
Figura 2	Exemplos de ligação de hidrogênio usual. (a) entre moléculas da água; (b) entre moléculas de ácidos carboxílicos; (c) entre moléculas de fenol; (d) entre a oxirana e HF. Fonte: Próprio autor.....	22
Figura 3	Estruturas tridimensionais da proteína hemoglobina (PDB 5nI1) representada pelo <i>software Chimera</i> utilizado no trabalho de Lima. Fonte: [16].....	24
Figura 4	Logotipo do <i>software TopIso3D Viewer</i> . Ref. [33].....	29
Figura 5	Logotipo do <i>software MolView</i> . Ref. [37].....	30
Figura 6	Representação da estrutura do cloreto de sódio (NaCl). a – Os átomos de sódio e cloro se aproximando gerada pelo MolView. b – o <i>bulk</i> do cloreto de sódio em sua estrutura cúbica gerada pelo MolView. c – a estrutura gerada pelo TopIso3D Viewer do <i>bulk</i> de cloreto de sódio (NaCl), representando a ligação iônica.....	37
Figura 7	Representação da estrutura da molécula de uréia (CH ₄ N ₂ O). a e b – estrutura da uréia geradas pelo MolView. c – a estrutura gerada pelo TopIso3D Viewer da molécula de uréia (CH ₄ N ₂ O), representando a ligação covalente.....	38
Figura 8	Representação da estrutura do cristal de uréia (CH ₄ N ₂ O). a – estrutura de cristal de uréia gerada pelo MolView. b – a estrutura de cristal uréia (CH ₄ N ₂ O) gerada pelo TopIso3D Viewer.....	38
Figura 9	Representação do <i>bulk</i> da estrutura do cobre (Cu). a – estrutura do <i>bulk</i> de cobre (Cu) gerado pelo MolView. b – a estrutura do <i>bulk</i> de cobre (Cu) gerado pelo TopIso3D Viewer.....	39
Figura 10	Gráfico em fomato de <i>pizza</i> para a resposta do questionamento: “Você já ouviu falar de TIC’s (Tecnologia de Informação e Comunicação)?”	40
Figura 11	Gráfico em fomato de <i>pizza</i> para a resposta do questionamento: “Você já fez uso ou conhece algum outro aplicativo, <i>site</i> e/ou programas que são utilizados como ferramentas de ensino de química?”	41
Figura 12	Gráfico em fomato de <i>pizza</i> para a resposta do questionamento: “Houve dificuldade para responder a questão anterior?”	43
Figura 13	Gráfico em fomato de <i>pizza</i> para a resposta do questionamento: “Para você o TopIso3D Viewer e MolView são ferramentas de TIC’s úteis para o ensino de química?”.....	43

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

DFT – *Density Functional Theory*

NBO – *Natural Bond Orbital*

QTAIM – *Quantum Theory of Atoms in Molecules*

TIC's – Tecnologia da Informação e Comunicação

RESUMO

A química por ser uma matéria que estuda o universo em escala atômica se torna por muitas vezes abstrata para a compreensão de alguns conceitos. O uso de tecnologias no ensino de química tem revolucionado a forma como os conceitos são ensinados e compreendidos, seja com usos de Tecnologias da Informação e Comunicação (TIC's) como recursos interativos, laboratórios virtuais, realidade aumentada, entre outros. A tecnologia desempenha um papel crescente e fundamental no ensino, tornando o aprendizado mais envolvente, acessível e eficaz. O presente trabalho tem como objetivo inserir resultados de cálculos as bases da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) calculados através do *software* CRYSTAL17 e tratados através do *software* desenvolvido na UFPB TopIso3D Viewer a fim de melhorar a visualização e o conceito dos discentes da disciplina Química Básica e Estrutura da UFPB no assunto de ligação química. Os resultados obtidos sugerem que cálculos DFT utilizados de forma didática melhora o ensino-aprendizagem do discente tornando o assunto mais interativo e atrativo, facilitando a compreensão dos discentes de ensino superior acerca de átomos, moléculas e ligações químicas.

Palavras-chave: Ligação química; Ensino de química; TIC's; DFT; TopIso3D viewer.

ABSTRACT

Chemistry, such as a subject that studies the universe on atomic scale, often becomes abstract when it comes to understand some concepts. The use of technologies in chemistry teaching has revolutionized the way concepts are taught and understood, whether using Information and Communications Technology (ICTs) such as interactive resources, virtual laboratories, augmented reality, among others. Technology plays a growing and fundamental role in teaching, making learning more engaging, accessible and effective. The present work aims to incorporate results of Density Functional Theory (DFT) calculations, which are performed using CRYSTAL17 software and then processed using TopIso3D Viewer software, which was developed at UFPB. The combination of both software may help students in the visualization and in the improvement of theoretical chemical concepts of chemical bonding in the Basic Chemistry and Structure subject at UFPB. The obtained results suggest that DFT calculations employed in a didactic way improve the student's teaching-learning process, making the subject more interactive and attractive, which facilitates the understanding of undergraduate students in relation to atoms, molecules, and chemical bonds.

Keywords: Chemical bond, Chemistry education, ICT'S, DFT, TopIso3D viewer.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	
LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS.....	
RESUMO.....	
ABSTRACT.....	
1 INTRODUÇÃO.....	14
2 OBJETIVOS.....	16
2.1 OBJETIVOS GERAIS.....	17
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	17
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	18
3.1 LIGAÇÕES QUÍMICAS.....	19
3.1.1 Interações intermoleculares.....	20
3.2 TECNOLOGIAS DA INFORMAÇÃO E COMUNICAÇÃO NO PROCESSO DE ENSINO-APRENDIZAGEM.....	22
3.2.1 A utilização de <i>softwares</i> no ensino de química.....	23
3.3 TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT).....	25
3.4 TEORIA QUÂNTICA DE ÁTOMOS EM MOLÉCULAS (QTAIM).....	27
3.5 O <i>SOFTWARE</i> CRYSTAL17.....	28
3.6 O <i>SOFTWARE</i> TOPISO3D VIEWER.....	28
3.7 O <i>SOFTWARE</i> MOLVIEW.....	30
4 METODOLOGIA.....	31
4.1 METODOLOGIA COMPUTACIONAL.....	32
4.2 A PESQUISA.....	32
4.3 INSTRUMENTO DE COLETA.....	33
4.4 ANÁLISE DE DADOS.....	34
4.5 CRITÉRIO DA ESCOLHA DOS PARTICIPANTES.....	34

4.5.1	A Disciplina de Química Básica e Estrutura.....	34
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	36
5.1	AS ESTRUTURAS GERADAS PELO <i>SOFTWARE</i> TOPISO3D <i>VIEWER</i>	37
5.2	PERFIL DOS DISCENTES PARTICIPANTES.....	39
5.3	O USO DE TIC'S.....	39
5.4	A DEFINIÇÃO DE LIGAÇÃO QUÍMICA.....	41
5.5	O USO DO MOLVIEW E TOPISO3D <i>VIEWER</i> COMO FERRAMENTAS DE ENSINO DE QUÍMICA.....	43
5.6	O USO DE TIC'S PARA UMA MELHOR COMPREENSÃO DOS FENÔMENOS QUÍMICOS.....	45
6	CONCLUSÕES.....	47
7	PERSPECTIVAS FUTURAS.....	49
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	51
	ANEXOS.....	56
	ANEXO A – QUESTIONÁRIO 1 APLICADO AOS DISCENTES DA DISCIPLINA QUÍMICA BÁSICA E ESTRUTURA DA UFPB.....	57
	ANEXO B – QUESTIONÁRIO 2 APLICADO AOS DISCENTES DA DISCIPLINA QUÍMICA BÁSICA E ESTRUTURA DA UFPB.....	58

CAPÍTULO 1:

Introdução

Nos últimos anos, as Tecnologias de Informação e Comunicação (TIC's) têm desempenhado um papel cada vez mais proeminente no campo da educação, transformando a forma como o conhecimento é adquirido e compartilhado. A área do ensino de química não é exceção a essa tendência de inovação educacional.

O uso de TIC's como abordagem inovadora no ensino de química tem o potencial de revolucionar a maneira como os alunos interagem com as disciplinas, tornando-as mais acessíveis, envolventes e práticas. Nesta era digital, a introdução dessas tecnologias abre as portas para oportunidades educacionais empolgantes, promovendo uma compreensão mais profunda e abrangente dos conceitos químicos. Neste contexto, será explorado como *softwares* de pesquisa na área de química também podem moldar de forma inovadora o ensino de química, proporcionando uma visão sobre o impacto positivo que elas podem gerar no processo de ensino-aprendizagem dos discentes na área de química.

O presente trabalho tem como objetivo implementar o uso de *softwares* utilizados na pesquisa de química e das ciências das matérias a fim de torná-las mais uma ferramenta para o ensino de química, para que os conceitos e princípios do universo da química se tornem mais atraentes e acessíveis para a comunidade acadêmica.

CAPÍTULO 2:

OBJETIVOS

2.1 - OBJETIVOS GERAIS

Utilizar os programas TopIso3D *Viewer* e o MolView como ferramenta didática para o ensino de química.

2.2 - OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Utilizar as visualizações geradas pelos programas TopIso3D *Viewer* e MolView no ensino de ligação química;
- Realizar uma abordagem didática com os programas TopIso3D *Viewer* e MolView como ferramentas didáticas de ensino;
- Avaliar através de questionários a efetividade dos programas TopIso3D *Viewer* e MolView como ferramentas didáticas de ensino.

CAPÍTULO 3:
FUNDAMENTAÇÃO
TEÓRICA

3.1 – LIGAÇÕES QUÍMICAS

Quando dois ou mais átomos se aproximam existe a possibilidade da formação de moléculas ou aglomerados iônicos através de ligações químicas [1] devido a uma diminuição da energia total do sistema, ocasionando assim uma maior estabilidade na natureza. A ligação química é um conceito fundamental na química que descreve as atrações que mantêm átomos unidos para formarem composto iônicos, moleculares e metálicos, e é responsável para dar estrutura, estabilidade e propriedades distintas aos compostos químicos.

No início do século XX, Gilbert N. Lewis [2] através de sua teoria do compartilhamento de pares de elétrons, revolucionou a compreensão das ligações químicas que até hoje continua sendo uma parte fundamental para o seu entendimento. Tendo como principal ideia que os átomos compartilham elétrons para atingir a estabilidade, preenchendo suas camadas de elétrons externas e atingindo uma configuração eletrônica semelhante à dos gases nobres. Isso explicava como átomos se unem para formar moléculas compartilhando pares de elétrons via ligações covalentes e por que outros átomos transferem elétrons formando ligações iônicas. As contribuições de Lewis à teoria das ligações químicas abriram caminho para o desenvolvimento de outras teorias como a Teoria da Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

A IUPAC [3] define ligação química da seguinte forma: “ *Quando forças que atuam entre dois átomos ou grupo de átomos levam à formação de um átomo estável ou entidade molecular independente, considera-se que existe uma ligação química entre esses átomos ou grupos. A principal característica de uma ligação em uma molécula é a existência de uma região entre os núcleos de contornos potenciais constantes que permitem que a energia potencial melhore substancialmente por meio de contração à custa de apenas um pequeno aumento na energia cinética. Não apenas ligações covalentes direcionadas característica dos compostos orgânicos, mas também ligações como as existentes entre cátions de sódio e ânions cloreto em um cristal de cloreto de sódio, ou as ligações que ligam o alumínio a seis moléculas de água em seu ambiente, e mesmo as ligações fracas que ligam duas moléculas de O_2 em O_4 , devem ser atribuídos a ligações químicas.*”

A compreensão de como os compostos são formados por ligações químicas é central para o avanço da ciência, tecnologia e avanço em diversas áreas do conhecimento. Novas teorias foram formuladas a fim de descrever as interações entre átomo e moléculas, são os casos das teorias NBO (*Natural Orbital Bond*) e a QTAIM (*Quantum Theory Atoms in Molecules*).

3.1.1 – Interações Intermoleculares

Um dos cientistas mais influentes do século XX, Linus Pauling [4] fez contribuições significativas nesse campo que permitiram uma melhor previsão e explicação de muitos fenômenos físicos e químicos. Com o interesse em compreender as interações entre moléculas energeticamente estáveis que ocasionam modificações em suas propriedades físicas e químicas. As interações podem ser classificadas através da polaridade das moléculas, moléculas polares interagindo com moléculas polares é denominada interação dipolo-dipolo (figura 1), classificadas como interações de van der Waals. As moléculas apolares interagindo entre si, denomina-se dipolo induzido-dipolo induzido, também conhecidas como Forças de London ou até mesmo dispersões de London, que são interações mais fracas, por não apresentarem dipolos permanentes. Segundo a IUPAC [3]: “*Forças de London são forças atrativas entre moléculas apolares, devido à sua polarizabilidade mútua. Elas também são componentes das forças entre as moléculas polares. Também chamadas de forças de dispersão*”.

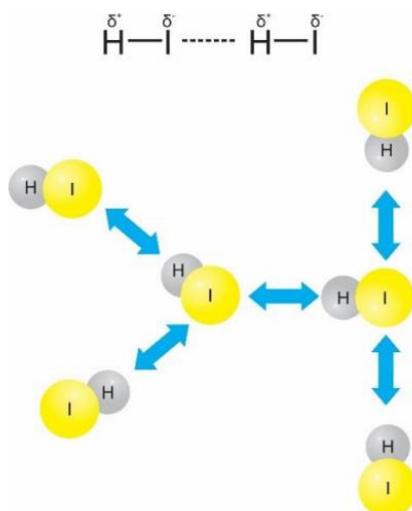


Figura 1: Interação dipolo-dipolo entre moléculas de HI. Fonte: Próprio autor.

Uma outra interação muito importante é a ligação de hidrogênio, que tem sido alvo de inúmeros estudos por diversas metodologias. As discussões acerca desse fenômeno vem de muito tempo atrás [5]. Em 2012, Goymer [6] deliberou um século de estudos sobre a ligação de hidrogênio a partir do manuscrito de Moore e Winnill [7] publicado em 1912. Outros trabalho na época também ganharam importância como o de Lewis, já citado no início deste capítulo e o de Latimer e Rodebush [8].

A primeira teoria formulada para explicar o fenômeno foi a Teoria Eletrostática da ligação de hidrogênio formulada por Pauling [9], forneceu uma compreensão inicial das ligações de hidrogênio, porém foi considerada limitada pelo fato que não abordava todas as complexidades envolvidas nesse tipo de fenômeno. O primeiro estudo quântico acerca da ligação de hidrogênio foi proposto em 1954 por Coulson e Danielson [10].

Em 2011, a IUPAC [11] (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) publicou um manuscrito de revisão que define “*A ligação de hidrogênio é uma interação atrativa e não covalente entre um átomo de hidrogênio deficiente de elétrons, presente em uma molécula HX ou em um fragmento molecular, e um receptor de próton, R, presente na mesma molécula ou em uma molécula diferente*”. As espécies HX (doadora de próton) apresentam um átomo eletronegativo ligado ao hidrogênio fazendo com que seu orbital molecular *sigma* antiligante fique deficiente em elétrons. Por outro lado, os receptores de próton, R, correspondem à regiões com alta densidade eletrônica, como pares de elétrons não compartilhados, elétrons *pi* em duplas ou triplas ligações localizadas ou não localizadas, como também elétrons pseudo-*pi*, que é o caso do ciclo propano.

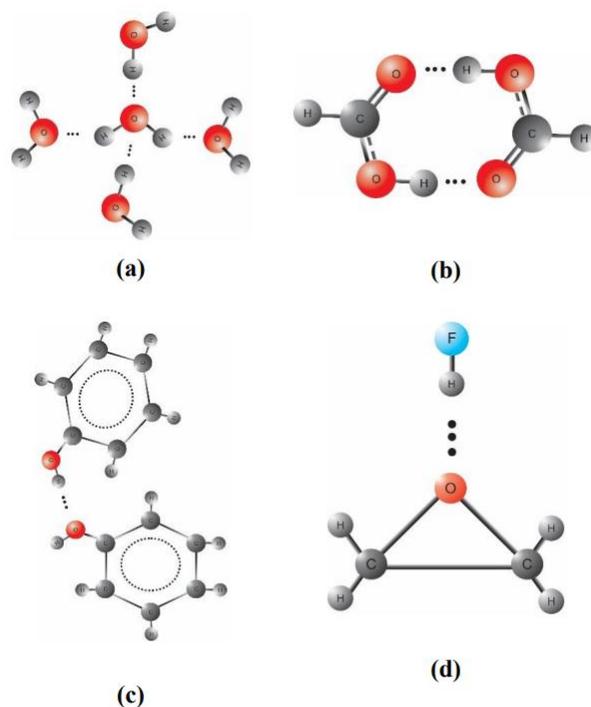


Figura 2 : Exemplos de ligação de hidrogênio usual. (a) entre moléculas da água; (b) entre moléculas de ácidos carboxílicos; (c) entre moléculas de fenol; (d) entre a oxirana e HF. Fonte: Próprio autor.

3.2 – TECNOLOGIAS DA INFORMAÇÃO E COMUNICAÇÃO NO PROCESSO DE ENSINO-APRENDIZAGEM

As tecnologias de informação e comunicação (TIC's) desempenham um papel transformador no processo de ensino-aprendizagem, revolucionando a forma como o conhecimento é adquirido, compartilhado e aplicado. Podem ser classificadas como TIC's: computadores, dispositivos móveis, internet, *softwares* e todas as tecnologias relacionadas que permitem a interação e a comunicação entre pessoas, máquinas e sistemas. Elas também desempenham um papel fundamental em diversos setores, como a indústria, a pesquisa e a comunicação. Englobam um conjunto de tecnologias e recursos que envolvem a geração, o armazenamento, o processamento, a transmissão e compartilhamento de informações por meios eletrônicos e digitais.

As TIC's que englobam recursos digitais abriram novas fronteiras no campo da educação, permitindo uma abordagem mais dinâmica, envolvente e acessível ao processo

de ensino-aprendizagem, tornando benéfico o seu uso. Para Leal e colaboradores [12] o emprego dessas tecnologias no âmbito educacional possibilita a elaboração de aulas mais interativas que favorecem a construção da abordagem voltada para o contexto em que os discentes estão inseridos, além de desafiar os docentes a reexaminar e expandir seu conhecimento com o intuito de encarar novas situações [13]. Portanto, faz-se necessário o docente estar sempre se atualizando quanto aos recursos tecnológicos e metodológicos em suas aulas para cumprir os objetivos propostos pela ementa da disciplina.

3.2.1 – A utilização de *softwares* no ensino de química

A integração de *softwares* no ensino de química tem revolucionado a forma como os conceitos e processos químicos são ensinados e compreendidos. Ao proporcionar uma abordagem dinâmica e interativa, os softwares oferecem uma série de benefícios que aprimoram a experiência de aprendizado dos discentes e enriquecem o ambiente educacional.

Bernadi [14] avalia que o processo de incorporação de tecnologias no ensino é importante para lidar com a diversidade, abrangência e a rapidez de acesso às informações, bem como novas possibilidades de comunicação e interação, o que proporciona uma nova forma de aprendizado, de ensino e de produzir conhecimento. De acordo com Betoletti e colaboradores [15] podem ser classificados *softwares* educacionais todo programa utilizado que possua finalidade educacional. Vale também destacar que o uso de tecnologias no ensino torna a educação mais sustentável, pelo fato da redução do consumo de papel e recursos naturais.

Lima [16] utilizou o *software Chimera* a fim de melhorar a visualização de estruturas de proteínas na disciplina de Bioquímica para os discentes do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal Goiano, *campus* Morrinhos. Além de mostrar as estruturas das proteínas, também foram visualizados as ligações de hidrogênio presentes nas estruturas. Os resultados obtidos segundo a autora foram bastantes positivos, mostrando que as TIC's associada à pesquisa, podem ser utilizados como uma alternativa para aprimorar metodologias de ensino, ocasionando um melhor processo de ensino-aprendizagem.

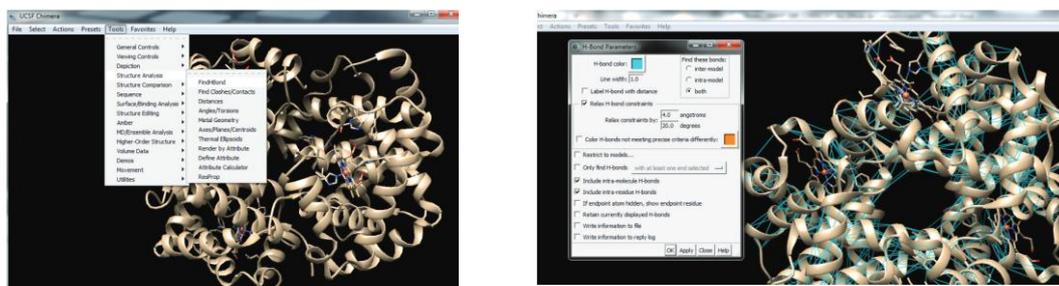


Figura 3: Estruturas tridimensionais da proteína hemoglobina (PDB 5n11) representada pelo *software Chimera* utilizado no trabalho de Lima. Fonte: [16]

Costa e colaboradores [17] avaliaram a TIC *Marvin Sketch* por docentes em formação inicial como recurso auxiliar no ensino da disciplina de Química Orgânica na Educação Básica, que visa diminuir as dificuldades encontradas pelo discentes nos conceitos de química orgânica. A partir de avaliações quantitativas, concluíram que o *software* em questão possui potencialidade para promover uma aprendizagem mais significativa, desde que possibilite a formação de um ambiente favorável à mediação pedagógica.

Miranda e colaboradores [18] utilizaram a ferramenta *ChemSketch* para a elaboração de modelos moleculares e suas potencialidades de aplicação no ensino. O alvo desse estudo foram docentes que cursavam o mestrado profissional em educação. Essa ferramenta permite a elaboração de desenhos de estruturas químicas e obtenção de suas principais propriedades moleculares a partir do desenho construído em sua interface. Esse trabalho possibilitou a vivência dos envolvidos em experiência de aprendizagem de conceitos científicos de forma ativa e torna o *software* em estudo uma TIC capaz de despertar o interesse dos participantes da atividade para a compreensão de aspectos químicos dos compostos representados.

Batista e colaboradores [19] avaliaram o uso do *software* Avogadro, um editor molecular de visualização que permite desenhar estruturas químicas, obtendo também suas propriedades moleculares, dentre outras funções. É um programa gratuito, de fácil manipulação e usabilidade. Constataram que o uso dessa ferramenta pode servir de apoio e recurso didático para assimilação do conteúdo, facilitando o entendimento dos alunos no que diz respeito aos conteúdos considerados abstratos e de difícil compreensão.

Moreno [20] explora alguns recursos instrucionais para o ensino de química, principalmente os que possibilitam o desenvolvimento de atividades com suporte

tecnológico, considerando a demanda e os interesses dos alunos. Os recursos escolhidos foram caracterizados conforme suas principais funcionalidades. O foco foi a aplicação no Ensino Básico. O autor elenca diversos fatores favoráveis no uso dessas ferramentas, que podem ser utilizadas para a construção de aulas mais interessantes, centrada numa realidade que produz mais engajamento do discente, ao mesmo tempo que pode gerar maior suporte para o acompanhamento das atividades escolares.

É importante ressaltar que, embora os *softwares* tenham inúmeras vantagens, não devem substituir as interações presenciais e práticas. Deve haver um equilíbrio no uso de TIC's e métodos de ensino tradicionais é fundamental para um ensino de química eficaz. Morelatto e colaboradores [21] afirmam que é fundamental que o docente tenha coerência quanto à escolha do *software*, criando situações que permitam o desenvolvimento do ensino-aprendizagem que sejam capazes de construir conhecimentos. Portanto, quando utilizados numa perspectiva de ensino, eles devem contribuir de forma concreta na criação de pontes para a formação do conhecimento, não deixando de lado o uso de forma adequada, responsável e devem proporcionar uma experiência inovadora que contribua para a finalidade do ensino-aprendizagem.

3.3 – TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)

Surgida em 1964 por Hohenberg e Kohn [22], a Teoria do Funcional de Densidade (DFT – *Density Functional Theory*) é um dos pilares da química teórica e computacional, desempenhando um papel fundamental na compreensão das interações eletrônicas em sistemas químicos. Em sua essência, a DFT é baseada no conceito de que a densidade eletrônica contém todas as informações necessárias para descrever o comportamento de um sistema químico. Isso significa que, em vez de se concentrar nos estados eletrônicos individuais de cada elétron, a DFT trata a densidade eletrônica total com uma variável fundamental.

A DFT tem como objetivo obter propriedades do estado fundamental de átomos, moléculas e *clusters* sem a necessidade da função de onda multieletrônica. Atualmente é o método mais utilizado para a descrição de sistemas sólidos. Esta teoria parte do princípio que as propriedades de um sistema de muitos átomos podem ser verificadas a partir da densidade eletrônica $\rho(r)$, que só depende apenas de três coordenadas espaciais,

que são as posições x, y e z. Enquanto a função de onda multieletrônica depende de quatro coordenadas, que são as posições x, y, z, além da coordenada de spin de cada átomo. Este método ganha destaque pela capacidade de proporcionar resultados satisfatórios com um bom custo computacional [23].

A DFT possui uma grande quantidade de aplicações em química, física e nas ciências dos materiais, que pode ser aplicado para obter informações acerca da estrutura molecular, energias de ligação, estados eletrônicos, informações sobre superfícies de materiais, adsorção, catálise e fotocatalise. Medeiros e colaboradores [24] avaliaram a nível DFT as distorções intra e interoctaédrica e as massas efetivas dos portadores de carga foram correlacionados com os resultados experimentais da perovskita $\text{KSr}_2\text{Nb}_{(3-x)}\text{Ta}_x\text{O}_{10}$ (quando $x=0, 1$ e 2) a fim avaliarem a atividade fotocatalítica do material quando há substituição de Nb por Ta sugerindo assim um caminho promissor para adaptação das propriedades do material para aplicações em fotocatalise.

Chantelle e colaboradores [25] realizaram cálculos DFT na perovskita SrSnO_3 dopado com Eu a fim de identificarem a presença de Eu^{3+} no material estudado para aplicações em fotocatalise. Os resultados indicados mostraram que a dopagem altera o grau de distorções no octaédricos da perovskita em estudo e os diferentes estados de *midgap* do átomo dopado de Eu, favorecem a separação de cargas durante o processo de fotocatalise, mostrando uma grande importância para dopagens com íons lanatídeos em materiais perovskitas mostrando aplicações eficazes como em fotocatalise.

Laranjeira e colaboradores [26] aplicaram a DFT para o estudo morfológico do dióxido de germânio (GeO_2) a partir da metodologia da construção de Wuff, a fim de investigarem a ordem da estabilidade relativa dos planos de superfície do material em questão. Concluíram que morfologias cúbicas, octaédricas e hexadecaédricas podem possuir atividade fotocatalítica para produção de H_2 a partir da água. A metodologia aplicada e os resultados relatados podem contribuir para o direcionamento da síntese e funcionalização de materiais dessa natureza.

Azevedo e colaboradores [27] simularam a nível DFT a dopagem com Ag o titanato de estrôncio (SrTiO_3) a fim de avaliarem as propriedades eletrônicas, condutividade elétrica, constantes dielétricas e massas efetivas dos portadores de carga com a finalidade de aplicação de desse material na produção de energia sustentável. Concluíram a partir dos resultados que a superfície do material estudado é promissor no desenvolvimento de novos dispositivos termoelétricos.

Além da aplicação nas ciências dos materiais, a DFT também é aplicada em sistemas para a investigação de ligações de hidrogênio. Viana e colaboradores [28] avaliaram também a nível DFT, os parâmetros estruturais, eletrônicos, os parâmetros vibracionais e a topologia molecular de complexos de hidrogênio do tipo HCN ... HX e C₂H₂ ... HX (X = F, Cl, CN e CCH) a fim de caracterizar a ligação de hidrogênio nos sistemas em estudo. Ferreira e colaboradores [29] relatou a síntese de um novo complexo polimérico de potássio. Após a síntese e caracterização, utilizou a DFT a fim de investigarem os parâmetro estruturais, energéticos e os estudo de orbitais via NBO. Os cálculos teóricos indicaram pouca repulsão estérica do composto avaliado, *gap* baixo, indicando que é um composto estável e macio.

3.4 – TEORIA QUÂNTICA DE ÁTOMOS EM MOLÉCULAS (QTAIM)

Elaborada por Bader na década de 90, a Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM – *Quantum Theory of Atoms in Molecules*) [30]. Essa abordagem oferece uma perspectiva sobre a ligação química, permitindo a compreensão das interações químicas por meio da análise da distribuição eletrônica em moléculas.

A QTAIM parte do pressuposto de que a densidade eletrônica em uma molécula pode ser usada para definir átomos e suas fronteiras, identificar ligações químicas e caracterizar a natureza dessas ligações. Os princípios fundamentais incluem:

- ✓ **Átomos na molécula:** são definidos como regiões de alta densidade eletrônica, onde a densidade eletrônica é máxima na região do núcleo atômico. Isso permite identificar os átomos nas moléculas;
- ✓ **Bacia de ligação:** é uma região de alta densidade eletrônica que se forma entre dois átomos ligados covalentemente. A análise das bacias de ligação revela informações acerca da natureza da ligação, como o compartilhamento de elétrons, a densidade de carga e a energia de ligação.
- ✓ **Bacia de não-ligação:** é uma região de alta densidade eletrônica que se forma em torno de átomos que não estão diretamente ligados. Ela reflete a densidade eletrônica associada aos pares solitários ou orbitais não utilizados.

- ✓ **Ligação de Hidrogênio e Interações fracas:** pode identificar e caracterizar interações de hidrogênio e outras interações fracas, como interações de van der Waals e interações de dispersões.

A QTAIM possui uma ampla gama de aplicações em química e ciência dos materiais. Ela pode ser usada para compreender a natureza das ligações químicas, identificar e caracterizar sítios ativos em catálise e fotocatalise, estudar a estrutura de compostos de materiais cristalinos, desenvolver modelos moleculares. É uma ferramenta valiosa na pesquisa, pois oferece uma abordagem inovadora para a compreensão química, destacando a importância da densidade eletrônica na determinação de estruturas moleculares, destacando a importância da densidade eletrônica na determinação de estruturas moleculares e ligações químicas.

3.5 – O *SOFTWARE* CRYSTAL17

O CRYSTAL [31,32] é um *software* utilizado para realizar cálculos de estrutura eletrônica e simulações quânticas em sistemas moleculares e sólidos. É utilizado principalmente por químicos teóricos e físicos a fim de investigar as propriedades de materiais e moléculas em nível atômico e subatômico. Implementa a DFT para prever as propriedades químicas e físicas dos sistemas estudados. Utiliza diversos funcionais de densidade para realizar cálculos de energia, estrutura e diversas outras propriedades.

É importante ressaltar que o uso desse *software* requer um conhecimento profundo de teoria quântica, além de familiaridade com a configuração e execução de cálculos. É uma ferramenta valiosa para a pesquisa acadêmica e industrial em diversas áreas do conhecimento, permitindo uma investigação detalhada das propriedades em questão.

3.6 – O *SOFTWARE* TOPISO3D VIEWER

As ligações químicas são as forças que mantêm os átomos unidos em moléculas e sólidos. Existem diferentes tipos de ligações, como covalentes, iônicas e de hidrogênio, cada uma com suas características únicas. Distinguir essas ligações é crucial para a

compreensão da química e para o desenvolvimento de novos materiais e produtos químicos.

O *Topological Isosurface 3D Viewer - TopIso3D Viewer*, é um programa gratuito de interface gráfica amigável, desenvolvido na UFPB [33]. O software tem por finalidade ser uma ferramenta de análise dos dados provenientes do módulo TOPOND [34], integrado ao pacote de química computacional CRYSTAL17 [35], servindo não somente como uma interface para criação de inputs e análise de resultados, mas também para análise de descritores topológicos obtidos através da abordagem QTAIMC (*Quantum theory atoms in molecules and crystals*), que é uma teoria desenvolvida por Bader e Essen para entender as interações químicas em sistemas não periódicos e periódicos. Ela concentra-se na análise da densidade eletrônica, que é uma medida que descreve a probabilidade de encontrar elétrons em diferentes regiões de uma substância, como moléculas ou cristais [36].

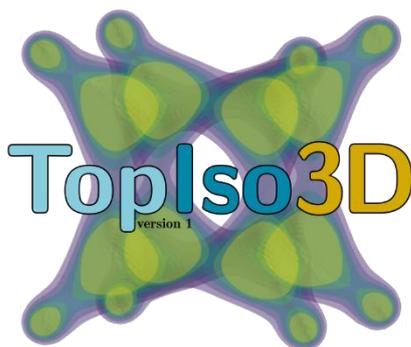


Figura 4: Logotipo do *software TopIso3D Viewer*. Ref. [33]

A distribuição desses elétrons está intrinsecamente relacionada às propriedades e comportamento dessas substâncias e na identificação de pontos críticos onde essa densidade é máxima ou mínima. Esses pontos críticos são cruciais para a determinação de diferentes tipos de interações químicas, como ligações covalentes, pontes de hidrogênio e outras, justamente por ser possível visualizar a distribuição de elétrons em uma estrutura periódica ou não, em função da energia destes elétrons [33].

O *TopIso3D Viewer* não realiza cálculos por si só. Todos os cálculos são realizados pelo módulo TOPOND, onde pode ser obtidos os pontos críticos de ligação (BCPs), pontos de máxima densidade eletrônica, que pode ser entendido como o centro da ligação

química. E através do TopIso3D, estes pontos podem ser identificados, tabelados, e visualizados graficamente [33].

3.6 – O *SOFTWARE* MOLVIEW

O *software* MolView [37] é um programa *online* gratuito criado em 2012 que oferece uma plataforma interativa para visualização de moléculas tridimensionais. É projetado para ser uma ferramenta educacional e de pesquisa na área de química, pois fornece uma abordagem prática e visual para o aprendizado de conceitos químicos. Apresenta diversas funções como a visualização de moléculas, banco de dados integrado, manipulação da estrutura, informações detalhadas sobre propriedades químicas e físicas das moléculas, compatibilidade com formatos de arquivos.



Figura 5: Logotipo do *software* MolView. Ref. [37]

CAPÍTULO 4:

METODOLOGIA

4.1 – METODOLOGIA COMPUTACIONAL

Os diferentes sistemas foram completamente otimizados no software CRYSTAL17. Foram construídos 4 entradas de sistemas diferentes (cobre, cloreto de sódio, cristal de uréia e uréia) fornecendo uma visão geral dos diferentes tipos de ligações químicas. Após o cálculo de otimização, é obtido um arquivo com informações sobre a função de onda (fort.9), para cada sistema, o qual é processado pelo TOPOND. Neste, são realizados os cálculos de QTAIMC, gerando os arquivos com as propriedades topológicas e com os dados de pontos críticos. Estes arquivos, por sua vez, são submetidos no TopIso3D *Viewer* para geração das estruturas para visualização na abordagem didática.

4.2 – A PESQUISA

A pesquisa realizada foi classificada em relação a sua abordagem como quantitativa e qualitativa [38,39]. São duas abordagens distintas utilizadas em estudos acadêmicos e de mercado, e cada uma delas desempenha um papel fundamental na obtenção de resultados valiosos e na compreensão do alvo em estudo. Ambas as abordagens possuem suas próprias características, objetivos e metodologias, e podem ser aplicadas de maneira complementar para uma compreensão mais abrangente de determinados pontos em uma pesquisa.

As pesquisas quantitativas são baseadas na coleta de dados numéricos, geralmente por meio de questionários estruturados. Esses dados são tratados estatisticamente e analisados para identificar tendências, padrões e relações estatísticas. Algumas características fundamentais das pesquisas quantitativas incluem: objetividade e reprodutibilidade; amostragem representativa; estatísticas descritivas e inferenciais; e generalização. Por outro lado, as pesquisas qualitativas se concentram em explorar a profundidade e a riqueza de informações por meio da coleta de dados não numéricos. Isso é feito por meio de entrevistas em profundidade, grupos focais, observação participante e análise de conteúdo, entre outras técnicas. Algumas características da pesquisa

qualitativas abordam: a subjetividade e contexto; pequenas amostras; interpretação e análise qualitativa; e a contextualização.

Embora as pesquisas quantitativas e qualitativas possuam abordagens diferentes, elas frequentemente se complementam. A pesquisas quantitativa pode identificar tendências e relações, enquanto as pesquisas qualitativas podem explorar em detalhes a compreensão do estudo. Em muitos casos, a combinação de ambas é a abordagem mais eficaz para obter uma compreensão completa e enriquecedoras para as pesquisas acadêmicas.

4.3 – INSTRUMENTO DE COLETA

Um instrumento de coleta [40] de dados muito utilizado em pesquisas acadêmicas é o questionário. Trata-se de uma ferramenta estruturada que consiste em uma série de perguntas formuladas com o objetivo de coletar informações e opiniões dos participantes. Os questionários podem ser aplicados de diversas maneiras, presencialmente ou remota, e desempenham um papel crucial na obtenção de dados quantitativos e qualitativos, dependendo da natureza das questões formuladas.

Alguns aspectos devem ser considerados essenciais sobre os questionários como instrumento de coleta: objetivo da pesquisa; perguntas e escala de respostas; estrutura e organização, clareza e linguagem; teste piloto; coleta e análise de dados; ética e consentimento; utilização de *software*. Os questionários são uma ferramenta versátil para coleta de dados em pesquisas acadêmicas, quando elaborados com cuidado e atenção aos detalhes, podem fornecer informações valiosas que ajudam a direcionar a pesquisa para a tomada de decisões futuras.

Foi escolhida como meio de coleta de dados o questionário [41], que é uma técnica de custo razoável, apresenta as mesmas para todas as pessoas, garantindo o anonimato e pode conter questões para atender a finalidade específicas de uma pesquisa acadêmica. A pesquisa foi conduzida por meio de questionários *online* criados utilizando a ferramenta *Google Forms*.

4.4 – ANÁLISE DE DADOS

A análise de dados de uma pesquisa desempenha um papel fundamental na transformação de informações brutas e resultados significativos para a pesquisa. É uma etapa crítica no processo da pesquisa acadêmica, independente do tipo de pesquisa escolhida. Esse processo de análise explora a preparação de dados, limpeza de dados, exploração de dados, análise estatística, codificação e categorização (pesquisa qualitativa), análise de conteúdo, interpretação de resultados e relatório de resultados.

A análise das respostas dos questionários foi realizada através da interpretação e avaliação dos questionamentos propostos pela abordagem didática, a fim de obter se o discente compreendeu o tema proposto e se as ferramentas utilizadas no presente trabalho é efetiva como ferramenta de ensino.

4.5 – CRITÉRIO DA ESCOLHA DOS PARTICIPANTES

Os critérios escolhidos para a realização da prática pedagógica foram discentes do ensino superior que estejam estudando o assunto de ligação química. A escolha foi alunos de graduação da disciplina Química Básica e Estrutura do período 2022.2 da Universidade Federal da Paraíba ministrada pela Prof^a. Dr^a. Ieda Maria Garcia dos Santos.

4.5.1 – A disciplina de Química Básica e Estrutura

A disciplina de Química Básica e Estrutura [42] ofertado pelo Departamento de Química do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da UFPB (Universidade Federal da Paraíba) possui carga horário de 60 horas totalizando 04 créditos, e é ofertada para os cursos de Licenciatura e Bacharelado em Química, Engenharia Química, Engenharia de Materiais e Química Industrial.

Tem como objetivo discutir a utilização dos modelos atômicos, introduzindo os modelos de Bohr e o conceito de orbital, a utilização da periodicidade dos elementos

químicos para compreensão de estruturas e de reatividade de espécies, as interações entre átomos, moléculas e suas estruturas, relacionando-as com as propriedades da matéria. Além de introduzir as principais ocorrências de alguns dos elementos dos blocos s e p e suas substâncias mais utilizadas.

As habilidades e competências dessa disciplina é compreender que os modelos teóricos são construções humanas para explicar o fenômeno, para que a compreensão de diferentes modelos explica diferentes realidades. Saber identificar as limitações e potencialidades de cada modelo atômico e de ligação, de forma a utilizá-las na compreensão da estrutura da matéria e entender as relações entre as interações envolvidas nas espécies químicas e suas propriedades.

CAPÍTULO 5: RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 – AS ESTRUTURAS GERADAS PELO *SOFTWARE* TOPISO3D VIEWER

As estruturas geradas pelo *TopIso3D Viewer* foram obtidas a partir do arquivo fort.9 gerado a partir das estruturas otimizadas via *CRYSTAL17* e tratadas pelo *TOPOND* a fim de se obter uma melhor visualização das ligações químicas para a realização da abordagem didática do presente trabalho. Algumas estruturas também foram geradas pelo *MolView*.

As estruturas geradas na abordagem didática sobre o tema de ligação química foram: para ligação iônica a estrutura do cloreto de sódio (NaCl); para a ligação covalente a estrutura da molécula de uréia ($\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$); para a ligação metálica a estrutura do cobre (Cu); e para ligação de hidrogênio o cristal de uréia foi representado. As estruturas estão dispostas nas figuras 1, 2, 3 e 4, abaixo.

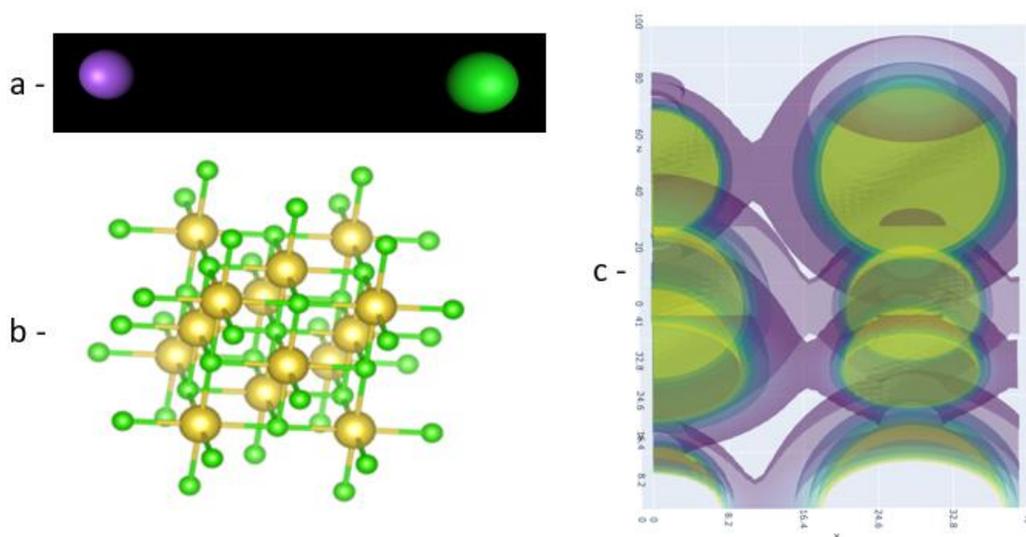


Figura 6: Representação da estrutura do cloreto de sódio (NaCl). a – Os átomos de sódio e cloro se aproximando gerada pelo *MolView*. b – o *bulk* do cloreto de sódio em sua estrutura cúbica gerada pelo *MolView*. c – a estrutura gerada pelo *TopIso3D Viewer* do *bulk* de cloreto de sódio (NaCl), representando a ligação iônica.

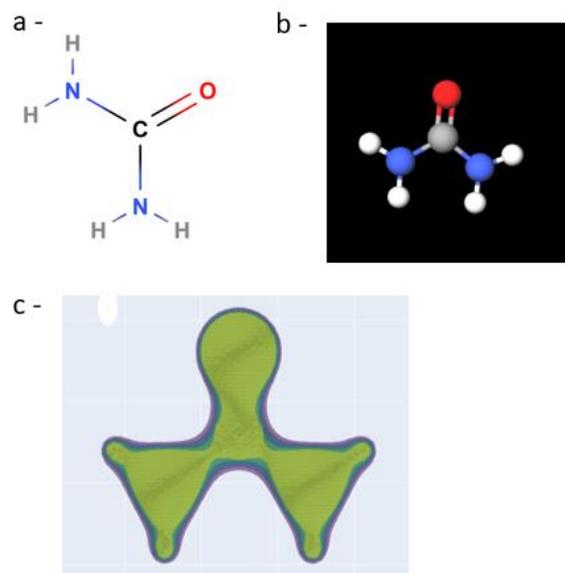


Figura 7: Representação da estrutura da molécula de uréia ($\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$). a e b – estrutura da uréia geradas pelo MolView. c – a estrutura gerada pelo TopIso3D Viewer da molécula de uréia ($\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$), representando a ligação covalente.

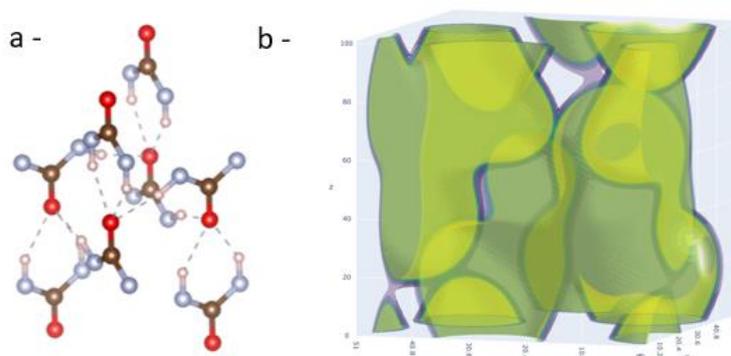


Figura 8: Representação da estrutura do cristal de uréia ($\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$). a – estrutura de cristal de uréia gerada pelo MolView. b – a estrutura de cristal uréia ($\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$) gerada pelo TopIso3D Viewer.

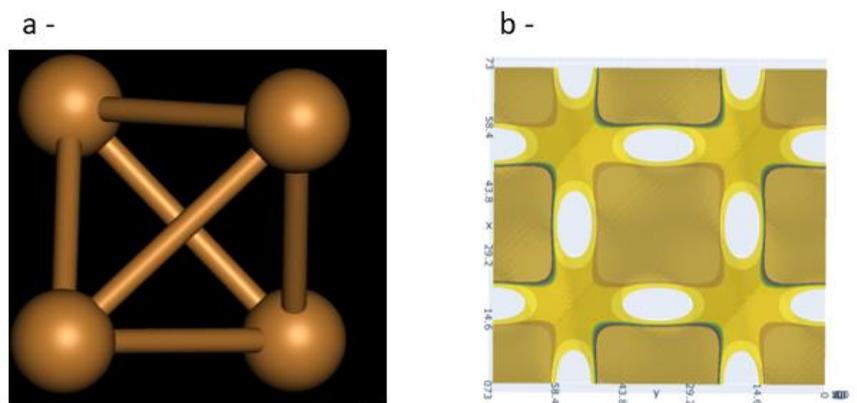


Figura 9: Representação do *bulk* da estrutura do cobre (Cu). a – estrutura do *bulk* de cobre (Cu) gerado pelo MolView. b – a estrutura do *bulk* de cobre (Cu) gerado pelo TopIso3D Viewer.

5.2 – PERFIL DOS DISCENTES PARTICIPANTES

Na prática pedagógica realizada no período 2022.2 da disciplina Química Básica e Estrutura, 15 alunos cursavam o curso de Química Industrial e 8 alunos o curso de Química Bacharelado. Em relação ao período cursado, 15 dos discentes eram do primeiro período de seus respectivos cursos, 6 discentes do segundo período e 2 discentes do terceiro período.

5.3 – O USO DE TIC'S

Neste tópico, buscou-se perguntar aos discentes sobre o conhecimento do termo TIC's antes da apresentação das ferramentas utilizadas na abordagem didática. A figura 5, abaixo, mostra as respostas sobre o questionamento.

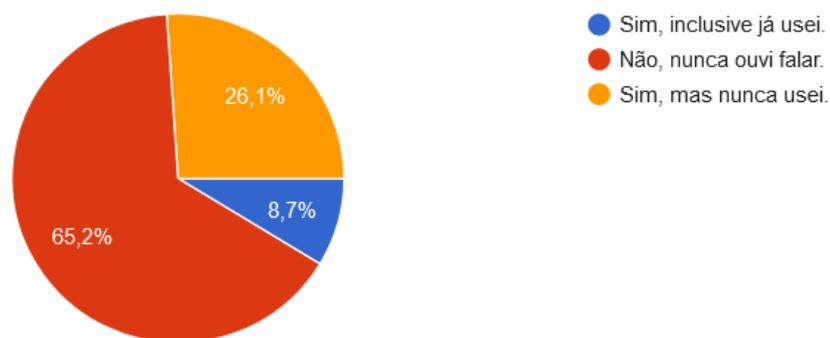


Figura 10: Gráfico em fomato de *pizza* para a resposta do questionamento: “Você já ouviu falar de TIC’s (Tecnologia de Informação e Comunicação)?”

Como respostas 15 discentes (65,2%) responderam que nunca ouviram falar sobre TIC’s; 6 discentes (26,1%) já tinham ouvido falar de TIC’s e 2 discentes (8,7%) responderam que tinham conhecimento e inclusive já teriam utilizado TIC’s. É importante ressaltar que os 8 alunos que responderam de forma positiva o questionamento são discentes do curso de química (bacharelado e licenciatura), pois há uma disciplina chamada de Computação para Química ofertada em seus componentes curriculares. Essa disciplina tem como objetivo apresentar diversas ferramentas computacionais aplicadas à química.

Depois de exposto a abordagem didática e o uso das ferramentas utilizadas no presente trabalho, os discentes foram questionados se já fizeram uso ou conhecem algum outro aplicativo, site e/ou programas que são utilizados como ferramentas no ensino de química. A figura 6, abaixo, mostra as respostas acerca do questionamento.

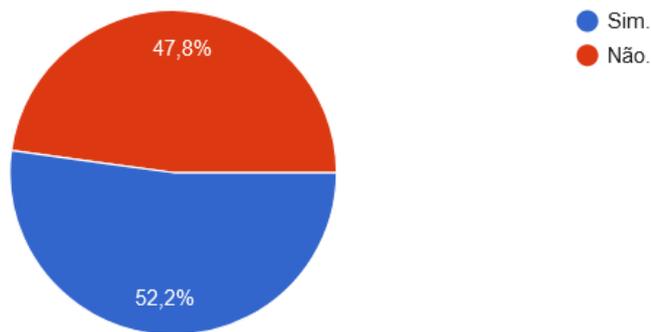


Figura 11: Gráfico em fomato de *pizza* para a resposta do questionamento: “Você já fez uso ou conhece algum outro aplicativo, *site* e/ou programas que são utilizados como ferramentas de ensino de química?”

Como resposta 12 discentes (52,2%) responderam de forma positiva a questão e 11 discentes (47,8) responderam de forma negativa. Além disso, para os discentes que responderam de forma positiva, foi-se perguntado qual/quais ferramenta(s) era(m) de conhecimento deles utilizadas no ensino de química. Como resposta, responderam as seguintes ferramentas para o ensino de química: Crocodile Chemistry, Chems sketch, IQmol, gaussian e as clássicas ferramentas utilizadas como Word, Excel, Canva e Power Point. Era esperado como resposta os *softwares* “clássicos” para elaboração de relatórios de práticas de laboratório e apresentação de seminários, que são os *softwares* que compõem o *Microsoft Office* e o Canva, e as ferramentas apresentadas na disciplina de Computação para Química.

5.4 – A DEFINIÇÃO DE LIGAÇÃO QUÍMICA

Neste tópico serão apresentados as respostas do questionamento feito antes da abordagem didática como descreveriam o conceito de ligação química. No quadro 1, abaixo, estão as respostas dos discente sobre o questionamento.

Quadro 1: Respostas dos discentes sobre a definição de ligação química.

Reação entre átomos criando novas fórmulas de substâncias.
É uma interação que ocorre entre dois ou mais elementos diferentes através de uma ligação entre seus átomos, podendo ser entre metal e metal, metal e não metal e ametal e ametal.
Talvez quando duas substâncias diferentes conseguem se unir.
Uma interação entre dois ou mais átomos promovendo uma mudança em sua estrutura.
Uma interação de substâncias para formar outra
Os átomos interagem de forma química por meio de interações eletrônicas com as suas cargas, podendo ser positivas ou negativas.
Uma interação química é o equivalente a quando dois átomos de elementos diferentes ou do mesmo reagem entre si, criando assim uma nova substância.
A interação química ocorre entre os átomos, que são manipulados para formarem novas espécies químicas. Estes átomos devem ter uma certa afinidade entre eles para que possam se unir.
Acredito que pelas ligações químicas.
A busca desses átomos pela estabilidade eletrônica no ambiente, fazendo com que interajam de uma maneira onde todos os átomos que estão interagindo consigam um meio de se estabilizar.
Quando os átomos interagem entre si, pode ser através de ligações químicas.
Onde as moléculas podem se atrair e se repelir entre si, onde não ocorre a quebra e/ou formação de novas ligações.
Uma interação química acontece quando átomos de diferentes substâncias interagem entre si através de suas nuvens eletrônicas e seus respectivos núcleos. Essa interação altera o estado da substância, formando um produto que difere das substâncias iniciais, tanto em propriedades, como em organização molecular.
Não sei.
Ligação química, que ocorre entre os átomos dos elementos.
A interação química abrange diversas formas de sintetizar compostos fazendo assim, novos compostos. Muitas delas hoje são conhecidas simplesmente terem sido estudadas e assim criadas.
Descreveria como um novo conhecimento a cada substância que é criada e descoberta
As ligações químicas apresentam as interações químicas que são os compartilhamentos entre elétrons, doações eletrônicas, entre outros.
Átomos interagindo através de ligações.
União entre átomos de um mesmo elemento ou fé elementos diferentes com objetivos em comum (ficar estabilizado) ou buscar melhor dessa combinação para um fim.
Ligações entre substâncias formadas por átomos.
União entre átomos.
Átomos se unem formando ligação química para alcançar estabilidade.

Tomando como base a definição dada pela IUPAC já descrita no presente trabalho na Fundamentação Teórica (capítulo 3), pode-se avaliar que uma grande quantidade de respostas foram elaboradas já com um conhecimento adquirido na disciplina em curso e do conhecimento também gerado ainda no ensino médio. Também se foi perguntado se houve dificuldade para responder a questão anterior. Na figura 7, abaixo, mostra as respostas ao último questionamento.



Figura 10: Gráfico em fomato de *pizza* para a resposta do questionamento: “Houve dificuldade para responder a questão anterior?”

Como resposta, 6 discentes (26%) responderam que sim, houve dificuldade e não souberam expressar as suas visões sobre o tema proposto; 4 discentes (17,4%) responderam que não houve dificuldade em responder a questão e souberam expressar bem a visão sobre o tema proposto e 13 discentes (56,6%) responderam que houve dificuldade em apresentar e expressar a visão sobre a indagação sobre o conceito de ligação química.

5.5 – O USO DO MOLVIEW E TOPISO3D VIEWER COMO FERRAMENTAS DE ENSINO DE QUÍMICA

Os discentes foram perguntados se o MolView e TopIso3D Viewer seriam ferramentas úteis para o ensino de química. A figura 8, abaixo, mostra as respostas acerca do questionamento.

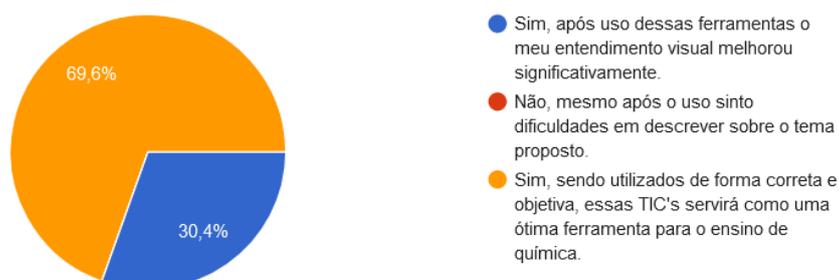


Figura 11: Gráfico em fomato de *pizza* para a resposta do questionamento: “Para você o TopIso3D Viewer e MolView são ferramentas de TIC’s úteis para o ensino de química?”

Houve unanimidade na resposta, e todos responderam que sim. 16 discentes (69,6%) ainda avaliaram que sendo utilizados de forma correta e objetiva, essas TIC's servirão como uma ótima ferramenta para o ensino de química. Os outros 7 discentes (30,4%) acrescentaram que após uso dessas ferramentas o entendimento visual acerca de ligações químicas melhoraram significativamente.

Ainda se foi questionado que numa escala de um a dez, avaliassem tanto o MolView quanto o TopIso3D *Viewer* como ferramentas de ensino de química. As figuras 9 e 10, abaixo mostram as respostas quanto aos questionamentos.

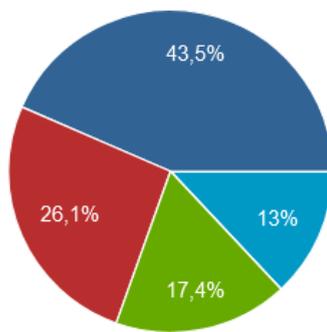


Figura 12: Gráfico em fomato de *pizza* para a resposta do questionamento: “Numa escala de 1 a 10, como você avalia o programa TopIso3D *Viewer* como ferramenta de ensino de química?”

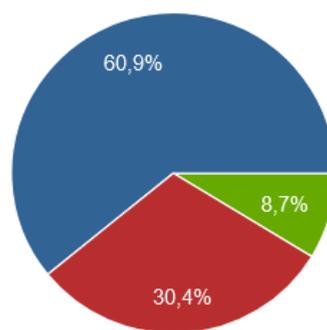


Figura 13: Gráfico em fomato de *pizza* para a resposta do questionamento: “Numa escala de 1 a 10, como você avalia o programa MolView como ferramenta de ensino de química?”

Em relação ao TopIso3D *Viewer*, 10 discentes (43,5%) deram nota dez, 6 discentes (26,1%), deram nota 9, 4 discentes (17,4%), nota 8 e 3 discentes (13%) deram nota 6, obtendo uma média final de 8,87. Quanto ao MolView, 14 discentes (60,9%) deram nota dez, 7 discentes (30,4%) deram nota 9 e 2 discentes (8,7%) deram nota 8, obtendo uma média final de 9,52.

5.6 – O USO DE TIC’S PARA UMA MELHOR COMPREENSÃO DOS FENÔMENOS QUÍMICOS

Neste tópico serão apresentados as respostas do questionamento feito após a abordagem didática sobre o uso de TIC’s para uma melhor compreensão visual dos fenômenos químicos. No quadro 2, abaixo, estão as respostas dos discente sobre o questionamento.

Quadro 2: Respostas dos discentes sobre uso de TIC's para uma melhor compreensão visual dos fenômenos químicos.

Uma ótima ferramenta de interação.
Foi uma excelente ajuda, fazendo com que não manter a matéria apenas na teoria com exemplos reais.
Muito bom.
É muito didático, pois através deles dar para ter uma melhor visualização dos átomos e das ligações, sendo mais fácil para o entendimento.
De suma importância.
Muito bom.
Interessante, talvez se a imagem estivesse completa fosse um pouco melhor de visualizar melhor os detalhes das ligações. Mas gostei de ver as ligações químicas sob essa perspectiva.
Acho bem interessante e importante para o aprendizado.
Acredito que seja um ótimo auxílio para a compreensão visual dos fenômenos químicos, pois, falando sobre átomos, são objetos de dimensão microscópica, o que dificulta a compreensão do assunto no geral devido a alta quantidade de teoria.
Achei muito útil e interativo.
Durante as aulas eles foram essenciais para a compreensão dos problemas em questão.
Ótimo.
Melhora o aprendizado através das imagens, facilitando a compreensão dos alunos.
Apresenta uma didática que melhora a compreensão do conteúdo.
Legal.
Esses recursos são importantes, pois ajudam na didática e também melhoram nosso entendimento de como essas interações funcionam, proporcionando um entendimento mais aprofundado sobre o tema.
As TIC's disponibilizam a melhor compreensão da nossa visão em relação as partículas, visto que, podemos assim visualizar sua estrutura.
Ótimo.
São ótimas maneiras de aprendizado e ensino da química.
Com o uso adequado dos TIC's os conteúdos deram facilmente entendidos.
É importante para desconstruir a visão que tínhamos no ensino médio de que as ligações químicas no geral, são moleculares e as diferentes nuvens eletrônicas de cada ligação.
Muito importante para a compreensão dos assuntos.
Muito importante e facilitador para melhor compreensão.

Como constatado nas respostas, o uso das TIC's no ensino de química também são ferramentas facilitadoras para a visualização dos fenômenos químicos. Elas ajudam os discentes a saírem um pouco do mundo em escala atômica e visualizar as ligações químicas (alvo desse estudo), por exemplo, em uma abordagem inovadora para um melhor compreensão dos conceitos da química.

CAPÍTULO 6: CONCLUSÕES

O uso de *softwares* de pesquisa no ensino de química oferece uma série de benefícios que podem enriquecer a experiência no ensino-aprendizagem dos discentes e melhorar a qualidade do ensino de química. À medida que a tecnologia continua a avançar, a integração de ferramentas inovadoras no ambiente de ensino torna-se importante. A implementação dessas ferramentas se tornam cruciais para um ensino mais envolvente, eficaz e relevante. Elas capacitam os discentes a explorarem os conceitos de química de forma interativa, além de aprofundarem seu entendimento e desenvolverem habilidades práticas.

A integração contínua dessas ferramentas em sala de aula é essencial para a próxima geração de cientistas e profissionais de educação em química com habilidades e conhecimentos necessários para enfrentarem os desafios científicos e tecnológicos.

A ferramenta *TOPISO3D Viewer*, embora desenvolvida para pesquisa, mostra-se uma ferramenta inovadora de grande importância educacional, uma vez que tem a possibilidade de expor graficamente a ideia de densidade eletrônica, localização e deslocalização eletrônica, diferenças na forma de organização e distribuição da densidade eletrônica em sólidos e moléculas e o que diferencia cada ligação química, trazendo para o âmbito gráfico um conceito bastante abstrato em química.

A ferramenta *MolView*, *software* livre, também pode ser utilizada com ferramenta de grande valia para a visualização dos fenômenos químicos, e também ser fonte de pesquisa para diversas estruturas que se queiram estudar.

**CAPÍTULO 7:
PERSPECTIVAS
FUTURAS**

Como perspectivas futuras sugerimos a elaboração de um banco de dados para os docentes com uma vasta lista de estruturas geradas via *TopIso3D Viewer* a fim de utilizarem para o ensino de ligações químicas e a produção de um artigo científico em periódico de impacto nacional sobre o presente trabalho.

**CAPÍTULO 8:
REFERÊNCIAS
BIBLIOGRÁFICAS**

- [1] Atkins, P.; Loretta, J. *Princípios de Química: Questionando a vida moderna e o meio ambiente*. 5a ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- [2] Lewis, G. N.; *J. Am. Chem. Soc.* 1916, 38, 762.
- [3] International Union of Pure and Applied Chemistry - IUPAC. *Compendium of Chemical Terminology - Gold Book*, 2014. A versão atualizada até julho de 2019 está disponível em: <https://goldbook.iupac.org/>.
- [4] Pauling, L., and Corey, R. B., *Nature*, 171, 346 (1953); *Proc. U.S. Nat. Acad. Sci.*, 39, 84 (1953).
- [5] Oliveira, B. G. O estado da arte da ligação de hidrogênio. *Química Nova*, Vol. 38, No. 10, 1313-1322, 2015.
- [6] Goymer, P.; *Nat. Chem.* 2012, 4, 863.
- [7] Moore, T. S.; Winmill, T. F.; *J. Chem. Soc., Trans.* 1912, 101, 1635.
- [8] Latimer, W. M.; Rodebush, W. H.; *J. Am. Chem. Soc.* 1920, 42, 1419.
- [9] Pauling L., *Proc. Nat. Acad. Sci., USA*, 1928, 14, 349.
- [10] Coulson, C. A.; Danielson, U.; *Ark. Fys.* 1954, 8, 239.
- [11] IUPAC. Arunan, E.; Desiraju, G. R.; Klein, R. A.; Sadlej, J.; Scheiner, S.; Alkorta, I.; Clary, D. C.; Crabtree, R. H.; Dannenberg, J. J.; Hobza, P.; Kjaergaard, H. G.; Legon, A. C.; Mennucci, B.; Nesbitt, D. J.; *Pure Appl. Chem.* 2011, 83, 1619.
- [12] Leal, G. de M., Silva, J. A. da, Silva, D. da, & Damacena, D. H. L. (2020). As tics no ensino de química e suas contribuições na visão dos alunos / Ict in chemistry teaching and its contributions in the students. *Brazilian Journal of Development*, 6(1), 3733–3741.
- [13] Dionizio, T. P. (2019). O Uso de Tecnologias da Informação e Comunicação como Ferramenta Educacional Aliada ao Ensino de Química. *EaD Em Foco*, 9(1).
- [14] BERNARDI, Solange Teresinha. Utilização de softwares educacionais nos processos de alfabetização, de ensino e aprendizagem com uma visão psicopedagógica. *Revista REI, Getúlio Vargas*, v. 5, n. 10, 2010.
- [15] BERTOLETTI, Ana Carolina et al. Educar pela Pesquisa—uma abordagem para o desenvolvimento e utilização de Softwares Educacionais. *RENOTE*, v. 1, n. 2, 2003.

- [16] LIMA, E. F. de. O Uso das TICs e da Pesquisa como Recursos Pedagógicos no Ensino de Bioquímica para o Curso de Licenciatura em Química. *Revista de Graduação USP, [S. l.]*, v. 2, n. 2, p. 115-120, 2017.
- [17] COSTA, Carlos Helaidio C.; FRANCISCO FILHO, F. D.; SILVA, Gilberlândio N. Avaliação da TIC Marvin Sketch por Professores em Formação Inicial como recurso auxiliar no Ensino de Química Orgânica na Educação Básica. *Revista tecnologias na Educação*, v. 8, n. 17, 2016.
- [18] MIRANDA, Denise Vieira et al. Uso do ChemSketch para a elaboração de modelos moleculares e suas potencialidades de aplicação no ensino de sob o enfoque CTS/CTSA/Use of ChemSketch for the elaboration of molecular models and its potentialities of application in the teaching of the CTS/CTSA approach. *Brazilian Journal of Development*, v. 7, n. 1, p. 8202-8207, 2021.
- [19] DA COSTA BATISTA, Gerliane et al. Avogadro no ensino de química: um avançado editor molecular de visualização de um grande potencial pedagógico. *Redin-Revista Educacional Interdisciplinar*, v. 7, n. 1, 2018.
- [20] MORENO, Esteban Lopez; HEIDELMANN, Stephany Petronilho. Recursos instrucionais inovadores para o ensino de química. *Química Nova na Escola*, v. 39, n. 1, p. 12-18, 2017.
- [21] MORELLATO, Claudete et al. Softwares educacionais e a educação especial: refletindo sobre aspectos pedagógicos. *RENOTE*, v. 4, n. 1, 2006.
- [22] Hohenberg, P. e Kohn, W. *Phys. Rev. B*. 1964, 136: 864.
- [23] Dronskowski, R. Computational chemistry of solid state materials. *Materials Today* 9, (2006).
- [24] Rayssa B. Medeiros, Jeronimo F. Silva, Andre L. Menezes de Oliveira, Julio R. Sambrano, Anderson R. Albuquerque, Ary S. Maia, A theoretical–experimental study of $\text{KSr}_2\text{Nb}_{(3-x)}\text{Ta}_x\text{O}_{10}$ ($x = 0,1,2$) systems as photocatalysts, *Materials Letters*, Volume 353, 2023, 135254, ISSN 0167-577X, <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135254>.
- [25] Chantelle, L., Menezes de Oliveira, A. L., Kennedy, B. J., Maul, J., da Silva, M. R. S., Duarte, T. M., ... dos Santos, I. M. G. (2020). *Probing the Site-Selective Doping in SrSnO₃:Eu Oxides and Its Impact on the Crystal and Electronic Structures Using Synchrotron Radiation and DFT Simulations. Inorganic Chemistry*.

- [26] José A. S. Laranjeira, Sérgio A. Azevedo, Guilherme S.L. Fabris, Anderson R. Albuquerque, Mateus M. Ferrer, Julio R. Sambrano, Surface-dependent properties and morphological transformations of rutile GeO₂ nanoparticles, *Applied Surface Science*, Volume 609, 2023, 155321, ISSN 0169-4332.
- [27] Sérgio A. Azevedo, José A. S. Laranjeira, Nicolas F. Martins, Júlio R. Sambrano, Ag doping effect on electronic and thermoelectric properties of SrTiO₃ (001) surface, *Computational Materials Science*, Volume 227, 2023, 112274, ISSN 0927-0256.
- [28] Viana, M.A.A., Araújo, R.C.M.U., Neto, J.A.M. *et al.* The interaction strengths and spectroscopy parameters of the C₂H₂⋯HX and HCN⋯HX complexes (X = F, Cl, CN, and CCH) and related ternary systems valued by fluxes of charge densities: QTAIM, CCFO, and NBO calculations. *J Mol Model* **23**, 110 (2017).
- [29] Wesley Vieira Ferreira, Leandro de Oliveira Amaral, Adailton J. Bortoluzzi, Boaz Galdino de Oliveira, Viner Sousa Lima, Mauro Alves Bueno, Sergio Macedo Soares, Potassium complex containing 2,4-dimercaptopyrimidine as ligand: synthesis, x-ray structure and DFT calculations (B3LYP/LanL2DZ), *Journal of Molecular Structure*, Volume 1295, Part 1, 2024, 136666, ISSN 0022-2860.
- [30] Bader R. F. W., *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Clarendon Press: Oxford, 1990.
- [31] DOVESI, Roberto et al. CRYSTAL: a computational tool for the ab initio study of the electronic properties of crystals. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, v. 220, n. 5-6, p. 571-573, 2005.
- [32] DOVESI, Roberto et al. Ab initio quantum simulation in solid state chemistry. *Reviews in computational chemistry*, v. 21, p. 1-125, 2005.
- [33] SILVA, Jeronimo F. et al. TOPISO3D Viewer: Enhancing Topological Analysis through 3D Isosurfaces. *Journal of Chemical Information and Modeling*, v. 63, n. 7, p. 1999-2013, 2023.
- [34] COSSARD, Alessandro et al. Charge density analysis of actinide compounds from the quantum theory of atoms in molecules and crystals. *The journal of physical chemistry letters*, v. 12, n. 7, p. 1862-1868, 2021.
- [35] DOVESI, R. et al. CRYSTAL17. 2017.

- [36] R.F.W. Bader, Atoms in Molecules – A Quantum Theory. Oxford University Press, Oxford, 1990.
- [37] MolView, 2012. Disponível em: <https://molview.org/> Acesso em 15 de junho de 2022.
- [38] OLIVEIRA, Maria Marly de. Como fazer pesquisa qualitativa. In: Como fazer pesquisa qualitativa. 2013. p. 232-232.
- [39] CRESWELL, John W.; CRESWELL, J. David. Research design: Qualitative, quantitative, and mixed methods approaches. Sage publications, 2017.
- [40] LAVRAKAS, Paul J. Encyclopedia of survey research methods. Sage publications, 2008.
- [41] CHAER, Galdino; DINIZ, Rafael Rosa Pereira; RIBEIRO, Elisa Antônia. A técnica do questionário na pesquisa educacional. Revista Evidência, v. 7, n. 7, 2012.
- [42] Componente Curricular da disciplina Química Básica e Estrutura. Disponível em: http://www.quimica.ufpb.br/dq/contents/documentos/disciplinas/quimica-basica_estrutura.pdf Acesso em: 20 de julho de 2023.

ANEXOS

ANEXO A – QUESTIONÁRIO 1 APLICADO AOS DISCENTES DA DISCIPLINA QUÍMICA BÁSICA E ESTRUTURA DA UFPB

Questionário (1/2)

Questionário aplicado na turma de química básica e estrutura da UFPB a fim de avaliar o uso dos programas MolView e TOP ISO 3D como ferramenta TIC's para o ensino de química.

Curso *

Texto de resposta curta

Período *

Texto de resposta curta

Você já ouviu falar de TIC's (Tecnologia de Informação e Comunicação)? *

- Sim, inclusive já usei.
- Não, nunca ouvi falar.
- Sim, mas nunca usei.

Os átomos se unem entre si para formar novas substâncias. Há milhões de substâncias que são conhecidas e tantas outras sendo projetadas por químicos sintéticos. Com os conhecimentos adquiridos até aqui, como você descreveria uma interação química? *

Texto de resposta longa

Houve dificuldade para responder a questão anterior? *

- Sim, não soube expressar a minha visão sobre o tema proposto.
- Não, soube expressar bem a minha visão sobre o tema proposto.
- Sim, porém apresentei dificuldade em expressar minha visão sobre o tema proposto.

ANEXO B – QUESTIONÁRIO 2 APLICADO AOS DISCENTES DA DISCIPLINA QUÍMICA BÁSICA E ESTRUTURA DA UFPB

Questionário (2/2)

Questionário aplicado na turma de química básica e estrutura da UFPB a fim de avaliar o uso dos programas MolView e TOP ISO 3D como ferramenta TIC's para o ensino de química.

Para você o TOP ISO 3D e o MolView são ferramentas de TIC's úteis para o ensino de Química? *

- Sim, após uso dessas ferramentas o meu entendimento visual melhorou significativamente.
- Não, mesmo após o uso sinto dificuldades em descrever sobre o tema proposto.
- Sim, sendo utilizados de forma correta e objetiva, essas TIC's servirá como uma ótima ferramenta para o...

⋮

Numa escala de 1 a 10, como você avalia o programa TOP ISO 3D como ferramenta de ensino de química? *

⋮

Numa escala de 1 a 10, como você avalia o programa MolView como ferramenta de ensino de química? *

Você já fez uso ou conhece algum outro aplicativo, site e/ou programas que são utilizados como ferramentas de ensino de química? *

- Sim.
- Não.

⋮

Se a resposta do quesito anterior foi sim, qual ou quais TIC's você fez uso ou conhece que são utilizados para o ensino de química? *

Texto de resposta longa

Como avalia o uso de TIC's para melhor compreensão visual dos fenômenos químicos? *

Texto de resposta longa