



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA

LÍVIA DE FARIA TOSTA

**DESENVOLVIMENTO DE ANIMAÇÕES 3D COMO FERRAMENTAS DIDÁTICAS
PARA O ENSINO DE QUÍMICA**

CAMPINAS
2018

LÍVIA DE FARIA TOSTA

**DESENVOLVIMENTO DE ANIMAÇÕES 3D COMO FERRAMENTAS DIDÁTICAS
PARA O ENSINO DE QUÍMICA**

**Dissertação de Mestrado apresentada ao Instituto de
Química da Universidade Estadual de Campinas como
parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de
Mestra em Química na área de Química Inorgânica**

Orientador: Prof. Dr. Pedro Faria dos Santos Filho

**O arquivo digital corresponde à versão final da Dissertação defendida pela
aluna Lívia de Faria Tosta e orientada pelo Prof. Dr. Pedro Faria dos Santos
Filho.**

CAMPINAS

2018

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Química
Camila Barleta Fullin - CRB 8462

T639d	Tosta, Livia de Faria, 1989- Desenvolvimento de animações 3D como ferramentas didáticas para o ensino de química / Livia de Faria Tosta. – Campinas, SP : [s.n.], 2018. Orientador: Pedro Faria dos Santos Filho. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química. 1. Animação por computador. 2. Aplicações didáticas. 3. Orbitais moleculares. 4. Água - Estudo e ensino. 5. Hidroformilação de olefinas. I. Santos Filho, Pedro Faria dos, 1956-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Química. III. Título.
-------	--

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Development of 3D animations as didactic material for chemistry teaching

Palavras-chave em inglês:

Computer animation

Teaching applications

Molecular orbitals

Water - Study and teaching

Hydroformylation of olefins

Área de concentração: Química Inorgânica

Titulação: Mestra em Química na área de Química Inorgânica

Banca examinadora:

Pedro Faria dos Santos Filho [Orientador]

Gildo Giroto Júnior

Melchior Antonio Momesso

Data de defesa: 10-12-2018

Programa de Pós-Graduação: Química

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Pedro Faria dos Santos Filho (Orientador)

Prof. Dr. Melchior Antonio Momesso (Centro Universitário de Itapira)

Prof. Dr. Gildo Giroto Júnior (IQ-UNICAMP)

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no processo de vida acadêmica do(a) aluno(a).

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pelo(a) aluno(a) **LÍVIA DE FARIA TOSTA**, aprovada pela Comissão Julgadora em 10 de dezembro de 2018.

***Dedico este trabalho a minha própria
superação, por todas as dificuldades que me vi capaz de
enfrentar, vencer e seguir caminhando sem baixar a cabeça.***

“Aquele que nunca viu a tristeza, nunca reconhecerá a alegria”

Kalil Gibran

AGRADECIMENTOS

Hoje, já aos meus quase 30 anos e com um pouco mais de maturidade e sensatez, olho para trás e vejo o quão importante esse mestrado foi não somente para o meu desenvolvimento intelectual e profissional, mas principalmente para o meu desenvolvimento humanístico.

Assim como quase tudo na vida, foi uma caminhada espinhosa e com muitas dificuldades, principalmente em minha vida pessoal. Fui tropeçando e caindo inúmeras vezes, até não me ver mais capaz de levantar. Foi nesse momento que recebi sopros de vida de pessoas às quais não tenho nem palavras para agradecer por todo apoio, colo, ombros e ouvidos amigos a mim concedidos.

Deixo aqui a minha profunda gratidão:

Ao meu orientador Pedro Faria, por todas as conversas, ideias, e por ter me apresentado o universo das animações 3D e do ensino de química.

A Manuel Baptista, por todos os ensinamentos do Blender® e por todas as vezes em que deixou suas tarefas de lado para me ajudar. Também agradeço a Dayane Baptista, por todo amor, carinho e guloseimas.

As minhas colegas de mestrado, Mayara e Larissa, pelas oportunidades, conversas e ajudas.

Ao Instituto de Química pelos quase nove anos de acolhimento.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo fomento concedido.

Ao meu grande amigo, Pietro Nicolodi, pela grande ajuda com o Blender e pelo amor e carinho de sua amizade.

Ao amor incondicional de minha mãe e meu pai, Regilena e Antonio Tosta, que apenas entenderei tal amor quando (ou se um dia) for mãe.

A minha prima Ana Célia, por ter me estendido a mão no momento mais difícil que já passei em toda minha vida.

Ao meu afilhado, Gabriel Wagner, por toda confiança, amor e carinho.

A minha irmã, Andreia Cazuza, que aprendeu a conviver comigo e caminha ao meu lado em todos os momentos.

Ao meu amigo João Kléber, pela sua parceria e amizade.

Ao meu amigo Oom, que me sopra muita vida, e que me inspira.

Ao meu amigo Igor Marques, por todo carinho, amparo e atenção.

A minha amiga Janaína Quitério, por todos os aprendizados, momentos de partilha, encantos e desencantos que vivemos juntas.

A Sheila Sanches, amiga e cabelereira, por cuidar da minha beleza, e por me dizer palavras de profundo ensinamento.

A minha amiga Luciana Teruel, que sempre me ouve e me estende a mão, com muito amor, sem me julgar.

A minha querida amiga Marília Sucena, por todas as conversas e por todo apoio e parceria, e a seu esposo e amigo, Luan.

A minha amiga Bruna Prior, que apesar da distância mora em meu coração.

A minha grande amiga Gigio, doce de pessoa, e seu querido esposo e amigo, Bruno.

A minha amada, Anninha Fischer, por uma amizade que vence distâncias.

A minha amiga mais flamenca Solange Bueno, a quem tenho profundo amor e carinho.

A minha irmã e miss Campinas 2018, Bruna Finda, por todo amor, amizade e carinho.

A minha grande amiga Renata Piva, por todos os anos de amizade, e por todo amor e carinho.

Ao meu grande amigo Rafael Ferreira, por todas as partilhas e momentos vividos juntos.

Ao meu grande amigo Japinha, por todo carinho, caronas, e por toda ajuda.

Ao meu avô Lazo, que me protege e cuida de mim de lá do céu.

A minha vizinha, Dita, por todo amor.

A toda minha família.

A todas as pessoas com quem pude conviver durante a minha estadia em Barão Geraldo.

As minhas terapeutas, Márcia Montenegro e Mailde Tripoli, por todo acolhimento, ensinamentos e por ajudarem a descobrir a minha força.

A arte e a moda, pois sem elas não seria nada.

A sagrada ayahuasca, aos índios Huni Kuin, aos Orixás e entidades da Umbanda, aos santos e anjos, por todo acolhimento, por me guiarem, me ouvirem e

olharem por mim.

A Deus, gratidão pela minha existência.

Ao meu amigo e poeta, Felipe di Caetano que escreveu esse poema:

*Conhecimento.
Um universo imenso
Algo que parta de dentro*

*Conhecimento
É algo que se possa aprender
E não cair no esquecimento
Que se possa entender*

*Conhecimento,
Ferramenta na medida certa
Um livro aberto pra futura
É uma porta aberta*

*Conhecimento
Algo que possa dizer
Conhecimento
Algo que possa querer*

*Deus semeou d'almas o universo todo
tudo o que vive, ri e canta e chora...
Tudo foi feito com o mesmo lodo,
purificado com a mesma aurora.
Ó mistério sagrado da existência.
Só hoje te adivinho,
ao ver que a alma tem a mesma essência,
pela dor, pelo amor, pela inocência,
quer guarde um berço, quer proteja um ninho!
Só hoje sei que em toda criatura,
desde a mais bela até a mais impura,
ou numa pomba ou numa fera brava,
Deus habita, Deus sonha, Deus murmura!...
Ah, Deus é bem maior do que eu julgava!...*

*Guerra Junqueiro
(Do poema "O Melro")*

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

RESUMO

As animações 3D como ferramentas didáticas para o ensino de química surgiram com o objetivo de sanar, ou ao menos minimizar as dificuldades de abstração e visualização requeridas para compreender fenômenos químicos, incrementando a didática dos professores em sala de aula, além de servirem como material suplementar à estudantes que pesquisarem por vídeos correlatos no *youtube*.

Dado que as animações 3D são um dos principais recursos tecnológicos que tomam cada vez mais espaço no universo da educação, elas podem ser entendidas como a ponte entre a química estudada na sala de aula e presenciada em laboratórios, e os fenômenos químicos que estão presentes no dia a dia dos alunos, conectando os universos macro e microscópico, ao incentivar a imaginação e facilitar a compreensão tridimensional de moléculas, orbitais e estruturas.

Os orbitais moleculares foram tema para seis das dez animações produzidas. A animação “*Molecular Orbitals: Water – H₂O*” é dividida em duas partes: a primeira explica as ligações intramoleculares da água, e a segunda retrata as ligações intermoleculares entre duas moléculas de água.

Metano e amônia foram contempladas nas animações: “*Molecular Orbitals: Methane – CH₄*” e “*Molecular Orbitals: Ammonia – NH₃*”.

As moléculas Diborano e Metilítio foram explicadas nas animações: “*Molecular Orbitals: Diborane – B₂H₆*” e “*Molecular Orbitals: Methyllithium – (CH₃Li)₄*”, visando desmistificar e corrigir distorções encontradas em livros didáticos de química de nível superior, tais como Huheey, Shriver e Housecroft (HUHEEY *et. al*, 1993, SHRIVER *et. al*, 2010, HOUSECROFT e SHARPE, 2012), que fazem o uso equivocado de duas teorias, Hibridização de Orbitais e Orbitais Moleculares, para explicar as ligações químicas dessas moléculas.

A estrutura da água também foi tema das animações: “*Clustered Water*” e “*NaCl dissolution in Water: a new approach*”, nas quais o conceito de água clusterizada é introduzido e utilizado para explicar de uma maneira inédita a dissolução do NaCl em água.

Por último, a hidroformilação catalítica é retratada nas animações:

“Hydroformylation of Propylene – step by step” e *“Hydroformylation of Propylene – nonstop”*, na qual a primeira mostra em detalhes todas as etapas envolvidas na hidroformilação catalítica do propileno, e a segunda traz uma visão geral e dinâmica do processo.

Legendas e textos explicativos são o diferencial de oito das dez animações produzidas, facilitando o entendimento dos expectadores enquanto assistem as animações.

As animações foram utilizadas em disciplinas de Química Inorgânica e Organometálicos, no próprio Instituto de Química. Algumas delas foram avaliadas pelos alunos através de questionários, e os resultados constam na dissertação.

ABSTRACT

The idea to develop 3D animations as didactic material for chemistry teaching arose with the intention of, at least, minimize the students' difficulties towards the abstraction and visualization of chemical phenomena, incrementing the teacher's didactic in the classroom, also working as a supplemental material to the students that search for correlated videos on *youtube*.

Given that the 3D animations are one of the main technological resources that have been taken more and more space in the universe of education, they can be understood as the bridge between the chemistry taught in the classrooms and witnessed in the laboratories, and the chemical phenomena that are present in the daily life of the students, connecting the macro and micro universes as it encourages imagination, and facilitate the tridimensional comprehension of molecules, orbitals and structures.

Molecular orbitals theory is the main topic for six out of the ten produced animations. The animation "*Molecular Orbitals: Water – H₂O*" is divided in two parts: the first one explains the intramolecular bonds in water, and the second depicts the intermolecular bonds amongst two water molecules.

The bonds in methane and ammonia are explained in the animations: "*Molecular Orbitals: Methane – CH₄*" and "*Molecular Orbitals: Ammonia – NH₃*".

Diborane and methyllithium are explained in the animations: "*Molecular Orbitals: Diborane – B₂H₆*" and "*Molecular Orbitals: Methyllithium – (CH₃Li)₄*", which aims to demystify and correct distortions presented in higher education textbooks, such as Huheey, Shriver and Housecroft (HUHEEY, 1993, SHRIVER, *et. al*, 2010, HOUSECROFT e SHARPE, 2012), that mistakenly use two theories, VB theory and hybridization, to explain the chemical bonding of these two molecules.

The structure of water is also depicted on the animations: "*Clustered Water*" and "*NaCl dissolution in Water: a new approach*", in which the concept of clustered water is introduced and used to explain, unprecedentedly, the NaCl dissolution in water.

Lastly, the catalytic hydroformylation is portrayed in the animations: "*Hydroformylation of Propylene – step by step*" and "*Hydroformylation of Propylene –*

nonstop", in which the first shows in detail all the steps involved in the catalytic hydroformylation of propylene, and the second shows a general vision of the process.

The presence of subtitles and explanatory texts is what stands out in eight of the ten animations, facilitating the understanding of the contents and new concepts.

The animations were presented in Inorganic and Organometallic chemistry courses on the Chemistry Institute. Some of them were evaluated by the students through questionnaires, and the results are shown in the thesis.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Cone da Aprendizagem, por Edgard Dale.	28
Figura 2. Representação simplificada do Cone da Aprendizagem de Edgard Dale.....	28
Figura 3. Arranjo espacial dos átomos na molécula de cafeína - $C_8H_{10}N_4O_2$	32
Figura 4. Sequência de planejamento de trabalho.....	36
Figura 5. Tópicos elaborados para produção da animação da amônia, que mostra a orientação espacial dos átomos da molécula, as combinações lineares e o diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares.	38
Figura 6. Sequência de apresentação dos resultados obtidos	50
Figura 7. Diagramas de níveis de energia dos orbitais moleculares.....	52
Figura 8. Geometrias Espaciais para a água, amônia e metano.	53
Figura 9. Representação espacial da molécula de diborano	54
Figura 10. Representação do metil-lítio. As esferas menores correspondem aos átomos de lítio e as maiores aos grupos metilas.	54
Figura 11. Representação de dois intermediários formados durante a hidroformilação.....	55
Figura 12. Eixos de orientação os orbitais atômicos de valência.....	56
Figura 13. Orientação dos orbitais 2s dos lítios, e dos HOMOs das metilas na molécula do metil lítio.	57
Figura 14. Explicação sobre as ligações químicas no diborano no livro Inorganic Chemistry de Shriver.	58
Figura 15. Explicação sobre as ligações químicas no diborano no livro Inorganic Chemistry de Huheey.	58
Figura 16. Representação do cubo distorcido do MeLi e de sua estrutura cristalina.	59
Figura 17. Grupo pontual da amônia, NH_3 . Elementos de simetria existentes na molécula de amônia.	61
Figura 18. Diagrama de Energia dos Orbitais Moleculares adaptados por simetria da amônia, NH_3 . ..	62
Figura 19. Formação dos OM da amônia a partir do contorno das CLAOs... ..	65
Figura 20. Orbitais Moleculares adaptados por simetria da amônia, apresentados no capítulo 2 do livro Inorganic Chemistry de Shriver.	66

Figura 21. Metano reproduzido através de um kit molecular.	68
Figura 22. Orbitais Moleculares adaptados por simetria do metano.	69
Figura 23. Orbitais moleculares do metano em website da Oregon State University.	70
Figura 24. Diferenças de sinais entre as CLAOs que originam os orbitais ligantes, e os antiligantes no diborano.	80
Figura 25. Reações dos organolítios e reagentes de Grignard.	81
Figura 26. Síntese do álcool isopropílico através do ataque nucleofílico ao acetaldeído.	85
Figura 27. Cristais de amostras de água submetidas a diversas palavras.	95
Figura 28. Da esquerda para direita: cristal de amostra de gelo ártico, e cristal de amostra de água do rio Amazonas.	95
Figura 29. Prisma, hexâmero formado de moléculas de água.	98
Figura 30. Microcluster de água - caixa hexamérica.	98
Figura 31. Microcluster de água - caixa pentagonal.	99
Figura 32. Representação da água como uma molécula isolada em um livro didático de química utilizado no ensino superior.	101
Figura 33. Resultado da avaliação da eficácia da animação “NaCl dissolution in water: a new approach” para turma QG111.	111
Figura 34. Resultado da avaliação da eficácia da animação “NaCl dissolution in water: a new approach” para turma QG191.	112

LISTA DE QUADROS

Quadro 1. Tópicos a serem trabalhados dentro de cada tema escolhido na Etapa 1.....	37
Quadro 2. Assuntos a serem trabalhados dentro de cada tema escolhido na Etapa 1.....	46
Quadro 3. Perguntas e respostas esperadas depois da aula do questionário aplicado para avaliação da animação “NaCl dissolution in water: a new approach”.	109
Quadro 4. Parâmetros de classificação das respostas dos alunos das turmas de QG191 e QG111 as perguntas dos questionários de avaliação da eficácia da animação “NaCl dissolution in water: a new approach”.....	111

LISTA DE VÍDEOS

Vídeo 1. Animação Fantasmagorie, criada por Emile Cohl, em 1908.	23
Vídeo 2. Curta Moving On, produzido pelo animador britânico Ainslie Henderson.	24
Vídeo 3. Backstage de produção da animação Moana.	24
Vídeo 4. Estratégias para simulação dos movimentos do cabelo da personagem Valente.	26
Vídeo 5. Animação que mostra o processo de desnaturação de proteínas.	31
Vídeo 6. Trechos de animações produzidas através do software Blender.	39
Vídeo 7. Exemplo de tutorial do Blender® no youtube que ensina a criar uma estrela 3D.	41
Vídeo 8. Animação “Molecular Orbitais: Ammonia – NH_3 ”.	63
Vídeo 9. Animação “Molecular Orbitals: Methane – CH_4 ”.	71
Vídeo 10. Animação “Molecular Orbitals: diborane – B_2H_6 ”.	77
Vídeo 11. Animação “Molecular Orbitals: Methyllithium – $(\text{CH}_3\text{Li})_4$ ”.	82
Vídeo 12. Vídeo que explica a hidroformilação catalítica em 30 segundos.	87
Vídeo 13. Videoaula sobre a hidroformilação catalítica.	88
Vídeo 14. Animação “Hydroformylation of propylene –step by step”.	89
Vídeo 15. Animação “Hydroformylation of propylene - nonstop”.	91
Vídeo 16. Animação “Molecular Orbitals: water – H_2O , part 1”.	102
Vídeo 17. Animação “Molecular Orbitals: water – H_2O , part 2”.	104
Vídeo 18. Animação “Clustered Water”.	105
Vídeo 19. Animação “NaCl dissolution in Water: a new approach”.	106

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Especificações técnicas do computador utilizado para produção das animações 3D.	40
Tabela 2. Animações produzidas dentro de cada assunto apresentado no Quadro 2.	47

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	22
1.1	Mas afinal, o que constitui uma animação?	23
1.2	Impactos das Animações 3D na Memória e no Ensino de Química	26
2	OBJETIVOS	35
3	PLANEJAMENTO E EXECUÇÃO DO TRABALHO	36
3.1	Pré-produção/Planejamento	36
3.1.1	Escolha dos temas	36
3.1.2	Elaboração de cada animação	37
3.2	Produção	38
3.2.1	Execução das animações – recursos computacionais	39
3.2.2	Dificuldades encontradas	42
3.3	Pós-produção	43
3.3.1	Avaliação da eficácia das animações em disciplinas oferecidas no IQ da Unicamp	43
3.3.2	Disponibilização das animações	45
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	46
4.1	Recomendações gerais de utilização das animações	49
4.2	estratégia de apresentação das animações	50
4.3	Teoria dos Orbitais Moleculares	51
4.4	Representação tridimensional das Moléculas e Geometria Espacial	52
4.5	Posicionamento de Orbitais Atômicos de Valência nas Ligações Químicas	55
4.6	Compostos Deficientes de Elétrons	57
4.6.1	Diborano	57
4.6.2	Metil-lítio	59
4.7	Animação “Molecular Orbitals: Ammonia – NH ₃ ”	60

4.7.1	Justificativas da escolha da amônia.....	61
4.7.2	Etapas da animação “Molecular Orbitals: Ammonia – NH ₃ ”	63
4.7.3	Sugestões de utilização da animação “Molecular Orbitals: Ammonia– NH ₃ ”.....	66
4.8	Animação “Molecular Orbitals: Methane – CH ₄ ”	67
4.8.1	Justificativas da escolha do metano	69
4.8.2	Etapas da animação “Molecular Orbitals: Methane – CH ₄ ”	71
4.8.3	Sugestões de utilização da animação “Molecular Orbitals: Methane – CH ₄ ”	73
4.9	Animação “Molecular Orbitals: Diborane – B ₂ H ₆ ”	74
4.9.1	Justificativas da escolha do diborano	76
4.9.2	Etapas da animação “Molecular Orbitals: Diborane – B ₂ H ₆ ”	77
4.9.3	Sugestões de utilização da animação “ <i>Molecular Orbitals: Diborane – B₂H₆</i> ”	79
4.10	Animação “Molecular Orbitals: Methyllithium – (CH ₃ Li) ₄ ”	80
4.10.1	Justificativas da escolha do metil-lítio	81
4.10.2	Etapas da animação “Molecular Orbitals: Methyllithium – (CH ₃ Li) ₄ ”	82
4.10.3	Sugestões de utilização da animação “Molecular Orbitals: Methyllithium – (CH ₃ Li) ₄ ”	84
4.11	hidroformilação catalítica	86
4.11.1	Justificativas da escolha da hidroformilação catalítica	87
4.11.2	Etapas da animação “Hydroformylation of propilene – step by step”	89
4.12	Animação “Hydroformylation of propilene – nonstop”.....	90
4.12.1	Sugestões de utilização das animações “hydroformylation of propylene: step by step” e “Hydroformylation of propylene: nonstop”	92
4.13	A água	93
4.13.1	Relevância da água clusterizada e estudos científicos	94

4.13.2 Principais modelos abordados nas animações da água	97
4.13.3 Justificativa da escolha da água	100
4.13.4 Etapas da Animação “Molecular Orbitals: Water–H ₂ O, part 1”	102
4.13.5 Etapas das animações “Molecular Orbitals: Water – H ₂ O, part 2”.	103
4.13.6 Etapas da Animação “ <i>Clustered Water</i> ”	104
4.13.7 Etapas da Animação “NaCl dissolution in water: a new approach”	105
4.13.8 Sugestões de utilização das animações da água	107
4.14 RESULTADOS DA AVALIAÇÃO DA EFICÁCIA DA ANIMAÇÃO “NaCl Dissolution in water: a new approach”	108
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	117
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	120

1 INTRODUÇÃO

As Tecnologias da Informação e Comunicação, TIC, tornaram-se parte do nosso cotidiano, sendo praticamente inimaginável vivermos sem celulares, tablets e computadores. Até mesmo os relógios tornaram-se *smart*, conectando-se com a internet e possibilitando, inclusive, a visualização de mensagens de *whatsapp*.

Entende-se por TIC:

[...] todos os meios técnicos usados para tratar a informação e auxiliar na comunicação. [...] TIC consistem em [...] quaisquer formas de transmissão de informações e correspondem a todas as tecnologias que interferem e mediam processos informacionais e comunicativos dos seres. (OLIVEIRA *et. al*, 2015, p. 77-78).

O avanço das TIC permitiu não somente a evolução e incorporação de aparelhos eletrônicos em nosso dia a dia, mas também o desenvolvimento de novas ferramentas didáticas como hipermídias e animações 3D.

Paralelamente ao desenvolvimento das TIC, a evolução da conectividade através da internet possibilitou que essas novas ferramentas comesçassem a ser utilizadas pelo professor em sala de aula como uma complementação a lousa e giz, e pelos estudantes em sua própria casa para suplementar os livros didáticos e anotações feitas durante a aula (BERNEY e BÉTRANCOURT, 2016).

Quando bem fundamentadas, as animações 3D tornam-se uma excelente ferramenta para os professores utilizarem em sala de aula. Ademais, por tratarem-se de um recurso digital, elas podem ser acessadas através das TIC pelos alunos, independentemente de onde estejam:

Ferramentas de TIC podem ser melhoradas através de animações 3D com explicações apropriadas, cores atrativas e efeitos sonoros. Além do mais, as animações 3D podem ser incluídas na internet, e-learning, CDs, vídeos interativos, aparelhos celulares, mídias sociais, etc. (KUMAR, 2016, p. 392).

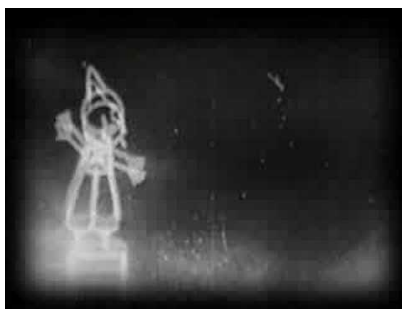
Entretanto, para que se entenda a verdadeira importância das animações

3D como ferramentas didáticas para o ensino de química, torna-se trivial a compreensão acerca da definição e estruturação geral de uma animação.

1.1 MAS AFINAL, O QUE CONSTITUI UMA ANIMAÇÃO?

Uma animação é o resultado de vários *frames*, ou quadros, que quando agrupados em uma sequência lógica, passam a sensação de movimento e fluidez ao espectador (ANIMAÇÃO, 2018). A junção de vários *frames* compõe uma cena, e um grupo de cenas compõe a animação.

A técnica de animação mais primordial é o *stop motion*, na qual os personagens e elementos cenográficos são desenhados a mão, e depois fotografados em várias posições, sendo cada fotografia equivalente a um *frame*. Para criar a ilusão de movimento, as fotografias são postas em sequência e reproduzidas em cinematógrafos. *Fantasmagorie* é a pioneira das animações, criada em 1908 através da técnica de *stop motion*, pelo francês Emile Cohl, conforme Vídeo 1 (MOREIRA, 2013).



Vídeo 1. Animação *Fantasmagorie*, criada por Emile Cohl, em 1908.
Link de acesso: <https://www.youtube.com/watch?v=aEAObel8ylE>

Apesar de ser um estilo arcaico, estúdios ainda produzem animações através da técnica de *stop motion*. A diferença é que hoje em dia as fotografias são digitalizadas e a animação final é produzida no computador. O curta *Moving On*, do animador britânico Ainslie Henderson, mostrado no Vídeo 2, é um exemplo de um *stop motion* computadorizado.



Vídeo 2. Curta MovingOn, produzido pelo animador britânico Ainslie Henderson.

Link de acesso: <https://www.youtube.com/watch?v=X-nWklTWMoQ>

O advento da tecnologia permitiu a criação de computadores cada vez mais potentes e capazes de processar e criar imagens em definições nunca antes imaginadas. Assim, o processo de produção das animações modernas é quase 100% digital, feito em computadores com alta capacidade de processamento.

Contudo, as etapas de criação e modelagem iniciais de personagens e alguns objetos ainda são realizadas à mão por desenhistas e escultores, devido à grande quantidade de detalhes almejada pelos estúdios. Após modeladas, as personagens e objetos são fotografadas, digitalizadas e trabalhadas em softwares de tratamento de imagem como o *Photoshop*, e produção de animações, como o Blender®. O Vídeo 3 mostra o *backstage* de produção da animação Moana, dos estúdios Disney, 2016.



Vídeo 3. Backstage de produção da animação Moana.

Link de acesso: <https://www.youtube.com/watch?v=0Z-0EskUcDs>

Para produzir as animações que serão discutidas mais adiante, optou-se por trabalhar com o Blender®, que se trata de um:

[...]software de código aberto (*open source*) que possui vários pacotes que viabilizam a criação em três dimensões. O software suporta todo o *pipeline* de criação 3D, desde a modelagem, *rigging*, animação, simulação, renderização, composição, *motion tracking*, até edição de vídeo e criação de jogos (BLENDER, 2018, *home page*).

O código fonte do Blender® é escrito através da linguagem de programação *python*TM, que lê os comandos inseridos pelo usuário, transformando-os em movimento na tela.

Softwares *open source* são amplamente utilizados por permitirem a customização de seu código fonte para que o usuário personalize texturas, fontes, comandos, e até crie novos módulos dentro do software de acordo com as necessidades do trabalho a ser desenvolvido.

Comparando-se com o processo manual de antigamente, os softwares modernos de produção de animação permitem que os *frames* sejam facilmente programados através de recursos que se tornam cada vez mais sofisticados.

As linguagens de programação tornaram-se inteligentes a ponto de: se um usuário programa um cubo para estar nas coordenadas x: 1, y: 0, z: 0, no tempo 00 segundos, e depois nas coordenadas x: 2, y: 3, z: 0, no tempo 10 segundos, o software automaticamente delineia um caminho para esse cubo de suas coordenadas iniciais, até as finais, sem a necessidade de o usuário programar os segundos intermediários, otimizando o processo. Caso o usuário queira modificar o caminho automaticamente programado, o software disponibiliza ferramentas para tal. Os softwares também permitem a programação de parâmetros como rotações, transparências, tamanhos, iluminação e muitos outros.

Hoje em dia, movimentos reais de objetos também podem ser simulados nas animações através da inserção nos softwares de modelos matemáticos e físicos que descrevem a movimentação desejada, conforme apresentado no link contido no Vídeo 4. Para acessar o vídeo, basta clicar na figura segurando a tecla Ctrl do teclado, ou clicar no link contido na legenda.



Vídeo 4. Estratégias para simulação dos movimentos do cabelo da personagem Valente.
O vídeo pode ser encontrado no link: <https://www.youtube.com/watch?v=YeYW8TIWLG8&t=44s>

O Vídeo 4 mostra o exemplo da modelagem e programação dos movimentos dos cabelos da personagem Valente, do filme Valente da Pixar, de 2012. Uma equipe de engenheiros, físicos e matemáticos estudaram a movimentação de um cabelo encaracolado real, estabelecendo um modelo matemático que reproduz os movimentos o mais fielmente possível. Esse modelo foi passado para o software de produção de animação utilizado pela Pixar, no qual os parâmetros do modelo foram ajustados e programados, chegando ao resultado observado nas telas dos cinemas.

Portanto, já que as animações apresentam tamanho potencial para o entretenimento, porque não passar a produzir animações 3D com viés pedagógico, que retratem assuntos relacionados à química? Um dos maiores potenciais apresentados pela utilização de animações como ferramentas didáticas no ensino de química é o impacto positivo na memória, já que as animações contribuem para que os alunos consigam visualizar, muito mais clara e objetivamente, o formato e movimentações de orbitais, átomos e moléculas.

1.2 IMPACTOS DAS ANIMAÇÕES 3D NA MEMÓRIA E NO ENSINO DE QUÍMICA

Evidências de fenômenos químicos, como as mudanças de cor são visíveis a olho nu. Porém, as alterações estruturais no meio reacional que levam a tais evidências ocorrem a nível molecular e, logo, não são visíveis. As animações 3D permitem explicar visualmente tais alterações estruturais.

Quando associadas a professores bem preparados, assim como a um

bom material textual, as animações 3D possibilitam que os alunos aprofundem seus conhecimentos sobre os fenômenos químicos que ocorrem em escalas atômicas (GOBERT, 2005).

A utilização de animações como ferramentas didáticas está diretamente relacionada as habilidades espaciais dos alunos, que podem ser definidas como:

[...]a capacidade para manipular mentalmente figuras tridimensionais complexas, [...] gerar uma imagem mental, avaliar as transformações e armazenar as modificações produzidas. (DA SILVA, *et. al*, 2011, p. 64).

Na química, as habilidades espaciais contemplam as visualizações tridimensionais, rotação e reflexão de imagens bidimensionais, ou até mesmo identificação e caracterização de estereocentros em moléculas. (HARLE e TOWNS, 2011).

As animações 3D evidenciam e mostram em tamanho ampliado estruturas moleculares, permitindo que o professor trabalhe em sala de aula as transformações espaciais que ocorrem com tais estruturas nos mais diversos meios reacionais, e que são difíceis de serem visualizadas e compreendidas através somente de figuras bidimensionais e leitura de textos.

A argumentação pedagógica da relevância das animações 3D no ensino de química pode ser fundamentada no Cone da Aprendizagem, introduzido em 1946 por Edgard Dale, famoso educador norte americano. O Cone apresenta a conexão entre as diversas formas de transmissão de conhecimento, o quanto nosso cérebro é capaz de absorver e o que somos capazes de aprender relativo a cada forma de transmissão, conforme a Figura 1.

O intuito principal do cone é organizar as experiências de aprendizado das mais concretas (base do cone), até as mais abstratas (topo do cone). (DAVIS e SUMMERS, 2015).

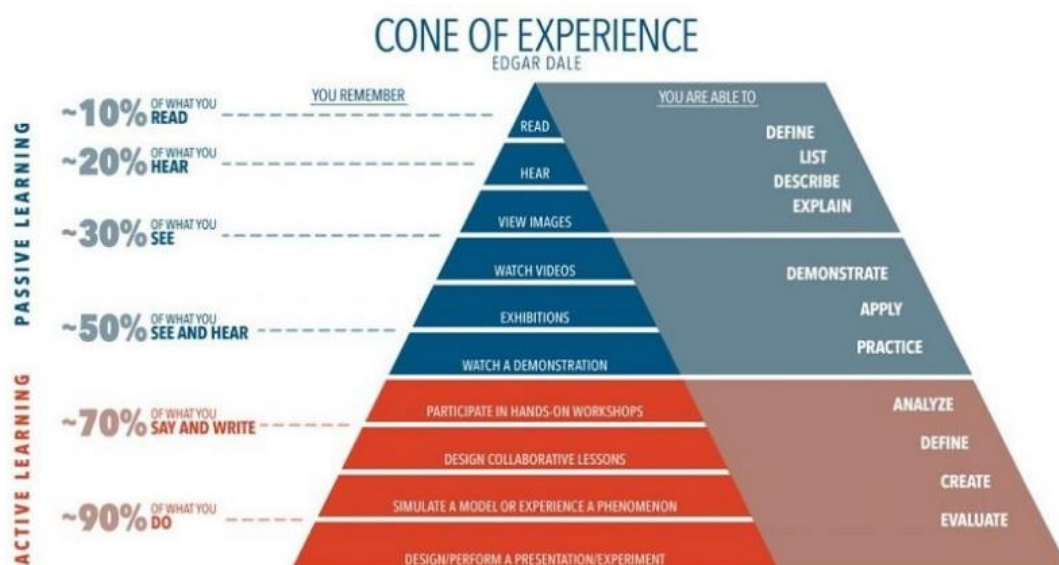


Figura 1. Cone da Aprendizagem, por Edgard Dale.

Fonte: <https://elearningindustry.com/cone-of-experience-what-really-is>.

A Figura 2 mostra o cone de maneira simplificada, dividido em três formas globais de transmissão de conhecimento.



Figura 2. Representação simplificada do Cone da Aprendizagem de Edgard Dale. (DAVIS e SUMMERS, 2015).

O topo do cone, caracterizado pelo verbo “falar” (*tell*, em inglês), corresponde as formas mais abstratas de aprendizagem, que ocorrem através da leitura, fala, e interpretação de imagens. Aulas expositivas e livros didáticos encaixam-se nesta primeira porção do cone, em que somos capazes de desenvolver habilidades como definir, listar, descrever e explicar. (DAVIS e SUMMERS, 2015). Assim, quando estudamos algo através das formas contidas no topo do cone, conseguimos lembrar de no máximo 30% de todo conteúdo estudado.

A região central do cone é identificada pelo verbo “apresentar” (*show*, do inglês). Vídeos, exibições e demonstrações são aqui contempladas, englobando as animações 3D. Ao aprendermos através de recursos animados (sejam humanos ou computacionais), desenvolvemos as habilidades de demonstrar, aplicar e praticar, que contribuem para que nos lembremos de até 50% de tudo que estudamos. (DAVIS e SUMMERS, 2015). Portanto, as animações 3D possuem um impacto maior no aprendizado quando comparadas a aulas meramente expositivas e leitura de textos, livros didáticos e interpretação de imagens estáticas.

O topo e centro do cone correspondem ao aprendizado passivo, no qual o estudante participa como um ser acrítico, e como um mero reproduzidor das informações e tarefas passadas. O aprendizado passivo não desenvolve a criatividade, podendo inclusive atuar como agente supressor da curiosidade e motivação inerente dos estudantes. (VASCONCELOS, *et. al*, 2003).

Porém, a base do cone contempla o aprendizado ativo, sendo representada pelo verbo “fazer” (*do*, do inglês). A base do cone é concreta, composta por experiências dinâmicas em que o aprendizado acontece através da interação. Os acontecimentos da própria vida cotidiana, experimentos laboratoriais, encenações teatrais e atividades que envolvam tarefas manuais são exemplos de formas ativas de aprendizado que motivam os alunos, estimulando a curiosidade e a criatividade ao contrário do que se observa no aprendizado passivo.

Através de experiências como as citadas acima, conseguimos desenvolver as habilidades de analisar, criar e avaliar, chegando a lembrar de até 90% de todo o conteúdo ensinado (DAVIS e SUMMERS, 2015).

O Cone da Aprendizagem apresenta informações que podem ser utilizadas para a associação de experiências visando a complementação de metodologias que otimizem o ensino. Isoladamente, as animações 3D constituem uma ferramenta passiva de ensino por não serem interativas. Porém, quando associadas a alguma metodologia ativa, elas podem contribuir para um ganho significativo de aprendizado. Exemplos de associações são apresentadas e discutidas no item 4.1.

Foi a partir do século XIX que as pesquisas em habilidades espaciais

começaram a crescer, mostrando que tais habilidades não são imutáveis, podendo ser melhoradas através de incentivos visuais que contribuam para o melhor aproveitamento dos estudantes em disciplinas de cálculo, física e química (HARLE e TOWNS, 2011).

Dos anos 2010 em diante, houve um grande aumento nas pesquisas de ferramentas multimídias. Para essas pesquisas, a definição de aprendizado ganha um novo sentido, referindo-se à capacidade de construção de modelos mentais de sistemas dinâmicos, considerando suas características espaciais, temporais e funcionais. (BERNEY E BÉTRANCOURT *et al*, 2016).

As animações 3D têm mostrado grandes benefícios para a memorização e compreensão de tais sistemas na biologia e ciências naturais. Elas proporcionam aos estudantes elementos para que sejam capazes de construir mentalmente representações hierarquicamente organizadas, representar detalhadamente o comportamento e movimento dos elementos que compõe os sistemas dinâmicos, além de compreender a ordem temporal de tais sistemas (BERNEY E BÉTRANCOURT *et al*, 2016).

As habilidades espaciais estão ligadas a memória:

A habilidade espacial é um fator importante no aprendizado através de ferramentas multimídias, já que o aprendiz necessita codificar a informação espacial da memória sensorial, manter uma representação interna na memória operacional, e performar transformações espaciais para integrar a informação na memória de longo prazo. (KORAKAKIS, *et. al*, 2012, p. 145).

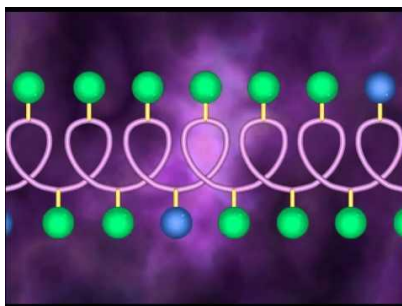
Ou seja, a informação captada através de nossos olhos é processada em nosso cérebro, até que possamos, de fato, armazená-la em nossa memória de longo prazo, consolidando o aprendizado. Assim, quanto melhor for a qualidade da informação transmitida, mais fidedigna será a sua representação criada em nossa memória operacional, auxiliando a fixar a informação com o mínimo de distorção em nossa memória de longo prazo.

O desenvolvimento e estímulo das habilidades espaciais ocorre através de atividades que envolvam recursos visuais e a manipulação de objetos virtuais ou físicos. A frequência, tipos e quantidade de estímulos aos quais os alunos tem

acesso não somente na escola, mas também em suas vidas cotidianas, interfere diretamente no grau de desenvolvimento de tais habilidades, caracterizando a sua particularidade e relativização a cada indivíduo.

Ao fornecerem informações visuais coesas e de qualidade, as animações 3D tornam-se ferramentas essenciais aos professores, que podem utilizá-las para, ao menos, minimizar suas dificuldades em desenvolver as habilidades espaciais em sala de aula, possibilitando que os estudantes mudem e completem os modelos que criam mentalmente (KORAKAKIS *et. al*, 2012).

Desta maneira, as animações 3D contribuem para diminuição da relativização das habilidades visuais devido ao nível de detalhamento que se pode alcançar. Quanto mais detalhes houver na estrutura representada na animação, mais coesas serão as imagens mentais construídas pelos alunos. O Vídeo 5 mostra um exemplo de uma animação que retrata o processo de desnaturação das proteínas.



Vídeo 5. Animação que mostra o processo de desnaturação de proteínas.
O vídeo pode ser acessado através do link: <https://www.youtube.com/watch?v=O5uqdxQyJj8>

Apesar da animação apresentada no Vídeo 5 utilizar estruturas poligonais simplificadas para explicar a desnaturação, todas as transformações moleculares envolvidas no processo são representadas. Comparando-a a uma possível explicação do mesmo processo através de figuras 2-D estáticas, a animação permite que os alunos reproduzam mentalmente o fenômeno da desnaturação com maior facilidade, otimizando o aprendizado.

Para além das habilidades espaciais, os estudantes de química são requisitados a desenvolver as chamadas habilidades visuoespaciais, que consistem em:

[...] gerar e reconhecer desenhos de moléculas e símbolos, utilizando-os para estabelecer linhas de raciocínio coesas. (HARLE e TOWNS, 2011, p. 356).

O desenvolvimento de tais habilidades é de suma importância, pois facilita o processo comunicativo da química, já que moléculas podem ser representadas através de símbolos e fórmulas químicas, como H_2O , quanto por representações da organização espacial dos átomos constituintes, conforme a Figura 3.

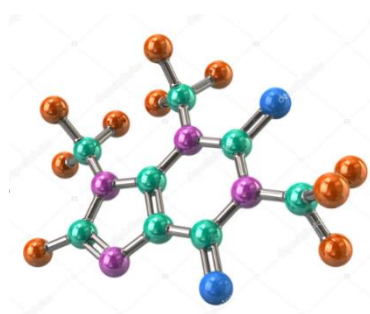


Figura 3. Arranjo espacial dos átomos na molécula de cafeína - $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2$
Fonte: <https://nl.depositphotos.com/portfolio-3554337.html?view=206918684>

Além do mais, os estudantes de química devem tornarem-se capazes de explicar fenômenos que são observáveis à olho nu, através da associação de tais representações e simbologias ao conhecimento de química. (HARLE e TOWNS, 2011).

Estudos têm comprovado que muitos estudantes não conseguem reproduzir fielmente representações de moléculas e estruturas químicas, principalmente devido à falta de conhecimento sobre o assunto, ou ao subdesenvolvimento de habilidades visuoespaciais. (HARLE e TOWNS, 2011).

Muitas vezes os estudantes conseguem formar representações 3D a partir de imagens 2-D, porém mostram-se incapazes de rotacioná-las mentalmente, ou de interpretar como a perspectiva/ profundidade do objeto se altera conforme o mesmo é rotacionado. Essa defasagem que tem grandes chances de acontecer quando o professor conta apenas com materiais imagéticos bidimensionais em sala

de aula, pode ser sanada através das animações 3D, que mostram em detalhes os ângulos e profundidades de moléculas e estruturas químicas.

Em 2016, um grupo de pesquisadores da Sultan Qaboos University (SQU), da cidade de Seeb, em Omã, realizaram um estudo para investigar a eficácia da utilização de 10 animações 3D no aprendizado de conceitos relacionados à oxirredução e eletroquímica. Os participantes eram estudantes de 18 anos de idade, e foram estabelecidos um grupo experimental com 32 alunos, e um grupo controle com 28 alunos (AL-BALUSHI *et. al*, 2017).

A cada aluno do grupo experimental foi designado um tablet através do qual as animações e demais conteúdos relacionados ao experimento eram livremente acessados. O experimento durou nove semanas, com duas aulas diárias. Testes para avaliar as habilidades espaciais e o raciocínio científico foram aplicados a ambos os grupos, antes e depois da conclusão do estudo.

Os resultados mostraram que os alunos do grupo experimental que interagiram com as animações 3D durante o estudo, obtiveram desempenho significativamente maior com relação às habilidades espaciais do que os alunos do grupo de controle, mostrando pontuações superiores nos testes aplicados após a finalização do estudo.

Relatos de alguns dos estudantes que participaram do grupo experimental são:

“As animações fazem parecer tão real! Nós pudemos ver como o gás estava subindo pelo cátodo. Isso é muito melhor do que simplesmente ler os livros texto”, “Interessante e não pode ser esquecido”, “visualizar interações em duas e três dimensões nos ajudou a entender como isso acontece”. (AL-BALUSHI, *et. al*, 2017, p. 77).

Outro estudo realizado por um grupo da Universidade de Nebraska—Lincoln, Estados Unidos, publicado em 2012 no periódico *Journal of Chemical Education*, analisa o impacto da inclusão de trechos de filmes cinematográficos no aprendizado de estudantes de química. Os autores justificam que:

Um jeito efetivo de transformar conteúdo em conhecimento tal que os estudantes possam utilizá-lo em novos contextos, é o seu ancoramento à assuntos que eles já saibam. (FREY *et. al*, 2012, p. 1138).

A utilização de trechos de filmes famosos bem produzidos, com atores populares e que contenham efeitos especiais que remetam à química é uma excelente alternativa.

Os primeiros 14 minutos do filme “Os Caçadores da Arca Perdida”, de Indiana Jones, foram exibidos a uma turma de alunos do ensino fundamental, para ensinar ciência dentro de um contexto da exploração da América Latina. Em uma das cenas apresentadas, o personagem Indiana Jones troca um saco de ouro por um saco de areia similar em tamanho.

Através da contextualização do filme, os estudantes aprenderam a estimar o volume do saco e calcular a massa de ouro e areia partindo da densidade dos materiais. Os autores concluíram que:

Estudantes que assistiram ao trecho do filme aumentaram a compreensão e habilidade em utilizar a informação, além de melhorar a memorização a longo prazo de fatos, comparados a estudantes que apenas estudaram o conteúdo. O trecho do filme possibilitou que os estudantes contextualizassem a nova informação. Isso permitiu com que eles conectassem novos fatos ao filme e a seus conhecimentos prévios. [...] estudantes assimilam melhor a informação quando o aprendizado está associado a animações, do que a imagens estáticas. (FREY *et. al*, 2012, p. 1138).

Devido à vasta ampliação do uso das TICs como ferramentas didáticas, e com base nos resultados de estudos como o da SQU, e na boa aceitação em nível mundial do portal www.quimica3d.com, resolvemos produzir animações 3D que pudessem dar suporte a professores e alunos de química, em disciplinas em que a capacidade de abstração dos alunos fosse fundamental para a compreensão de assuntos específicos.

2 OBJETIVOS

Com base na grande relevância e no alto impacto que as animações têm como ferramentas complementares ao ensino de química, o presente projeto teve como objetivo a elaboração de animações 3D que representem macroscopicamente fenômenos químicos que ocorrem em escalas microscópicas, proporcionando novos olhares e facilitando a compreensão de tais fenômenos aos estudantes.

Além disso, pretendemos propor abordagens diferenciadas de moléculas amplamente utilizadas nos livros didáticos de química de nível superior, explicando visualmente, de maneira simplificada, suas ligações químicas e estabilidade.

Por último, pretendemos avaliar a eficiência do material produzido através da utilização de ao menos uma das animações produzidas em disciplinas oferecidas pelo Instituto de Química da Unicamp.

3 PLANEJAMENTO E EXECUÇÃO DO TRABALHO

O fluxo adotado de trabalho é dividido em: Pré-produção/Planejamento (Etapas 1 e 2), Produção (Etapa 3) e Pós-produção (Etapas 4 e 5), conforme Figura 4.

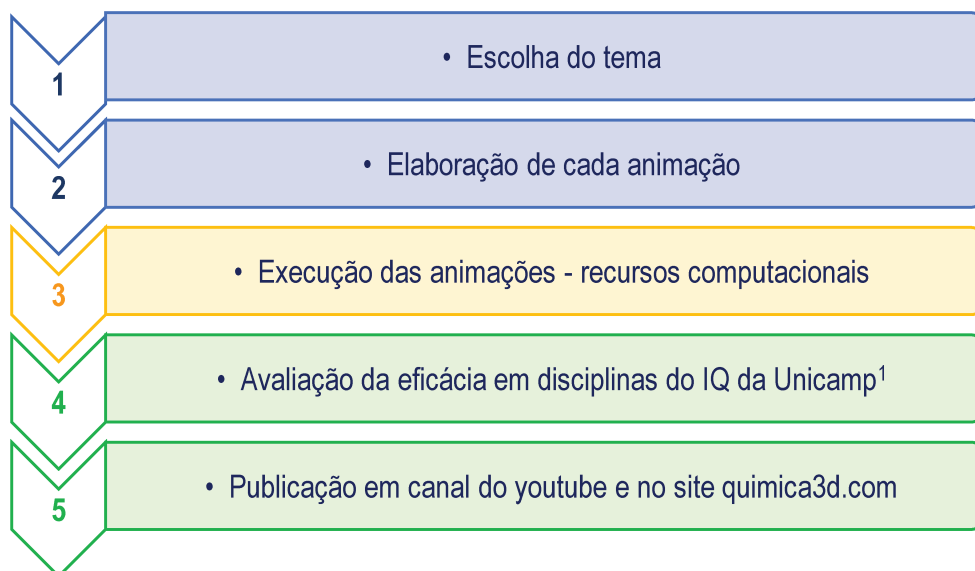


Figura 4. Sequência de planejamento de trabalho. ¹ A avaliação da eficácia foi realizada para a animação “NaCl dissolution in water: a new approach”. A metodologia e os resultados obtidos encontram-se nos itens 3.3.1 e 4.14.

Todas as etapas foram cumpridas para todas as dez animações produzidas, com exceção da Etapa 4, que contempla a avaliação da eficácia, realizada apenas para a animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

3.1 PRÉ-PRODUÇÃO/PLANEJAMENTO

Os temas e pontos a serem trabalhados nas animações eram definidos na pré-produção. As decisões tomadas nessa etapa serviam de guia para toda a execução do trabalho.

3.1.1 ESCOLHA DOS TEMAS

A primeira etapa constituiu-se na escolha dos temas que seriam abordados nas animações. Foram escolhidos temas que são de difícil assimilação

ou entendimento devido à necessidade intrínseca da capacidade de abstração, como se observa na abordagem da teoria dos orbitais moleculares, ou mesmo em fenômenos envolvidos na dissolução de sólidos iônicos em água, além de conceitos que são ambíguos na literatura, como aqueles utilizados para explicar compostos deficientes de elétrons.

Ademais, procurou-se escolher temas que possibilitem a produção de animações que permitam a representação e discussão de mais de um assunto por animação. Pensamos também que seria conveniente que as animações desenvolvidas fossem aplicadas de imediato em disciplinas oferecidas no IQ/UNICAMP.

Dentre os temas possíveis, escolhemos trabalhar com a Teoria dos Orbitais Moleculares, TOM, estrutura da água, dissolução de compostos iônicos em água e catálise—hidroformilação catalítica.

3.1.2 ELABORAÇÃO DE CADA ANIMAÇÃO

Na segunda etapa da pré-produção, eram elaborados, dentro de cada tema escolhido na Etapa 1, os tópicos de cada animação, conforme mostrado no Quadro 1.

Quadro 1. Tópicos a serem trabalhados dentro de cada tema escolhido na Etapa 1.

Estrutura da Água	Dissolução de compostos iônicos em água	Teoria dos Orbitais Moleculares	Hidroformilação Catalítica
1º Hexâmeros e unidades monoméricas de água	1º Estrutura do retículo de NaCl	1º Posicionamento dos OAs na molécula	1º Breve explicação sobre o ciclo da hidroformilação catalítica
2º Formação da água clusterizada	2º Processo de dissolução através do conceito da água clusterizada	2º CLOAs	2º Ciclo catalítico enfatizando as reações que ocorrem entre os substratos; formação e ruptura de ligações químicas ao longo do processo
	3º Engaiolamento iônico	3º Construção e representação dos OMs	3º Mudanças de geometria dos complexos intermediários durante o ciclo
		4º Construção dos Diagramas de Energia dos Orbitais Moleculares	

A determinação dos tópicos de uma animação auxilia na escolha das ferramentas e recursos do Blender® a serem utilizados, visando à otimização do processo de produção. Um exemplo elaborado para a animação “*Molecular Orbitals: Ammonia – NH₃*” é apresentado na Figura 5.

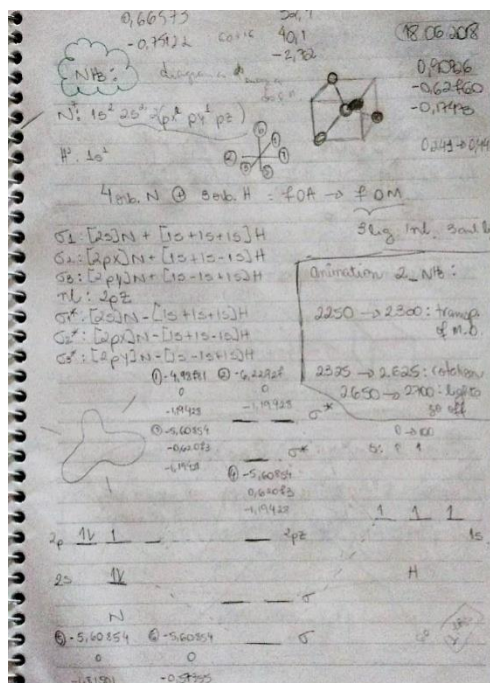


Figura 5. Tópicos elaborados para produção da animação da amônia, que mostra a orientação espacial dos átomos da molécula, as combinações lineares e o diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares.
Fonte: Própria (2018).

A Figura 5 apresenta os tópicos abordados na animação “*Molecular Orbitals: Ammonia – NH₃*”, contemplando algumas etapas da animação, que vão desde a representação da geometria espacial da amônia, através de um cubo, até a elaboração do Diagrama de Energia dos Orbitais Moleculares, DEOM.

3.2 PRODUÇÃO

Após a definição do tema e dos tópicos de cada animação, a mesma era produzida no software Blender®.

3.2.1 EXECUÇÃO DAS ANIMAÇÕES – RECURSOS COMPUTACIONAIS

O Blender® trata-se de um software livre que pode ser baixado através do site *Blender.org*. Por ser atualizado cerca de duas a três vezes ao ano, foram utilizadas as versões 2.77, 2.78, e 2.79 para produção das animações.

Escolhemos trabalhar com o Blender® pois além de ser gratuito, seu desempenho não fica atrás de softwares como o Maya®, seu principal concorrente cuja licença mensal de uso custa cerca de R\$550,00 (MAYA, 2018). O Vídeo 6 apresenta trechos de animações produzidas através do Blender®.



Vídeo 6. Trechos de animações produzidas através do software Blender.

Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=mliY6aGefvI>.

O Blender® apresenta três módulos possíveis de trabalho. O *Blender Game*, é utilizado para o design de games. O *Cycles Blender* e o *Blender Render* são utilizados para produção de animações. A diferença é que o *Blender Render* apresenta uma quantidade reduzida de parâmetros ajustáveis e de ferramentas, sendo utilizado para produzir animações mais simples.

As animações apresentadas no Vídeo 6 foram produzidas no *Cycles Blender*, e as animações deste mestrado foram elaboradas através do *Blender Render*, visando a otimização do tempo de renderização, já que os materiais e movimentações utilizados não necessitavam de ferramentas tão avançadas.

As especificações técnicas do computador no qual o Blender® foi instalado e utilizado constam na Tabela 1. Os principais fatores limitantes para o bom desempenho do software são a memória RAM e a placa de vídeo.

Tabela 1. Especificações técnicas do computador utilizado para produção das animações 3D.

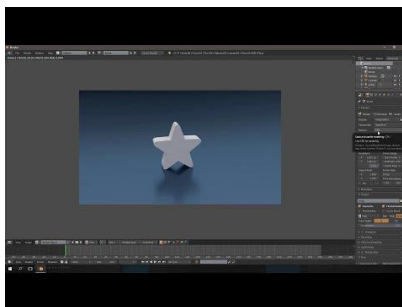
Marca	Asus
Modelo	U46E
Processador	Intel® Core™ i7-2640M CPU @ 2.80GHz 2.80GHz
Memória RAM	8GB
Sistema Operacional	Windows 10 Pro, 64 bits
Placa de Vídeo	Intel HD Graphics 3000

Os passos iniciais para a utilização do Blender® foram aprendidos com a orientação do Dr. Manuel Moreira Baptista, criador do site quimica3d.com. A utilização e aplicação de demais recursos oferecidos pelo software, tais como “*proportional edditing*”, “*applying textures*”, bem como os tipos de câmeras disponíveis para utilização, foram aprendidos através de tutoriais disponibilizados gratuitamente no *youtube* por animadores experientes que produzem animações através do Blender®.

O quimica3d.com também foi utilizado para consulta dos tipos e modelos das animações já publicadas (QUÍMICA 3D, 2017).

Após a escolha dos temas e fenômenos que seriam visualmente representados em cada animação, a etapa da modelagem era iniciada no Blender®. Foi utilizada a modelagem poligonal, na qual partindo-se de um polígono base, aplicava-se operações e comandos disponibilizados pelo software para ir modelando o polígono até obter-se o formato desejado.

Todo o aprendizado dos comandos de modelagem, tais como aplicação de texturas, deformações, cortar e juntar polígonos, movimentação de câmera e iluminação, foi adquirido através de tutoriais disponíveis no *youtube*, como o apresentado no Vídeo 7, já que não existem disciplinas na Unicamp, muito menos cursos presenciais no Brasil que ensinam a produzir animações através do Blender®, especificamente.



Vídeo 7.Exemplo de tutorial do Blender® no *youtube* que ensina a criar uma estrela 3D.

Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=sVdQAxFld1w>.

Finalizada a etapa de modelagem, as cenas eram estruturadas, nas quais as movimentações dos elementos nas coordenadas tridimensionais x , y e z , transparências, tamanhos, proporções e iluminação do cenário eram programadas.

A câmera utilizada para gravar todas as cenas, em todas as animações, foi a ortográfica, que possibilita controlar o tamanho dos objetos projetados na cena (CÂMERAS, 2018).

Após a programação de todos os frames, os mesmos eram então renderizados numa taxa de 25 frames por segundo, gerando a animação.

Para facilitar o entendimento dos fenômenos mostrados nas animações, primeiramente, optou-se pela utilização de telas com textos explicativos das etapas e conceitos de cada animação. Então, percebeu-se que legendas, além de dinamizarem a animação, agilizam o entendimento do que está sendo mostrado e, portanto, foram adicionadas nas animações da série dos Orbitais Moleculares e da Hidroformilação. As legendas foram produzidas no bloco de notas e incorporadas às animações durante o *upload* no *youtube*.

Visando a padronização de todas as animações, utilizou-se o sistema de cores hexadecimal (HEX). Aos orbitais atômicos, foram denominadas as seguintes cores:

- HEX: **F51131**, para os orbitais p_x .
- HEX: **20E726**, para os orbitais p_y .
- HEX: **1B37E7**, para os orbitais p_z .

Os lóbulos positivos dos orbitais atômicos nas CLOAs, bem como dos orbitais moleculares foram representados pela cor HEX: **FFFF00**, e os negativos por

HEX: 0000FF.

Para os átomos, adotamos as cores disponíveis no website da JmolColors (JmolColors, 2016).

Para as ligações químicas, em todas as moléculas utilizou-se a cor HEX: FFFFFFFF, e para as ligações hidrogênio utilizou-se HEX: 26279B.

3.2.2 DIFICULDADES ENCONTRADAS

O Blender® não é um software trivial, e durante o processo de aprendizagem e produção das animações, houveram algumas dificuldades, que com o tempo e dedicação, foram superadas.

As maiores dificuldades técnicas ocorreram durante a produção das animações “*Clustered Water*” e “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

Dado o grande número de elementos na maioria das cenas, principalmente da animação “*Clustered Water*”, era necessária uma quantidade de memória RAM superior a 8GB, conforme a Tabela 1, tanto para elaboração, quanto para renderização da animação. Após várias tentativas optou-se pela representação *stick* das moléculas de água, o que acabou gerando bons resultados por facilitar a visualização das ligações direcionais entre as moléculas de água.

Ademais, na etapa de modelagem, foi necessário atentar para alguns fatores dos polígonos utilizados, já que quanto menor a quantidade de vértices, segmentos e anéis nos polígonos, menos memória RAM é necessária para processar a animação. A representação *stick* adotada foi de grande ajuda nesse quesito.

As animações “*Clustered Water*” e “*NaCl dissolution in water: a new approach*” foram as primeiras produzidas e as dificuldades enfrentadas serviram de aprendizado para a produção das demais, que fluíram sem grandes problemas relacionados ao Blender®.

3.3 PÓS-PRODUÇÃO

A Pós-produção das animações consistiu em realizar a avaliação da eficácia da animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” em duas disciplinas oferecidas no Instituto de Química da Unicamp, e também na publicação de todas as animações em canal do *youtube* e no site *quimica3d.com*.

Na época em que as avaliações da eficácia foram realizadas, a animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” continha o conteúdo da animação “*Clustered Water*”. Entretanto, como a animação ficou muito densa, e dado que, posteriormente, produziu-se duas animações explicando as ligações químicas da água através da TOM, a animação foi dividida em duas partes. A formação da água clusterizada passou, então, a ser contemplada na animação “*Clustered Water*”. A dissolução do NaCl em água permaneceu na animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

3.3.1 AVALIAÇÃO DA EFICÁCIA DAS ANIMAÇÕES EM DISCIPLINAS OFERECIDAS NO IQ DA UNICAMP

Com base nos resultados positivos de pesquisas e estudos encontrados na literatura, optou-se por avaliar a melhoria no entendimento do conteúdo químico por parte dos alunos.

A avaliação da eficácia foi realizada para a animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*”, em duas disciplinas de caráter introdutório: Química Teórica - QG111, e Química - QG191, oferecidas pelo Instituto de Química da Unicamp.

A turma de QG111, ingressante no Vestibular 2017, era formada por alunos de engenharia mecânica e elétrica do período integral. A animação foi explorada durante uma aula em que os tópicos representados na animação foram ensinados e discutidos com os alunos pelo professor Dr. Pedro Faria. Um formulário físico constituído por quatro questões dissertativas foi aplicado duas vezes: uma antes, e outra depois da apresentação da animação.

A mesma animação foi aplicada na disciplina QG191, lecionada para alunos do Programa de Formação Interdisciplinar Superior, ProFIS, ingressantes em

2018. O ProFIS surgiu em 2011 com a proposta de ser um:

[...] curso piloto de ensino superior da UNICAMP, voltado aos estudantes que cursaram o ensino médio em escolas públicas de Campinas.
A seleção de estudantes para as 120 vagas do curso não é feita através do vestibular, mas com base nas notas do ENEM. Para cada escola pública de ensino médio do município de Campinas é garantida uma vaga. [...]
Concluído o ProFIS, o aluno pode ingressar, sem vestibular, em um curso de graduação da UNICAMP. (ProFIS, 2018).

Para a turma de QG191, a animação foi disponibilizada online, não sendo trabalhada em sala de aula pelo professor. Os alunos responderam a um questionário eletrônico de avaliação antes e após assistirem a animação disponibilizada pelo professor Dr. Gildo Girotto Júnior. O questionário utilizado para avaliar os alunos de QG191 contém as mesmas quatro perguntas que foram aplicadas a turma de QG111. Porém, ao questionário anterior a animação, foram adicionadas duas perguntas, e ao questionário aplicado posteriormente a animação, foi adicionada uma pergunta. O modelo dos questionários utilizados nas avaliações, bem como os resultados obtidos constam no item 4.14.

A comparação de dados socioeconômicos dos alunos ingressantes no Vestibular 2017 da Unicamp disponibilizados no site da COMVEST, com dados do estudo de Francisco Magalhães Gomes, do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Unicamp, IMECC, acerca do ProFIS, indicam uma disparidade entre os perfis dos alunos das duas disciplinas em que a avaliação da eficácia foi realizada.

Estas diferenças socioeconômicas, bem como o fato de a animação não ter sido trabalhada em sala de aula na turma de QG191, somadas a outros fatores como infraestrutura das escolas públicas versus particulares, além do desenvolvimento das habilidades visoespaciais dos alunos que está diretamente relacionado ao acesso a atividades e instrumentos que possibilitem tal desenvolvimento, podem ser consideradas para uma análise mais profunda e detalhada dos resultados obtidos com a aplicação dos questionários nas duas turmas.

As avaliações e impactos dos fatores supracitados nos resultados das avaliações encontram-se no item 4.14.

3.3.2 DISPONIBILIZAÇÃO DAS ANIMAÇÕES

As animações produzidas foram disponibilizadas no canal do *youtube*, **Lili Tosta**: <https://www.youtube.com/channel/UCRm8EbBEZL4VPBPY3rO27xg>, e no site **quimica3d.com** para que pudessem ser visualizadas por pessoas de todo o mundo.

Pensando que muitas salas de aula tanto no Brasil quanto em outros países ainda não contam com conexão a rede de internet, ou a qualidade de conexão é muito ruim para reproduzir vídeos sem interrupções, as animações ficam disponíveis para download no portal **quimica3d.com**, perante um breve cadastro.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

São muitos os conteúdos de química em que recursos tecnológicos visuais, como as animações 3D, são de grande auxílio para minimizar as dificuldades de aprendizagem dos alunos. Dentre os fatores que mais contribuem para tais dificuldades podemos destacar:

1. **a metodologia utilizada em sala de aula pelo professor**, que ainda se resume a lousa, giz, apresentações de figuras bidimensionais em PowerPoint e livros didáticos de química geral e inorgânica que muitas vezes introduzem e explanam tais conceitos de forma superficial e confusa;
2. **a heterogeneidade de conhecimento** das turmas de calouros, já que parte dos alunos vêm de escolas particulares, que além de terem um embasamento mais profundo de matemática e química, hoje em dia utilizam recursos tecnológicos que estimulam as habilidades visuoespaciais dos alunos. Por outro lado, há os alunos que vêm de escolas públicas e que não tiveram o mesmo nível de acesso a livros, apostilas e, principalmente às TIC, requerendo, portanto, um maior esforço por parte do professor para que a turma, de uma forma geral, esteja no mesmo nível de aprendizagem.

Procurando facilitar o processo de aprendizagem dos alunos, bem como auxiliar na prática do professor em sala de aula, foram produzidas animações que abordam os temas de maneira completa e descomplicada.

Os quatro temas escolhidos para produção das animações foram desmembrados em vários assuntos, como apresentado no Quadro 2.

Quadro 2. Assuntos a serem trabalhados dentro de cada tema escolhido na Etapa 1.

Teoria dos Orbitais Moleculares	Estrutura da Água	Dissolução de compostos iônicos em água	Hidroformilação Catalítica
• Posicionamento dos OAs • CLOAs	• Hexâmeros e unidades monoméricas de água • Água clusterizada	• Estrutura do retículo de NaCl • Número de Coordenação	• Número de oxidação • Ciclo catalítico

• Construção e representação dos OM's • Construção dos DEOM's • Compostos deficientes de elétrons		• Engaiolamento iônico • Interações ion-dipolo	• Reações que ocorrem no processo de hidroformilação
---	--	---	--

As animações de cada tema foram produzidas de acordo com os tópicos apresentados no Quadro 1, no item 3.1.2, além de conterem todos os assuntos mostrados no Quadro 2.

A Tabela 2 apresenta todas as animações produzidas, e em qual tema principal cada uma se encaixa.

Tabela 2. Animações produzidas dentro de cada assunto apresentado no Quadro 2.

Teoria dos Orbitais Moleculares	Estrutura da Água	Dissolução de compostos iônicos em água	Hidroformilação Catalítica
1) Molecular Orbitals: Water – H ₂ O, part 1	1) Clustered Water	1) NaCl dissolution in water: a new approach	1) Hydroformylation of propylene: step by step
2) Molecular Orbitals: Water – H ₂ O, part 2			2) Hydroformylation of propylene: nonstop
3) Molecular Orbitals: Ammonia – NH ₃			
4) Molecular Orbitals: Methane – CH ₄			
5) Molecular Orbitals: Diborane – B ₂ H ₆			
6) Molecular Orbitals: Methyl lithium – (CH ₃ Li) ₄			

A Tabela 2 nos mostra que o tema da TOM contempla seis das dez animações, a estrutura da água e a dissolução de compostos iônicos em água, duas, e a hidroformilação catalítica, duas das dez animações produzidas. A água está presente em quatro animações, sendo que cada animação se enquadra em um, ou mais temas diferentes.

A animação “*Molecular Orbitals: Water, H₂O – part 1*”, enquadra-se

exclusivamente nas propostas do tema da TOM. Porém, a animação “*Molecular Orbitals: Water, H₂O, part 2*”, encaixa-se tanto sob o tema da TOM, quanto da estrutura da água, já que ela pode ser interpretada como uma explicação reducionista das interações químicas observadas principalmente na animação “*Clustered Water*”, mas também em “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

As animações produzidas neste mestrado apresentam a vantagem de encaixarem-se no conteúdo programático de várias disciplinas, não somente do IQ da Unicamp, mas também de várias outras universidades, inclusive de outros países.

De acordo com as ementas publicadas, disciplinas de química geral e inorgânica do IQ da Unicamp, como QG104 – Química, QG108 – Química Geral Teórica, QI145 – Interações Químicas e QI545 – Química de Organometálicos, podem utilizar as animações produzidas neste trabalho como material didático e sugestão bibliográfica.

Como um exemplo internacional, podemos citar a Faculdade de Química da Universidade de Wiscosin-Madison, nos Estados Unidos da América, cujos conteúdos programáticos de algumas disciplinas permitem a utilização das presentes animações. Dentre essas disciplinas estão: *Chemistry 103 – General Chemistry I*, *Chemistry 104: General Chemistry II*, *Chemistry 109 – Advanced General Chemistry*, *CHEM 511 – Inorganic Chemistry* e *CHEM 714 – Organometallic Chemistry of the Transition Elements*.

Uma característica interessante deste trabalho é a inclusão de legendas e textos explicativos em inglês nas animações produzidas, possibilitando que as mesmas sejam utilizadas tanto por professores em sala de aula, que contam com o respaldo de livros didáticos e aulas previamente planejadas, quanto por alunos e/ou curiosos que estejam procurando por vídeos no *youtube* dos assuntos contemplados nas animações.

As legendas e textos das animações foram feitas em inglês para que o idioma não fosse uma barreira, ampliando o acesso das animações a pessoas de diversos países. As animações “*Clustered Water*” e “*NaCl dissolution in water: a new approach*” não contém legendas pois foram as primeiras animações a serem

produzidas, e a ideia de inserir legendas surgiu apenas durante a produção das animações da TOM. Já a animação “*Hydroformylation of propylene – nonstop*” não contém legendas pois a ideia principal da animação é mostrar a hidroformilação de uma forma contínua aos alunos, sem interrupções, e a presença de legendas na tela faria com que os alunos dividissem a atenção entre ver as movimentações dos elementos em cena, e ler os textos das legendas. Caso o aluno fique com dúvidas, a animação “*Hydroformylation of propylene – step by step*” explica em detalhes todas as etapas contidas na animação *nonstop*.

4.1 RECOMENDAÇÕES GERAIS DE UTILIZAÇÃO DAS ANIMAÇÕES

Um ponto a se ressaltar para o professor é que, quanto maior for o número de estímulos audiovisuais em sala de aula, maior é a probabilidade de os alunos perderem o foco das cenas das animações, e acabarem não absorvendo todo o conteúdo.

Portanto, já que o professor estará explicando a animação, requerendo que o aluno não somente preste atenção ao vídeo, mas também à sua fala, recomenda-se que as animações sejam utilizadas sem as legendas em sala de aula, eliminando assim possíveis focos de dispersão dos alunos.

Recomenda-se também que, conforme a necessidade, o professor pause as animações reproduzindo as cenas quantas vezes julgar necessário para que os alunos aprendam os conteúdos em pauta. Caso fiquem com dúvidas ao estudar em casa, as legendas tornam-se ótimas aliadas, pois como já assistiram a animação em sala de aula, concomitante a explicação do professor, boa parte do conteúdo já está alocado na memória operacional e, portanto, prestar mais atenção nas legendas nesse momento vai ajudar a consolidar o processo de fixação de conteúdo na memória de longo prazo e, conseqüentemente, vai melhorar a aprendizagem.

Apesar das animações 3D serem entendidas como ferramentas de ensino passivas, quando associadas a metodologias ativas podem haver melhoras no aprendizado dos alunos.

Em sala de aula, o professor pode praticar exercícios de fixação de conteúdo com os alunos concomitante a apresentação e explicação da animação. Além de fomentar o diálogo e o estabelecimento de discussões de conteúdo de

química, o professor também possibilita que os alunos interajam ativamente com a animação, consultando-a livremente para solucionarem as problemáticas propostas. Dessa forma, o professor trabalha com propostas que fogem do uso comum de livros e textos didáticos, além de incentivar o senso crítico nos alunos através das discussões, prática não muito comum em aulas de química.

4.2 ESTRATÉGIA DE APRESENTAÇÃO DAS ANIMAÇÕES

Para estabelecer uma sequência de raciocínio mais lógica e intuitiva, primeiramente serão apresentados e discutidos alguns assuntos que são comuns a mais de uma animação, sendo eles a TOM, Arranjo Espacial, posicionamento dos OAs, e compostos deficientes de elétrons. Em seguida, cada uma das animações produzidas será explicada e discutida conforme a ordem apresentada na Figura 6:

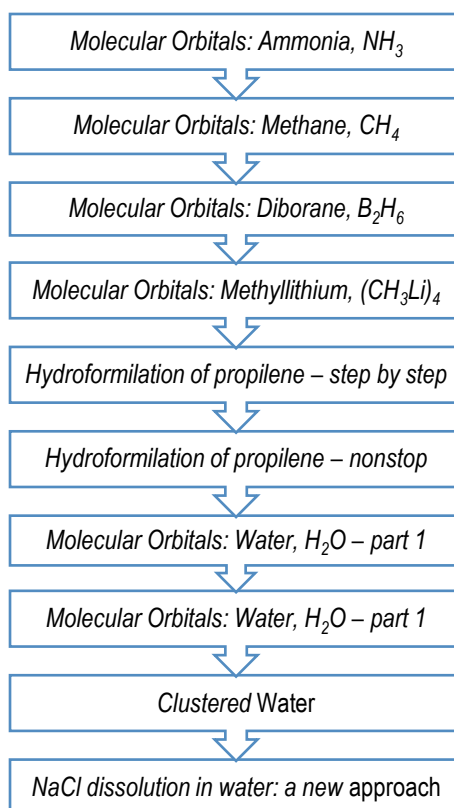


Figura 6. Sequência de apresentação dos resultados obtidos

A água, tema de quatro das dez animações produzidas, será tratada em um capítulo à parte.

Os links para acessar as animações estão disponibilizados no decorrer do texto.

4.3 TEORIA DOS ORBITAIS MOLECULARES

A Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM) surgiu concomitante a Teoria da Ligação de Valência (TLV). A TLV dominou a química até por volta de 1950, quando alguns cientistas começaram a questionar a sua aplicabilidade em moléculas poliatômicas e também na explicação de fenômenos como o paramagnetismo do dioxigênio (SHAIK e HIBERTY, 2008).

Enquanto a TLV considera o emparelhamento de elétrons de spins opostos para formar as ligações químicas localizadas, os Orbitais Moleculares (OM) resultam da Combinação Linear de Orbitais Atômicos (CLOAs), já que os Orbitais Atômicos (OAs) podem ser definidos por funções de onda, descrevendo assim o comportamento da nuvem eletrônica, que se espalha por toda a molécula (MIESSLER *et. al*, 2014).

Às funções de onda, são atribuídos coeficientes ajustáveis que quantificam a contribuição de cada um dos OAs em um dado OM (MIESSLER *et. al*, 2014). Esses coeficientes podem ter valores iguais, ou não, e podem ser positivos ou negativos, determinando assim a formação de um Orbital Molecular Ligante, Não Ligante, ou Antiligante.

Didaticamente, os Orbitais Moleculares são usualmente apresentados em diagramas de níveis de energia, tornando-se visualmente possível identificar o Orbital Molecular Ocupado Mais Alto (HOMO, do inglês, *Highest Occupied Molecular Orbital*), e o Orbital Molecular Não Ocupado Mais Baixo (LUMO, do inglês, *Lowest Unnoccupied Molecular Orbital*), utilizados para calcular e explicar ordem de ligação, paramagnetismo e reatividade, por exemplo.

Quanto maior o número de átomos na molécula, mais complexo torna-se o diagrama. Como exemplo, a Figura 7a apresenta o diagrama de níveis de energia dos Orbitais Moleculares da molécula H_2 , que contém apenas um orbital ligante e um antiligante. O diagrama da amônia, NH_3 , que contém orbitais ligantes, não ligantes e antiligantes, é apresentado na Figura 7b.

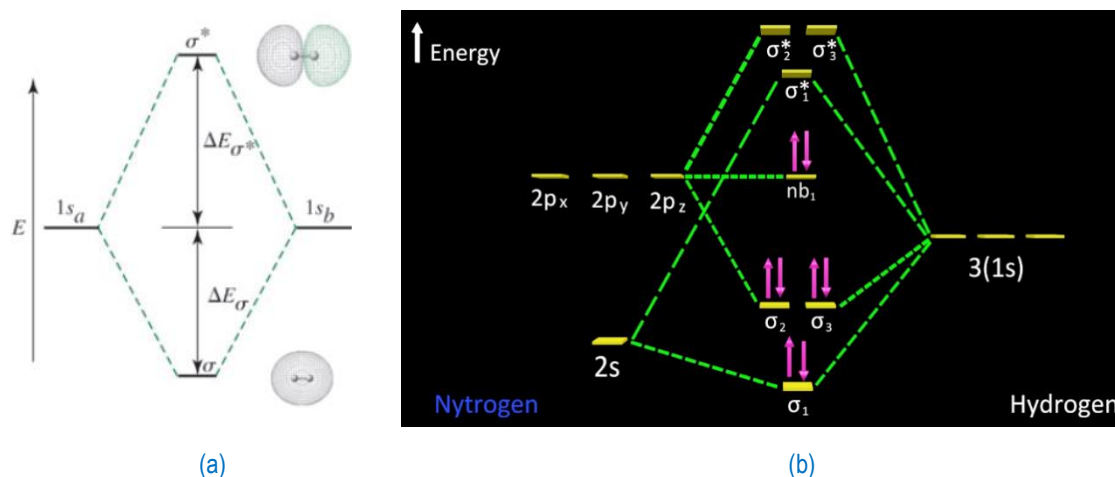


Figura 7. Diagramas de níveis de energia dos orbitais moleculares. (a) Molécula H₂. Fonte: (Miessler, 2015). (b) Amônia, NH₃. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=7b8P1Z0ab2E>.

As dificuldades apresentadas pelos alunos no processo de aprendizagem da Teoria dos Orbitais Moleculares vão desde a visualização do arranjo espacial dos átomos nas moléculas, para determinar as CLAOs, até a construção dos diagramas dos níveis de energia.

Procurando facilitar o processo de aprendizagem, foram produzidas seis animações que abrangem desde o arranjo espacial dos átomos nas moléculas, até os diagramas de níveis de energia dos orbitais moleculares formados. O enfoque, em todas as animações, é dado aos Orbitais Moleculares Ligantes, pois em nenhuma molécula representada nas animações os orbitais antiligantes são ocupados ou utilizados em alguma transformação.

As animações também podem ser utilizadas em assuntos tais como posicionamento de orbitais atômicos de valência nas ligações químicas e compostos classificados como deficientes de elétrons, como o diborano e metil-lítio.

4.4 REPRESENTAÇÃO TRIDIMENSIONAL DAS MOLÉCULAS E GEOMETRIA ESPACIAL

A Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons da Camada de Valência, VSEPR (do inglês, Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory), é utilizada para

explicar geometrias espaciais considerando que os pares de elétrons das camadas de valência se repelem, e, portanto, interferem no posicionamento espacial dos átomos (ATKINS e LORETA, 2006).

As animações da série dos Orbitais Moleculares trazem representações tridimensionais para as geometrias espaciais das moléculas encontradas através dos métodos da VSEPR.

Para as moléculas de água, amônia e metano, um cubo é desenhado e o átomo central de cada uma dessas moléculas—oxigênio, nitrogênio e carbono—é posicionado no centro do cubo. Então, cada um dos hidrogênios de cada molécula - dois para água, três para a amônia, e quatro para o metano- são posicionados em vértices alternados do cubo, determinando assim, a geometria angular para a água, pirâmide trigonal para a amônia, e tetraédrica para o metano, conforme a Figura 8.

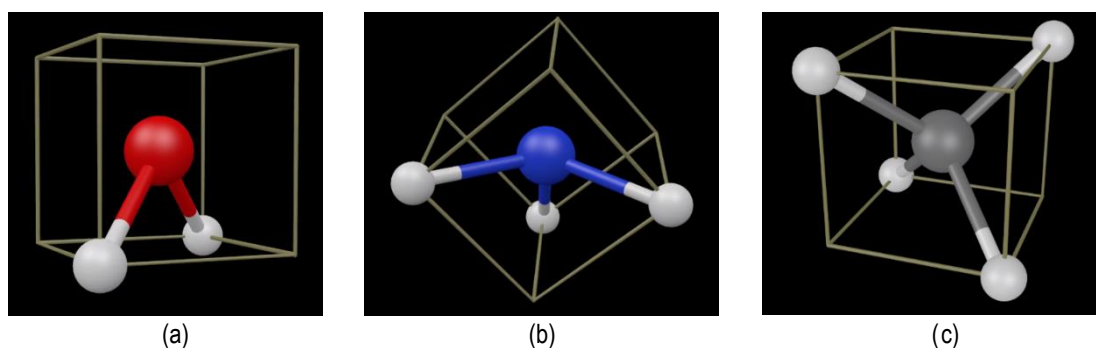


Figura 8. Geometrias Espaciais para a água, amônia e metano. (a) Geometria Angular para Água, H₂O. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=LXJdxyKbY-Q>. (b) Pirâmide Trigonal para amônia, NH₃. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=7b8P1Z0ab2E>. (c) Tetraédrica para o metano, CH₄. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=Zkt2-MLpPHM>.

No caso do diborano, a molécula é representada através de dois cubos que compartilham uma face, formando um paralelepípedo. Cada átomo de boro ocupa o centro de cada cubo, e os seis hidrogênios são, então, posicionados em vértices alternados do paralelepípedo, formando as ligações mostradas na Figura 9.

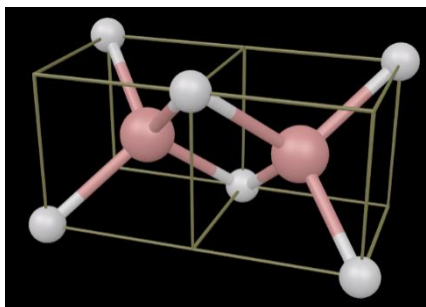


Figura 9. Representação espacial da molécula de diborano. Fonte: https://www.youtube.com/watch?v=nBJIMeR3I_g.

O metil-lítio foi representado de duas maneiras. A primeira mostra a representação mais comum encontrada na literatura, na qual os lítios são posicionados em um tetraedro, e as metilas são ligadas às faces desse tetraedro. O primeiro diferencial desta animação é mostrar que, sem mudar os átomos de posição, os mesmos podem, simplificadaamente, serem posicionados em um cubo, no qual lítios e metilas ocupam vértices alternados, conforme a Figura 10.

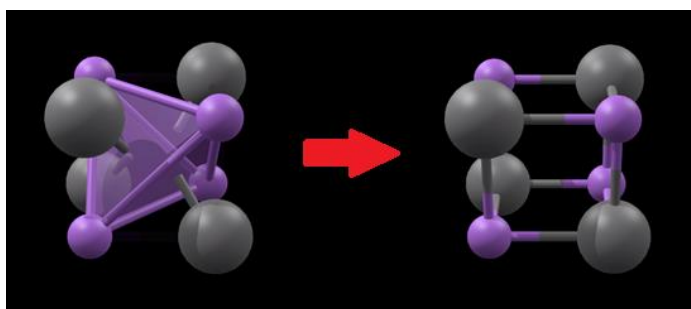


Figura 10. Representação do metil-lítio. As esferas menores correspondem aos átomos de lítio e as maiores aos grupos metilas. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=R45ISZIIIZA>.

Sendo o cubo uma figura geométrica mais fácil de ser imaginada que o tetraedro, os alunos conseguem assimilar a estrutura cúbica com mais facilidade, desonerando a explicação das ligações químicas da molécula.

A animação “*Hydroformylation of Propylene – step by step*” também permite que o professor trabalhe o conceito de geometria espacial com os alunos através do catalisador de Rh, $[\text{Rh}(\text{CO})\text{H}(\text{PPh}_3)_3]$, cuja geometria vai se alterando durante o ciclo catalítico, conforme ligações químicas são rompidas e/ou formadas,

vide Figura 11.

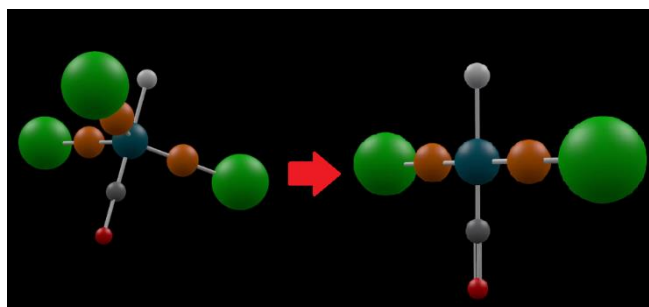


Figura 11. Representação de dois intermediários formados durante a hidroformilação. O da esquerda apresenta geometria bipirâmide trigonal, e o da direita, quadrado planar. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=lyJ6Rr-sMMU&t=12s>.

A parte final da animação “*Hydroformylation of Propylene – step by step*” mostra todas as alterações de geometria do catalisador, etapa a etapa. Como complemento, o professor pode explicar a relação entre as mudanças no número de coordenação do átomo central de ródio e as alterações na geometria do catalisador.

4.5 POSICIONAMENTO DE ORBITAIS ATÔMICOS DE VALÊNCIA NAS LIGAÇÕES QUÍMICAS

De acordo com a TLV, as ligações químicas são formadas a partir da sobreposição de orbitais atômicos, no qual os elétrons de valência com spins opostos emparelham-se ocupando o eixo internuclear dos átomos envolvidos na ligação (SHRIVER, pg. 39).

A hibridização dos orbitais surgiu como uma melhoria da TLV, visando explicar geometrias e ângulos de ligações, principalmente de moléculas poliatômicas para as quais a TLV em sua forma mais simples não apresentava bons resultados. A explicação das ligações químicas do metano através de orbitais híbridos sp^3 é amplamente encontrada na literatura, em livros didáticos como Atkins, Clayden e Shriver (ATKINS e LORETA, 2006, CLAYDEN *et. al*, 2001, SHRIVER *et. al*, 2010).

Porém, quando nos deparamos com casos como o do diborano, B_2H_6 , e metil-lítio, $(CH_3Li)_4$, que são classificados como compostos deficientes de elétrons

pela literatura, apenas a hibridização dos orbitais não é suficiente para explicar suas ligações químicas, fazendo-se necessário o uso da TOM.

Nas animações produzidas, optamos por estabelecer eixos de orientação para os orbitais atômicos que facilitassem a visualização das CLAOs e formação dos Orbitais Moleculares, já que o resultado final não é alterado. As orientações adotadas para as moléculas de água, amônia, metano e diborano encontram-se na Figura 12.

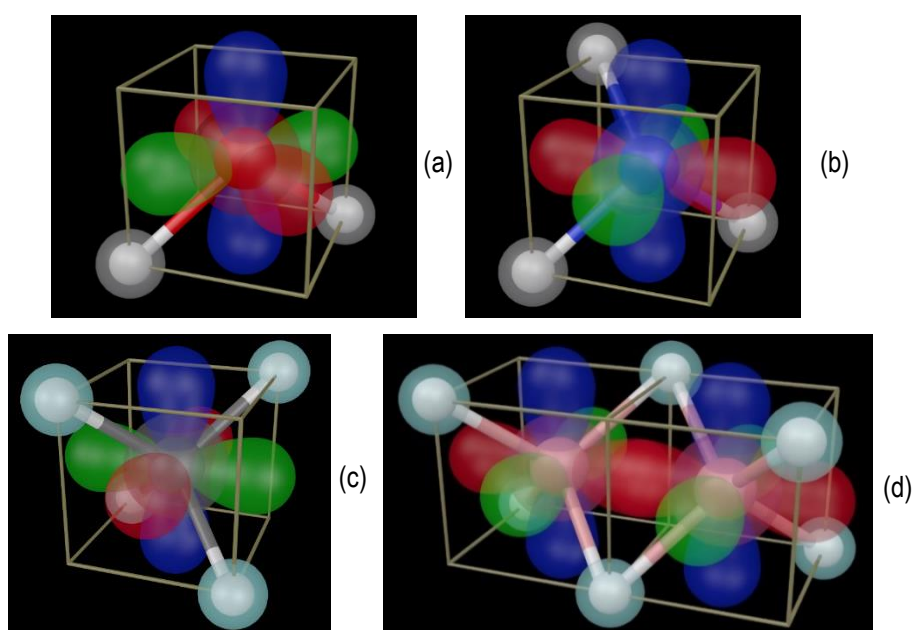


Figura 12. Eixos de orientação os orbitais atômicos de valência. (a) Para a água. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=LXJdxyKbY-Q>. (b) Para a amônia. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=7b8P1Z0ab2E>. (c) Para o metano. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=Zkt2-MLpPHM>. (d) Para o diborano. Fonte: https://www.youtube.com/watch?v=nBJIMeR3I_g.

Para o metil lítio, determinamos que as combinações lineares ocorreriam entre os HOMOs das metilas e os orbitais 2s dos lítios. Os HOMOs das metilas são orientados para o centro do cubo, e os orbitais 2s ficam sobre cada um dos átomos de lítio, conforme a Figura 13.

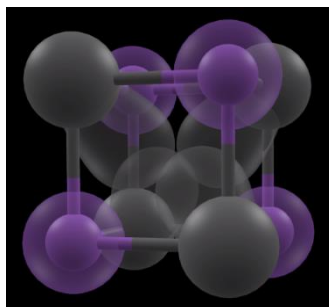


Figura 13. Orientação dos orbitais 2s dos lítios, e dos HOMOs das metilas na molécula do metil lítio. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=R45lSZIIIZA>.

4.6 COMPOSTOS DEFICIENTES DE ELÉTRONS

A literatura classifica o diborano e o metil-lítio como compostos deficientes de elétrons, nos quais não há elétrons de valência suficientes para formar as ligações químicas requeridas pelas moléculas, segundo a TLV. Portanto, como explicar a representação adotada nos livros didáticos para a molécula de diborano, onde “parece” que há 8 ligações químicas na molécula? E como explicar a formação de 16 OMs para o metil lítio, sendo que não há 16 OAs disponíveis para se combinarem?

4.6.1 DIBORANO

Livros tais como Shriver, 2010 e Huheey, 1993, explicam as ligações químicas no diborano através da utilização simultânea de duas teorias: hibridização de orbitais atômicos (TLV) e orbitais moleculares deslocalizados. A molécula é fatiada em três partes: duas que contêm as ligações B—H terminais, e a porção central que contêm as ligações em ponte B—H—B.

A literatura classifica as ligações em ponte B—H—B como *três centros, dois elétrons* (MIESSLER, *et. al*, 2014). O átomo de hidrogênio contribui com um elétron para a ligação. Cada átomo de boro possui três elétrons de valência. Porém, como os boros são compartilhados com as ligações terminais, e também entre as duas ligações em ponte, seus elétrons não estão totalmente disponíveis para ligarem-se ao hidrogênio e, portanto, entende-se que há apenas dois elétrons para fazer a ligação em cada ponte B—H—B.

As quatro ligações B—H terminais são explicadas através da TLV a partir da interação entre um orbital hibridizado sp^3 do boro, e o orbital atômico $1s$ do hidrogênio.

Já os orbitais moleculares responsáveis pelas ligações no fragmento B—H—B, são formados a partir da combinação linear dos orbitais hibridizados sp^3 dos boros, com os orbitais $1s$ dos hidrogênios, formando-se assim, três orbitais moleculares: um ligante, um não ligante, e um antiligante, conforme Figuras 14 e 15.

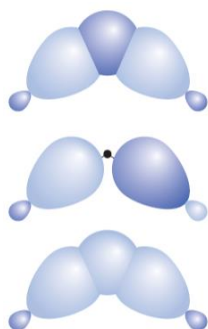


Figura 14. Explicação sobre as ligações químicas no diborano no livro Inorganic Chemistry de Shriver. Fonte: SHRIVER, et. al, 2010.

O orbital ligante acomoda os dois elétrons disponíveis, e consegue, portanto, manter a ligação B—H—B. O mesmo acontece para o segundo fragmento, e assim, os dois orbitais moleculares ligantes ocupados conseguem manter os quatro átomos dos fragmentos B—H—B unidos.

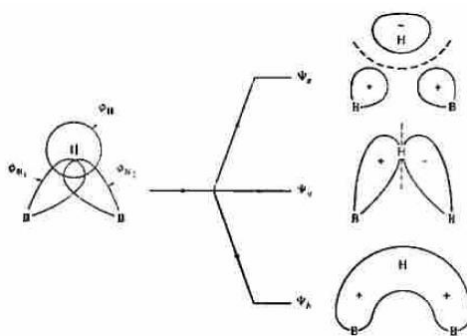


Figura 15. Explicação sobre as ligações químicas no diborano no livro Inorganic Chemistry de Huheey. Fonte: HUHEEY et. al, 1993

Os argumentos utilizados por esses dois autores são inadequados para

se explicar essa molécula uma vez que misturam argumentos de dois modelos distintos em uma mesma molécula. Essa estratégia de dividir a molécula em várias partes e interpretar cada uma delas com um modelo distinto não existe em química e não pode ser utilizada. Infelizmente, não sabemos por qual motivo, essa é a explicação encontrada na literatura, e que é repetida sistematicamente por professores nas disciplinas de química inorgânica.

A animação “*Molecular Orbitals: Diborane – B_2H_6* ” traz uma nova proposta para explicar o diborano, na qual se utiliza somente a TOM. Nesta animação é possível observar como se formam os OMs deslocalizados por toda a molécula, que são suficientes para acomodar os doze elétrons de valência, explicando e sustentando assim, todas as ligações químicas do diborano.

4.6.2 METIL-LÍTIO

O Metil-lítio, MeLi, é classificado na literatura como um composto organometálico deficiente de elétrons. No estado líquido ele se apresenta na forma do tetrâmero $(LiCH_3)_4$, mostrado na Figura 13, na qual os quatro átomos de lítio organizam-se formando um tetraedro. Cada conjunto de três lítios, que formam uma das quatro faces triangulares do tetraedro, interage com uma metila, formando um cubo distorcido (HOUSECROFT e SHARPE, 2012; GREENWOOD e EARNSHAW, 1998). Por outro lado, no estado sólido a estrutura cristalina do composto é formada pela repetição de unidades $(LiCH_3)_4$ interligadas, conforme Figura 16 (GREENWOOD e EARNSHAW, 1998)

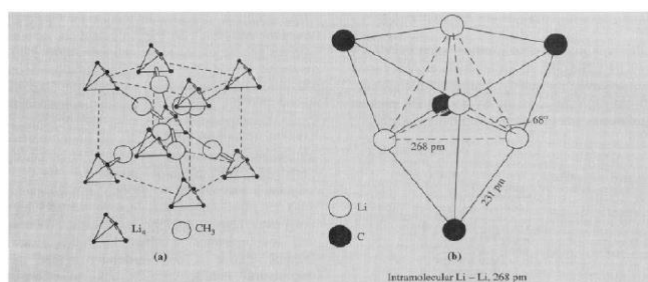


Figura 16. Representação do cubo distorcido do MeLi e de sua estrutura cristalina. Fonte: GREENWOOD e EARNSHAW, 1998.

Segundo Greenwood, 1998, Housecroft, 2012 e Shriver, 2010, as ligações químicas na molécula de MeLi são explicadas através da junção das teorias de hibridização de orbitais atômicos (TLV) e orbitais moleculares, na qual são utilizados os orbitais 2s dos lítios, e os orbitais híbridos sp^3 das metilas, cada um preenchido com um elétron, totalizando oito elétrons a serem distribuídos.

Para formação dos orbitais moleculares, em cada uma das faces triangulares do tetraedro ocorre uma combinação totalmente simétrica entre três orbitais 2s dos lítios e um orbital híbrido sp^3 da metila, formando-se quatro OMs. O orbital molecular de mais baixa energia acomoda dois dos oito elétrons do tetrâmero, mantendo assim, todos os átomos da face unidos. A mesma combinação deveria ocorrer para as demais faces, totalizando, portanto, 16 OMs. (HOUSECROFT e SHARPE, 2012; GREENWOOD e EARNSHAW, 1998; SHRIVER *et. al*, 2010).

Os autores citados no parágrafo acima consideram que há quatro orbitais disponíveis para serem combinados em cada uma das faces do tetraedro. Entretanto, considerando-se que cada um dos lítios é compartilhado por três faces, uma vez que o seu OA 2s foi utilizado na combinação de uma das faces, ele não pode ser utilizado novamente, o que anula a possibilidade de formar-se 16 OM, como é esperado pela literatura. Portanto, como explicar as ligações químicas no tetrâmero $(LiCH_3)_4$ em termos somente de orbitais moleculares, sem perder ou distorcer o conceito?

A animação “*Molecular Orbitals: Methyllithium – $(CH_3Li)_4$* ”, mostra como a partir da combinação entre os quatro orbitais 2s de valência dos lítios, com quatro orbitais HOMO das quatro metilas, é possível formar OMs suficientes para acomodar todos os elétrons de valência da molécula, colocando em xeque a deficiência de elétrons apontada pela literatura.

4.7 ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: AMMONIA – NH_3 ”

A amônia, NH_3 , é amplamente utilizada em disciplinas introdutórias de química geral, inorgânica e de química orgânica, por se tratar de uma molécula simples do ponto de vista estrutural.

Ela é utilizada tanto para ensinar a TOM para moléculas poliatômicas,

atua como ligante em compostos organometálicos, além de apresentar caráter nucleófilo em diversas reações da química orgânica. (CLAYDEN *et. al*, 2001).

4.7.1 JUSTIFICATIVAS DA ESCOLHA DA AMÔNIA

Apesar da amônia ser uma molécula simples de ser explicada pela TOM, os alunos apresentam grandes dificuldades para determinarem seus orbitais moleculares. Parte dessa dificuldade pode ser justificada pelo fato de que a formação dos OM na amônia é comumente ensinada através da Teoria de Grupos, gerando OM adaptados por simetria.

Livros didáticos conceituados como *Inorganic Chemistry*, de Housecroft, *Inorganic Chemistry*, de Shriver, além de websites famosos como o ChemTube3D, da Universidade de Liverpool, explicam a formação dos OM na amônia exclusivamente através da Teoria de Grupos, mais especificamente através da abordagem dos Grupos de Orbitais Ligantes.

Para determinar os OM através da Teoria de Grupos, o aluno deve realizar operações de simetria para determinar o grupo pontual da molécula, C_{3v} , conforme Figura 17, e as simetrias dos orbitais atômicos de valência, a_1 e e (HOUSECROFT e SHARPE, 2012).

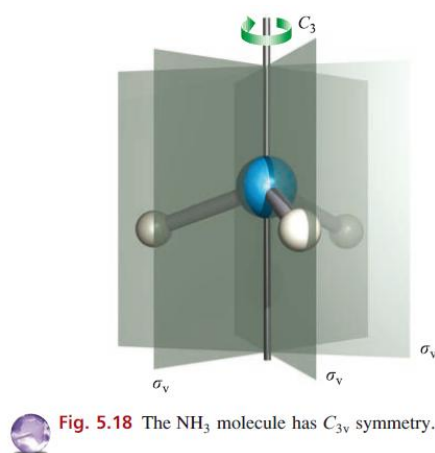


Figura 17. Grupo pontual da amônia, NH_3 . Elementos de simetria existentes na molécula de amônia. Fonte: HOUSECROFT e SHARPE, 2012.

Os OA, ou grupos de orbitais, que possuem a mesma simetria são combinados, gerando os OMs (HOUSECROFT e SHARPE, 2012). Os OM formados são representados em Diagramas de Energia, conforme Figura 18.

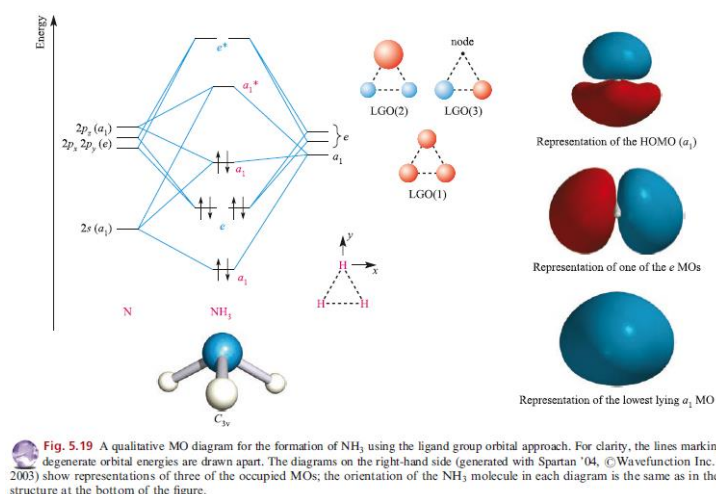


Figura 18. Diagrama de Energia dos Orbitais Moleculares adaptados por simetria da amônia, NH_3 . Fonte: HOUSECROFT e SHARPE, 2012.

Além da Teoria de Grupos ser uma metodologia matemática que simplifica o processo de determinação dos OM, a aplicação das operações de simetria necessárias para determinar os grupos pontuais, bem como os OM adaptados por simetria requer que os alunos consigam visualizar qual é o novo posicionamento espacial de cada átomo da molécula após a aplicação das operações de simetria.

Infelizmente, a grande maioria dos alunos de química em nível de graduação não tiveram suas habilidades visuoespaciais bem desenvolvidas no decorrer de sua caminhada escolar e, portanto, necessitam de estímulos visuais que auxiliem no processo de aprendizado.

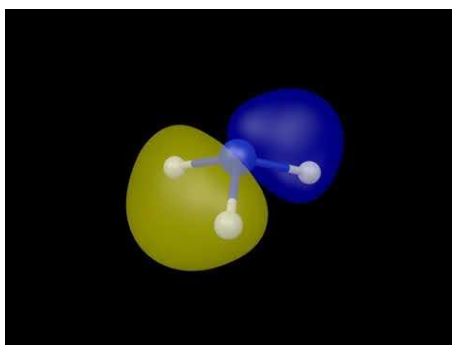
Ademais, os professores também são prejudicados na hora de introduzirem tais conceitos para os alunos em sala de aula, já que muitas vezes contam com recursos bidimensionais para explicar fenômenos tridimensionais.

A animação “*Molecular Orbitais: Ammonia – NH_3* ”, surgiu com o propósito de mostrar, de maneira objetiva e descomplicada, todo o passo a passo necessário

para determinar os OMs da molécula a partir de sua geometria espacial, sem utilizar a Teoria de Grupos, e sim, olhando para as CLAOs.

4.7.2 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: AMMONIA – NH_3 ”

Para que o leitor possa ir acompanhando a animação concomitante à leitura desta dissertação, ao início da explicação de cada assunto, será indicado o tempo em que o mesmo se encontra na animação. O link de acesso à animação encontra-se no Vídeo 8.



Vídeo 8. Animação “Molecular Orbitais: Ammonia – NH_3 ”. Fonte: <https://youtu.be/7b8P1Z0ab2E>

Ao assistir à animação da amônia, o aluno instintivamente cria modelos mentais. Dado que a animação estimula mais as habilidades visuoespaciais do que as figuras bidimensionais, o aluno terá muito mais facilidade em compreender e posteriormente reproduzir as ligações químicas da amônia e sua geometria espacial, se o processo de aprendizado ocorrer através da apresentação da animação, com o respaldo da explicação do professor.

De 08 até 33 segundos. A animação é iniciada mostrando-se como é possível e simples de representar a amônia em sua geometria pirâmide trigonal, comumente determinada pelo modelo VSEPR, através de um cubo, conforme apresentado na Figura 8b, item 4.4 desta dissertação.

De 34 segundos, até 01:00 minuto. O próximo passo é mostrar o posicionamento dos OAs de valência na molécula. O posicionamento dos orbitais

adotado na animação também é mostrado na Figura 12b, ítem 4.5.

De 01:10 minutos, até 03:56 minutos. são introduzidas as CLAOs que originam os OM da amônia.

A amônia possui 7 OA de valência, sendo quatro do nitrogênio e um de cada hidrogênio. Como o número de OMs formados é igual ao número de OA que participam das combinações, são formados 7 OMs, sendo três sigmas ligantes, σ , um não ligante, nb , e três sigmas antiligantes, σ^* . Logo, os 8 elétrons de valência da molécula ocupam os quatro primeiros orbitais, sendo os três ligantes e o não ligante.

As combinações lineares para os orbitais moleculares da amônia mostradas na animação são as seguintes:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= [2s]N + [1s + 1s + 1s]H & \sigma_1^* &= [2s]N - [1s + 1s + 1s]H \\ \sigma_2 &= [2p_x]N + [1s + 1s - 1s]H & \sigma_2^* &= [2p_x]N - [1s + 1s - 1s]H \\ \sigma_3 &= [2p_y]N + [1s - 1s + 1s]H & \sigma_3^* &= [2p_y]N - [1s - 1s + 1s]H \\ nb &= [2p_z]N\end{aligned}$$

A formação dos três orbitais σ ligantes é mostrada de 01:00 minuto até 02:58 minutos. O orbital σ_1 , de mais baixa energia não possui nodos, ao passo que o orbital σ_2 possui um plano nodal no plano xz, e o orbital σ_3 , no plano yz.

Os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ do nitrogênio organizam-se no espaço da mesma forma com relação aos orbitais $1s$ dos hidrogênios, mudando apenas o seu eixo de orientação. Portanto, os orbitais moleculares σ_2 e σ_3 formados a partir das CLAOs dos orbitais $2p_x$ e $2p_y$ apresentam degenerescência, assim como os orbitais antiligantes σ_2^* e σ_3^* .

Como o orbital $2p_z$ do nitrogênio não interage com nenhuma combinação de orbitais dos hidrogênios, ele origina o orbital não ligante, nb .

A animação também tem o intuito de mostrar aos alunos que para determinarem de maneira aproximada o formato dos OM, não é estritamente necessário resolver equações matemáticas complexas. Para tanto, basta delinear os contornos dos orbitais das CLAOs, respeitando as trocas de sinais dos lóbulos, que

indicam a presença de planos nodais, conforme Figura 19.

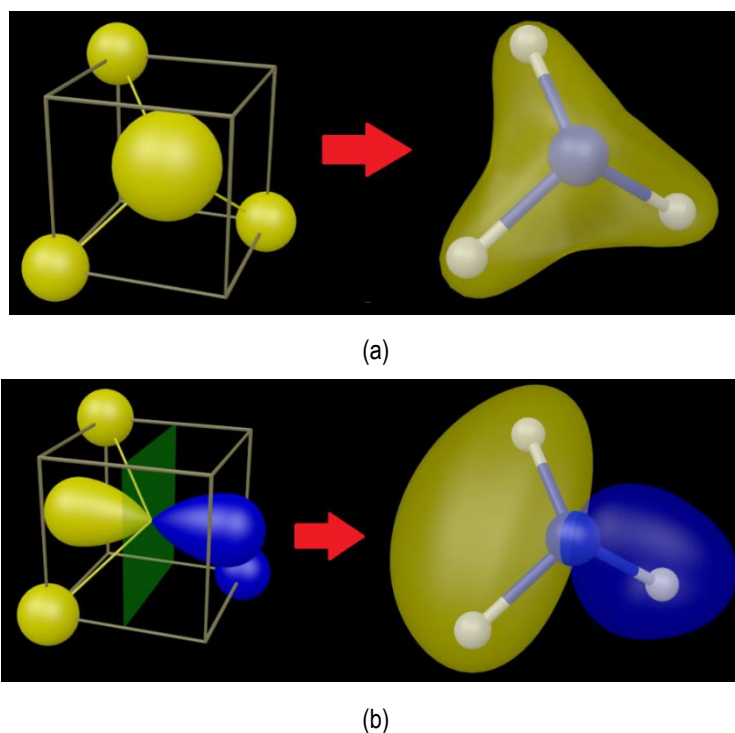


Figura 19. Formação dos OM da amônia a partir do contorno das CLAOs. (a) Orbital σ_1 , que não contém nodos. (b) Orbital σ_2 , que contém um nodo no plano yz. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=7b8P1Z0ab2E>.

De 02:59 minutos até 03:56 minutos, são mostradas as CLAOs correspondentes ao orbital não ligante, formado a partir do orbital p_z do nitrogênio, que, devido ao seu posicionamento na molécula, não interage com nenhuma combinação dos orbitais 1s dos hidrogênios, e aos orbitais antiligantes que, por apresentarem vários planos nodais são os mais altos em energia.

Visando a padronização entre todas as animações da série dos OMs, a representação visual dos OM foi direcionada aos orbitais sigma ligantes, apenas.

A única representação dos OMs da amônia no livro *Inorganic Chemistry* de Housecroft, 2012, é a apresentada na Figura 18. Observa-se que, mais uma vez, os orbitais são apresentados bidimensionalmente, em apenas uma vista, limitando assim o processo cognitivo dos alunos.

No livro *Inorganic Chemistry* de Shriver, 2010, os orbitais moleculares adaptados por simetria são apresentados de maneira ainda mais confusa, em uma

figura presente no capítulo 2, e reproduzida na Figura 20.

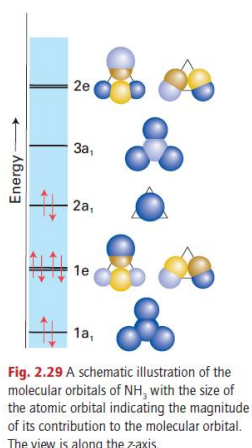


Figura 20. Orbitais Moleculares adaptados por simetria da amônia, apresentados no capítulo 2 do livro Inorganic Chemistry de Shriver. Fonte: SHRIVER et. al, 2010.

A legenda da figura diz que a vista adotada para a representação dos orbitais moleculares é ao longo do eixo z. Porém, como não há a presença de coordenadas, e por se tratar de uma figura bidimensional, fica difícil conseguir reproduzir mentalmente os orbitais moleculares apresentados.

De 04:03 minutos até 05:40 minutos. A última etapa da animação é a construção do diagrama dos níveis de energia dos orbitais moleculares, para mostrar ao aluno todos os orbitais moleculares formados, bem como seus níveis energéticos.

4.7.3 SUGESTÕES DE UTILIZAÇÃO DA ANIMAÇÃO “*MOLECULAR ORBITALS: AMMONIA– NH₃*”

Apesar de o tema principal da animação ser a TOM, em sala de aula, o professor também pode utilizar a animação para ensinar aos alunos sobre geometria espacial, além de justificar, através dos OM, o comportamento nucleofílico adotado pela amônia em reações da química orgânica. Portanto, a animação encaixa-se em disciplinas tanto de química geral, inorgânica e orgânica, teóricas e/ou experimentais.

Como primeira opção, sugere-se ao professor que utilize a animação em sua totalidade como um exemplo prático para ensinar aos alunos a TOM para moléculas poliatômicas, como uma alternativa aos Orbitais Adaptados por Simetria da Teoria de Grupos, já que a abordagem realizada na animação não requer a aplicação de operações de simetria, além de contar com o auxílio de cubos que facilitam a visualização tridimensional.

Recomenda-se mostrar a animação passo-a-passo, sem legendas, para que o professor vá explicando os conceitos juntamente à animação.

Para aumentar a eficácia da animação, o professor pode associa-la a atividades que estimulem o aprendizado ativo dos alunos, através de exercícios práticos que ocorram durante, ou logo após a utilização da animação em sala de aula.

Como uma sugestão de exercício, logo após mostrar e explicar sobre a representação da geometria espacial da amônia em um cubo (de 08 – 33 segundos da animação), o professor pode pausar o vídeo e solicitar aos alunos que reproduzam no papel o que acabaram de ver na animação. A mesma estratégia pode ser utilizada para a formação das CLAOs e dos OMs.

O professor também pode incentivar os alunos a determinarem a geometria espacial e os OMs para a fosfina, PH_3 , já que o procedimento é o mesmo adotado para a amônia, e os resultados obtidos são muito similares. A única diferença é que os orbitais de valência da fosfina são os orbitais 3s e $3p_x p_y p_z$.

Além do mais, o professor pode justificar a nucleofilicidade da amônia devido a presença de um par de elétrons no orbital de fronteira não ligante, que fica disponível para fazer ligações com moléculas eletrofílicas em sínteses e reações orgânicas.

4.8 ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: METHANE – CH_4 ”

Por ser o mais simples dos hidrocarbonetos, o metano, CH_4 , é utilizado por professores em disciplinas de química geral, inorgânica e orgânica, principalmente para ensinar geometria espacial, hibridização de orbitais atômicos e

Teoria dos Orbitais Moleculares para moléculas poliatômicas.

Apesar de sua simplicidade, os alunos apresentam grandes dificuldades para determinar sua geometria espacial, havendo assim a necessidade de os professores utilizarem modelos e ferramentas que auxiliam a visualização do tetraedro formado pela molécula.

Uma ferramenta bastante utilizada por professores é o Kit Molecular, composto por peças de plástico, que ao serem montadas da maneira correta, reproduzem a estrutura de moléculas orgânicas, inorgânicas e orbitais atômicos. A Figura 21 apresenta o metano reproduzido através de peças de um kit molecular.

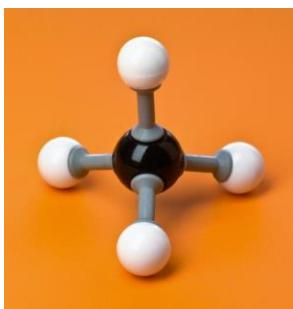


Figura 21. Metano reproduzido através de um kit molecular.

Fonte: <https://fineartamerica.com/featured/methane-molecular-model-martyn-f-chillmaid.html>.

O kit molecular proporciona uma experiência sensorial, pois as moléculas podem ser tocadas e manipuladas livremente, contribuindo para o desenvolvimento das habilidades visuoespaciais, e para um aprendizado ativo por parte dos alunos.

Porém, a utilização do kit apresenta uma grande desvantagem relacionada ao preço. Um kit básico com 80 peças custa entre R\$300 – R\$350. Um modelo avançado com 810 peças custa cerca de R\$1200. (CIENLAB, 2018). Portanto, os kits moleculares não são acessíveis a todos por apresentarem um alto custo de aquisição.

Apesar das animações 3D não proporcionarem uma experiência sensorial, elas são de acesso gratuito e permitem que os alunos visualizem moléculas e orbitais de ângulos variados, com o auxílio de eixos de orientação. Ademais, como já explicado na introdução desta dissertação, a associação das

animações a experiências ativas em sala de aula, pode apresentar ganhos significativos para o aprendizado dos alunos.

4.8.1 JUSTIFICATIVAS DA ESCOLHA DO METANO

Assim como a amônia, os OM do metano são comumente explicados em livros didáticos através dos Orbitais de Grupos Ligantes, envolvendo a aplicação de operações de simetria complexas, o que dificulta o processo de aprendizagem dos alunos.

O procedimento para determinar os OM adaptados por simetria para o metano é o mesmo da amônia. A diferença é que, devido a sua geometria tetraédrica, o metano pertence ao grupo pontual T_d . Os orbitais $2p_x, 2p_y, 2p_z$, do carbono possuem simetria t_2 , e o $2s$, a_1 . Um dos orbitais $1s$ dos hidrogênios é a_1 , e os demais, t_2 .

Orbitais que possuem a mesma simetria combinam-se, originando oito OM, sendo quatro ligantes, e quatro antiligantes, dispostos no diagrama de níveis de energia apresentado na Figura 22 (HOUSECROFT e SHARPE, 2012).

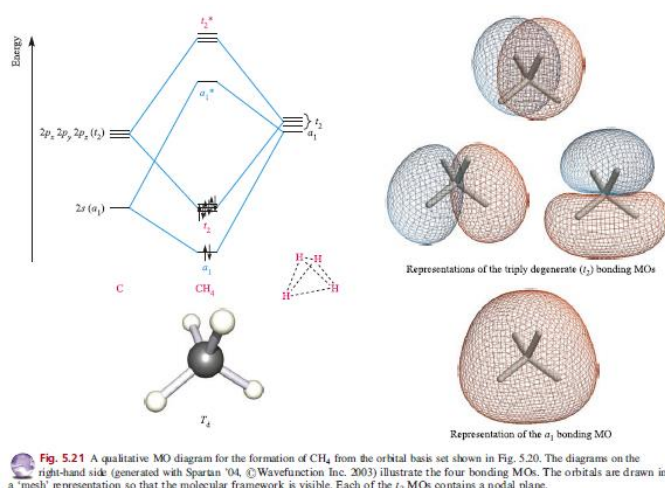


Figura 22. Orbitais Moleculares adaptados por simetria do metano. Fonte: HOUSECROFT e SHARPE, 2012.

Apesar de serem tridimensionais, os orbitais moleculares formados são apresentados de forma bidimensional na Figura 21, limitando a representação de

características como a profundidade dos orbitais. Percebe-se também a falta de um eixo de coordenadas para melhor guiar os leitores no processo de observação das figuras.

Há uma página online da *Oregon State University* que explica a formação dos orbitais moleculares do metano, conforme a Figura 23. (OREGON STATE UNIVERSITY, 2016).

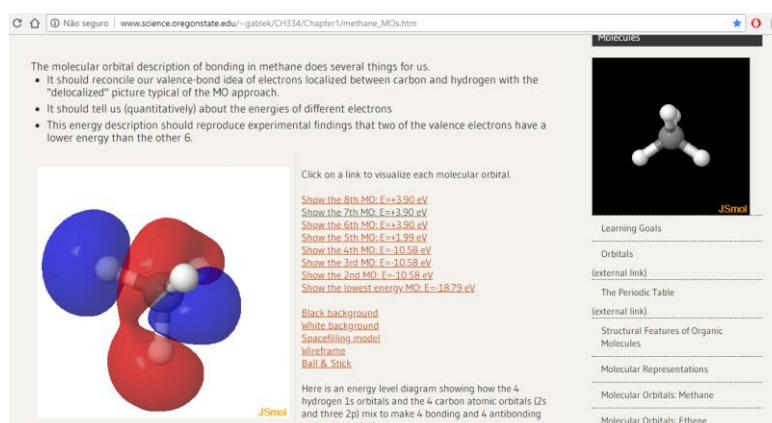


Figura 23. Orbitais moleculares do metano em website da Oregon State University. Fonte: OREGON STATE UNIVERSITY, 2016.

Neste caso, apesar do formato dos orbitais moleculares serem apresentados de uma maneira coerente, o aluno também não possui referência de eixos espaciais, o que pode ser confuso durante a visualização espacial dos orbitais. Tão pouco as CLOA que originam os OM's, e que nem sempre são simples de serem previstas, são representadas neste site.

Um equívoco conceitual cometido pelo autor da página é a equiparação dos OM's formados com as ligações formadas a partir da interação entre os orbitais hibridizados sp^3 do carbono, e os orbitais 1s dos hidrogênios. Para este argumento, o autor baseia-se no resultado do cálculo teórico no qual os OM's do metano, apesar de serem deslocalizados, apresentam uma alta densidade eletrônica nas regiões entre o carbono e os hidrogênios, assim como as interações entre os orbitais sp^3 do carbono e 1s dos hidrogênios nos eixos das ligações.

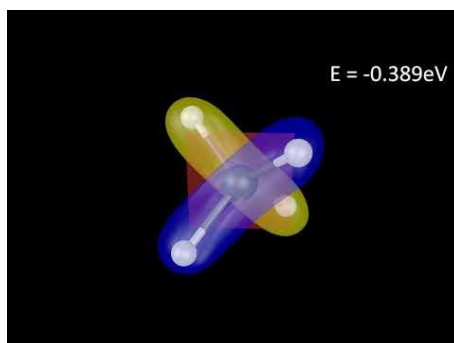
Ao equiparar os OM's com as interações entre orbitais hibridizados e OAs,

o autor acaba contradizendo o princípio da deslocalização de elétrons da TOM, introduzindo aos alunos a possibilidade de acharem que os OM's podem, em algumas ocasiões, serem localizados, o que não é verdade.

A animação “*Molecular Orbitals: Methane – CH₄*” foi elaborada visando a correção de defasagens e equívocos tais como os supracitados, simplificando o processo de aprendizagem e ensino através de ferramentas visuais mais assertivas e objetivas.

4.8.2 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: METHANE – CH₄”

A animação produzida encontra-se no Vídeo 9.



Vídeo 9. Animação “Molecular Orbitals: Methane – CH₄”.
Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=Zkt2-MLpPHM>

De 08 até 33 segundos. A primeira parte da animação mostra como é possível e simples de representar a geometria tetraédrica do metano através de um cubo, conforme apresentado na Figura 8c que se encontra no item 4.4.

De 34 segundos até 01:00 minuto. O próximo passo mostra o posicionamento dos OAs de valência na molécula, demonstrando que os orbitais 2p do carbono não estão alinhados aos orbitais 1s dos hidrogênios. O posicionamento dos orbitais adotado na animação é apresentado na Figura 12c, item 4.5.

De 01:10 até 05:42 minutos. A terceira parte introduz, então, as CLAOs que originam os OM do metano. De 01:10 até 03:41 minutos, são apresentados os OM's ligantes, e de 03:42 até 05:42 min, os OM's antiligantes. O formato dos orbitais

é mostrado apenas para os orbitais ligantes, assim como em todas as outras animações da série dos orbitais moleculares; fizemos essa opção porque os orbitais moleculares antiligantes destas moléculas saturadas nunca estão envolvidos em qualquer tipo de interação com outras espécies.

O metano possui oito OA de valência, sendo quatro do carbono ($2s$, $2p_x p_y p_z$) mais um orbital $1s$ de cada hidrogênio. Como há a possibilidade de um orbital $1s$ se combinar com mais de um OA, utiliza-se a combinação linear dos quatro orbitais $1s$ dos hidrogênios para formação dos OMs do metano. A quantidade de combinações é igual a quantidade de OA disponíveis.

Portanto, os quatro OAs do carbono combinam-se com cada uma das quatro combinações possíveis dos orbitais $1s$ dos hidrogênios originando oito OM, sendo quatro sigmas ligantes, σ , e quatro sigmas antiligantes, σ^* , conforme as equações mostradas abaixo:

$$\begin{array}{ll} \sigma_1 = [2s]C + [1s + 1s + 1s + 1s]H & \sigma_1^* = [2s]C - [1s + 1s + 1s + 1s]H \\ \sigma_2 = [2p_x]C + [1s + 1s - 1s - 1s]H & \sigma_2^* = [2p_x]C - [1s + 1s - 1s - 1s]H \\ \sigma_3 = [2p_y]C + [1s - 1s - 1s + 1s]H & \sigma_3^* = [2p_y]C - [1s - 1s - 1s + 1s]H \\ \sigma_4 = [2p_z]C + [-1s - 1s + 1s + 1s]H & \sigma_4^* = [2p_z]C - [-1s - 1s + 1s + 1s]H \end{array}$$

Os oito elétrons de valência a serem distribuídos ocupam apenas os quatro primeiros orbitais moleculares, sigma ligantes, σ .

Assim como para a amônia, a animação mostra que para determinar de maneira aproximada o formato dos OMs do metano, basta aproximar e delinear os contornos dos orbitais de cada CLAO, respeitando as trocas de sinais dos lóbulos que indicam a presença de planos nodais.

Os orbitais ligantes σ_2 , σ_3 e σ_4 são degenerados e a única diferença entre eles é o eixo de orientação. O mesmo raciocínio aplica-se aos orbitais antiligantes σ_2^* , σ_3^* e σ_4^* .

De 05:43 minutos, até 08:03 minutos. A última etapa é a construção do diagrama dos níveis de energia dos orbitais moleculares para mostrar os níveis de

energia dos oito orbitais moleculares do metano. A ordem crescente de energia dos orbitais moleculares segue a ordem crescente do número de nodos. O σ_1 é o de energia mais baixa porque não apresenta nenhum nodo e em seguida encontra-se o conjunto degenerado, que apresenta apenas um nodo.

4.8.3 SUGESTÕES DE UTILIZAÇÃO DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: METHANE – CH₄”

Assim como para a amônia, a animação do metano utiliza a TOM para moléculas poliatômicas como uma alternativa aos Orbitais Adaptados por Simetria da Teoria de Grupos, sem aplicar operações de simetria, contando com o auxílio de cubos que facilitam a visualização tridimensional da orientação dos átomos e orbitais da molécula.

Recomenda-se mostrar a animação passo-a-passo, sem legendas, para que o professor vá explicando os conceitos juntamente à animação.

Para reforçar o aprendizado, logo após mostrar e explicar sobre a representação da geometria espacial do metano em um cubo (de 00:08 – 00:33 segundos da animação), o professor pode pausar o vídeo e solicitar aos alunos que exercitem no papel o que acabaram de assistir na animação. A mesma estratégia pode ser utilizada para a formação das CLAOs e dos OMs.

Como exercício, o professor pode solicitar os alunos que determinem a geometria espacial e os OMs para o silano, SiH₄, já que o procedimento é o mesmo adotado para o metano, e os resultados obtidos são muito similares. A única diferença é que os orbitais de valência do silano são os orbitais 3s e 3p_xp_yp_z.

Além do professor utilizar a animação como um todo para ensinar o passo a passo da construção do diagrama dos níveis de energia dos OMs do metano, ela também pode ser utilizada para explicar através da TOM, a baixa reatividade observada para a molécula, atribuída a energia de seus orbitais moleculares.

O metano apresenta orbitais moleculares ligantes de energias muito baixas, sendo os únicos na molécula ocupados por elétrons. Como o primeiro orbital não ocupado é antiligante e possui energia muito alta, é formada uma lacuna

energética entre o HOMO e o LUMO desfavorável tanto a promoção de elétrons do HOMO para o LUMO, quanto da aceitação de elétrons externos no LUMO, tornando o metano pouco reativo. Para essa explicação, o professor pode utilizar o diagrama de energia dos orbitais moleculares apresentado na animação partir dos 05:43 minutos.

4.9 ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: DIBORANE – B_2H_6 ”

Apesar do elemento boro pertencer ao Grupo 13 na tabela periódica, seu comportamento químico assemelha-se muito aos dos elementos do Grupo 14. O boro, assim como o carbono, forma hidretos chamados de boranos. Os boranos possuem uma peculiaridade atribuída à presença de ligações químicas nas quais o hidrogênio atua como uma ponte entre dois átomos de boro, chamadas de ligações *três centros, dois elétrons*, conforme item 4.5.1 (Miessler *et. al*, 2014).

O diborano é um dos boranos mais amplamente utilizados por professores em disciplinas de química geral e inorgânica para ensinar aos alunos o conceito de compostos deficientes de elétrons.

Além de literaturas como Shriver, 2010 e Huheey, 1993 (item 4.5.1), há materiais online, como o pdf “*Molecular Orbitals in Inorganic Chemistry*”, da Imperial College of London, que explicam o diborano (DIBORANO, 2018).

A abordagem utilizada pela autora do conteúdo baseia-se em determinar os OMs através da fragmentação do diborano em partes cujos OMs já são conhecidos. Operações de simetria são aplicadas tanto na molécula como um todo, quanto em cada um dos fragmentos, e o diagrama de orbitais moleculares é construído a partir da combinação das CLAOs dos fragmentos de mesma simetria.

No caso, os fragmentos utilizados são os dois BH_2 das ligações terminais, e um H_2 , correspondente aos hidrogênios das duas ligações em ponte. A autora determina o grupo pontual para a molécula como um todo, D_{2h} , e aplica as operações de simetria correspondentes nas CLAOs dos fragmentos, encontrando suas simetrias.

Então, as CLAOs de mesma simetria dos fragmentos BH_2 são

combinadas, gerando oito orbitais moleculares correspondentes ao fragmento $B_2H_4(BH_2 + BH_2)$. Os dez elétrons do fragmento (três de cada boro e um de cada hidrogênio) são distribuídos, ocupando os cinco primeiros orbitais.

Em seguida, o mesmo procedimento é feito para o fragmento H_2 , formando dois orbitais moleculares. Os dois elétrons do fragmento são alocados no primeiro orbital molecular.

Os orbitais moleculares do diborano são obtidos a partir da combinação das CLAOs dos fragmentos B_2H_4 e H_2 , formando-se, então, dez orbitais moleculares, sendo dois orbitais ligantes, seis não ligantes, e dois antiligantes. Os doze elétrons de valência ocupam os seis primeiros orbitais, sendo quatro não-ligantes e dois ligantes.

Por último, a autora analisa o diagrama formado concluindo que, como o LUMO é de baixa energia, essencialmente não ligante com relação aos fragmentos BH_2 e H_2 , ele pode aceitar elétrons sem desestabilizar a molécula, formando a espécie estável, $B_2H_6^{2-}$.

O livro *Inorganic Chemistry* de Miessler, 2014, apresenta uma abordagem similar à utilizada pela autora do pdf da Imperial College. A diferença é que os autores do livro trabalham exclusivamente com o fragmento central da molécula, que contém as duas ligações em ponte $B-H-B$, simplificando o processo de determinação dos OMs.

Para construir as CLAOs do fragmento central, são consideradas duas combinações nas quais são aplicadas as operações de simetria do grupo pontual D_{2h} :

- a primeira considera apenas as interações entre os orbitais 1s dos hidrogênios em ponte e,
- a segunda considera apenas as interações entre os orbitais 2s e 2 (p_x, p_y, p_z), dos boros.

As CLAOs dos hidrogênios em ponte que possuem a mesma simetria das CLAOs dos boros, são combinadas, originando dez orbitais moleculares. Os autores justificam a estabilidade das pontes $B-H-B$ majoritariamente ao orbital molecular ligante de simetria b_{3u} , formado a partir dos orbitais s de sinais opostos do

hidrogênio, e orbitais $2p_x$, dos boros, que se espalha pelas duas pontes de hidrogênio.

As explicações acima, além de dificultarem o processo de aprendizado devido as operações de simetria e fragmentação do diborano, conduzem os alunos, e muitas vezes até mesmo os professores, a conclusões erradas, como explicado no item a seguir.

4.9.1 JUSTIFICATIVAS DA ESCOLHA DO DIBORANO

As metodologias adotadas pelo livro de Miessler, 2014, Shriver, 2010, Huheey, 1993, e também por conteúdos online como o do pdf "*Molecular Orbitals in Inorganic Chemistry*", (DIBORANO, 2018) levam os estudantes à hipótese de que os elétrons encontram-se localizados em fragmentos separados do diborano, ao invés de estarem espalhados pela molécula, conforme originalmente prediz a TOM.

O conceito de OM's localizados é um erro grave amplamente difundido no ensino superior de química, que os alunos acabam carregando pelo resto de suas vidas acadêmicas.

Abordagens tais como a proposta por Miessler, são ainda mais confusas por fazerem uso de operações de simetria que ocorrem em espaços tridimensionais, porém são ensinadas através de imagens e recursos gráficos planos, bidimensionais, dificultando a visualização dos alunos. Encontrar eixos de simetria, aplicar as operações e determinar o posicionamento resultante dos átomos constituintes do diborano não é uma tarefa trivial.

Ao depararem-se com dificuldades de visualização de estruturas tridimensionais e eixos e planos de simetria, os alunos sentem-se desestimulados, e os professores, muitas vezes, não têm acesso a ferramentas didáticas que possam solucionar, ou ao menos minimizar tais dificuldades.

Portanto, além de corrigir o conceito de OM localizados, a animação "*Molecular Orbitals: Diborane – B_2H_6* " apresenta recursos e estratégias visuais que foram desenvolvidas visando estimular as habilidades visuoespaciais dos estudantes, auxiliando-os a superarem dificuldades inerentes ao processo de

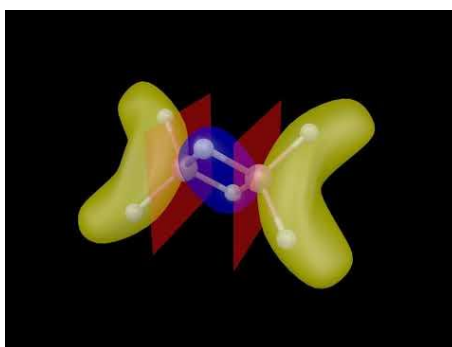
aprendizagem da TOM, especificamente para moléculas tais como o diborano.

A estratégia utilizada na animação não considera a Teoria de Grupos, nem a hibridização de orbitais, demonstrando que, contrariamente à literatura, a partir dos OAs de valência de todos os átomos da molécula são formados OMs deslocalizados suficientes para acomodar os doze elétrons, justificando a estabilidade das ligações em ponte, e da molécula como um todo.

Ademais, se elétrons fossem adicionados à molécula, esses se encontrariam em orbitais não ligantes, não contribuindo para a estabilidade da molécula. Isso permitiria afirmar que o diborano não é deficiente de elétrons porque não mostra tendência em aceitá-los. Portanto, a formação da espécie $B_2H_6^{2-}$ não faz sentido, contrariamente a conclusão da autora do pdf da Imperial College.

4.9.2 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: DIBORANE – B_2H_6 ”

A animação “*Molecular Orbitals: Diborane – B_2H_6* ” encontra-se no Vídeo 10. Recomenda-se que o leitor acompanhe a animação conforme os trechos vão sendo explicados logo mais.



Vídeo 10. Animação “Molecular Orbitals: diborane – B_2H_6 ”. Fonte: https://www.youtube.com/watch?v=nBJIMeR3I_g.

De 08 até 35 segundos. A primeira parte da animação mostra a representação do diborano em um paralelepípedo, com os átomos de boro posicionados no centro de cada cubo, e cada um dos seis hidrogênios em vértices alternados, conforme Figura 9.

De 00:36 até 01:14 minutos. A segunda parte mostra a orientação dos orbitais s e p de cada átomo constituinte da molécula, conforme Figura 12d.

De 01:15 até 05:17 minutos. É na terceira parte que se introduz a proposta de explicar as ligações químicas no diborano somente através da teoria dos orbitais moleculares, mostrando-se as CLAOs, e como os orbitais moleculares surgem através dessas combinações, espalhando-se por toda a molécula.

Nessa abordagem para o diborano, as CLAOs ocorrem entre os 8 orbitais atômicos de valência dos boros (para cada boro: 2s e 2p_xp_yp_z), e outras 6 combinações possíveis entre os seis orbitais atômicos 1s dos hidrogênios, originando 14 orbitais moleculares. Desses 14, quatro são sigmas ligantes, σ , seis são não ligantes e quatro sigmas antiligantes, σ^* . As CLAO's para os orbitais ligantes e antiligantes são apresentadas a seguir (SANTOS FILHO *et. al*, 2009):

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 &= [2s]B + [1s + 1s + 1s + 1s + 1s + 1s]H + [2s]B \\
 \sigma_2 &= [2p_z]B + [1s + 1s - 1s - 1s - 1s + 1s]H + [2p_z]B \\
 \sigma_3 &= [2p_y]B + [1s + 1s + 1s - 1s - 1s - 1s]H + [2p_y]B \\
 \sigma_4 &= [2p_x]B + [1s + 1s + 1s + 1s - 1s - 1s]H + [2p_x]B \\
 \hline
 \sigma_1^* &= [2s]B - [1s + 1s + 1s + 1s + 1s + 1s]H + [2s]B \\
 \sigma_2^* &= [2p_z]B - [1s + 1s - 1s - 1s - 1s + 1s]H + [2p_z]B \\
 \sigma_3^* &= [2p_y]B + [1s + 1s + 1s - 1s - 1s - 1s]H + [2p_y]B \\
 \sigma_4^* &= [2p_x]B + [1s + 1s + 1s + 1s - 1s - 1s]H + [2p_x]B
 \end{aligned}$$

Os quatro orbitais moleculares ligantes e dois dos não ligantes formados espalham-se por toda a molécula, sendo suficientes para comportar os 12 elétrons de valência, explicando assim as ligações do diborano exclusivamente através da TOM.

A formação dos quatro orbitais moleculares ligantes a partir das CLAOs é mostrada de 01:15 até 03:30 min da animação. Os orbitais não ligantes aparecem apenas no diagrama de orbitais moleculares, e para os antiligantes, são representadas apenas as CLAOs, de 03:31 até 05:17 min.

De 05:18 até 07:25 minutos. A quinta e última parte da animação mostra

a construção do diagrama dos níveis de energia dos orbitais moleculares, onde a ordem crescente de energia dos orbitais segue a ordem crescente do número de nodos.

4.9.3 SUGESTÕES DE UTILIZAÇÃO DA ANIMAÇÃO “*MOLECULAR ORBITALS: DIBORANE – B₂H₆*”

A animação mostra o quão inadequadas são as explicações de compostos deficientes de elétrons encontradas na literatura. O foco principal da animação é apresentar uma nova abordagem, muito mais simples, em que apenas a TOM é utilizada para explicar o diborano. Desta maneira, o tempo que o professor gastaria ensinando os alunos a aplicarem as operações de simetria na molécula, pode ser utilizado para aplicação de exercícios e discussões acerca dos orbitais da molécula.

Uma sugestão ao professor é que explique aos alunos que as CLAOs que originam os orbitais moleculares ligantes devem ser pensadas procurando minimizar a quantidade de nodos. Por exemplo, para a CLAO que forma o OM de mais baixa energia, apenas os OAs são combinados com sinais positivos, sendo essa a única possibilidade de combinação que não gera nodos.

Para a segunda combinação, o professor pode perguntar aos alunos quais orbitais s e quais orbitais p (p_x , p_y ou p_z) podem combinar-se, e com qual sinal, de tal forma que seja formado um orbital molecular com apenas um nodo. No caso, os orbitais p_z e p_y combinados com os orbitais 1s dos hidrogênios formam os orbitais degenerados σ_2 e σ_3 , com apenas um nodo, e os orbitais p_x , formam o orbital σ_4 , com dois nodos, sendo mais alto em energia.

Já os orbitais moleculares antiligantes contêm mais nodos e são mais energéticos que os ligantes. Portanto, para formar as CLAOs que originam tais orbitais, os alunos podem pensar na inversão de sinal dos orbitais dos boros, ou dos hidrogênios nas combinações dos orbitais ligantes, conforme Figura 24.

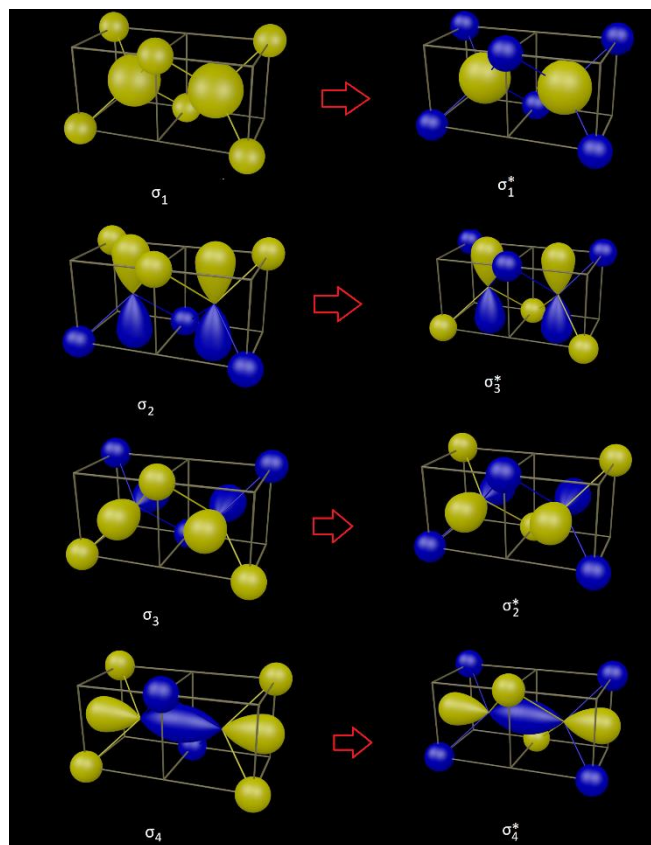


Figura 24. Diferenças de sinais entre as CLAOs que originam os orbitais ligantes, e os antiligantes no diborano. Fonte: https://www.youtube.com/watch?v=nBJIMeR3I_g.

A Figura 24, retirada da animação, mostra que para formação dos orbitais antiligantes, os sinais dos orbitais 1s dos hidrogênios das CLAOs ligantes foram invertidos.

Para originar o formato dos orbitais moleculares ligantes apresentados na animação, basta os alunos contornarem os sinais dos orbitais em cada CLAO, respeitando as trocas de sinal e formação dos nodos.

4.10 ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: METHYLLITHIUM – (CH₃Li)₄”

O metil-lítio é o mais simples dos organolítios. Devido a elevada eletropositividade do lítio, as ligações Li—Me são fortemente polarizadas em direção ao carbono, que possui caráter de carbânion, atribuindo uma alta reatividade a molécula cujo comportamento químico é muito similar aos reagentes de Grignard, conforme a Figura 25. (CLAYDEN *et. al*, 2001; GREENWOOD e EARNSHAW,

1998).

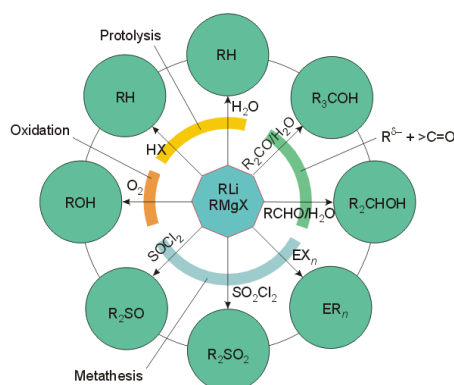


Figura 25. Reações dos organolítios e reagentes de Grignard. Fonte: HOUSECROFT e SHARPE, 2012.

Devido à alta reatividade, o metil-lítio é amplamente utilizado na química de organometálicos, além de atuar como nucleófilo em reações da química orgânica, como a Figura 25. (CLAYDEN *et. al*, 2001).

Na literatura, o metil-lítio é classificado como um composto deficiente de elétrons, já que há apenas 8 elétrons de valência disponíveis para fazer todas as ligações entre os átomos de lítio e as metilas.

4.10.1 JUSTIFICATIVAS DA ESCOLHA DO METIL-LÍTIO

A animação “*Molecular Orbitals: Methyllithium – (CH₃Li)₄*” foi desenvolvida principalmente devido a carência de conteúdos na literatura que expliquem o metil-lítio. Autores como Shriver, 2010, Greenwood, 1998, e Housecroft, 2012, explicam as ligações químicas da molécula através da associação equivocada entre a teoria da ligação de valência e a dos orbitais moleculares, originando OMs deslocalizados em cada uma das faces do composto, conforme previamente explicado no item 4.6.2.

Assim como para o diborano, os OMs gerados a partir da interação entre os orbitais hibridizados sp³ das metilas, e os orbitais 2s dos lítios, são deslocalizados nas faces dos tetraedros de lítio. Além do mais, os lítios encontram-se nos vértices do tetraedro, implicando no compartilhamento de seus orbitais entre três faces, o

que impossibilita a utilização do mesmo orbital em quatro CLAOs distintas.

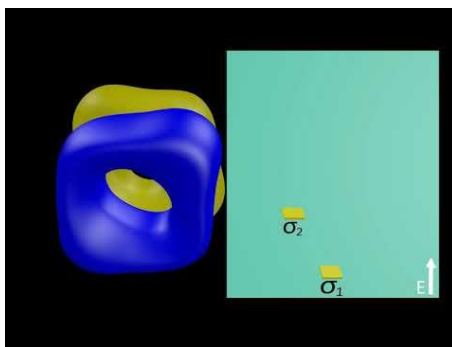
Seguindo a linha de raciocínio proposta pela literatura, seriam necessários 16 orbitais atômicos/hibridizados para originarem os ditos 16 OMs, já que é impossível oito orbitais atômicos/hibridizados (quatro 2s dos lítios e quatro sp^3 das metilas), combinarem-se gerando 16 OMs.

O ponto chave da animação desenvolvida é a formação de OMs deslocalizados para o metil-lítio através apenas da TOM, mostrando que esses OMs formados a partir das combinações lineares entre os quatro orbitais 2s do lítio, e os quatro orbitais HOMO das metilas são suficientes para acomodar todos os elétrons de valência da molécula.

Ademais, a animação traz uma proposta de diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares do metil-lítio, conteúdo inédito na literatura.

4.10.2 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: METHYLLITHIUM – $(CH_3Li)_4$ ”

O Vídeo 8 traz a animação “*Molecular Orbitals: Methyllithium – $(CH_3Li)_4$* ”, cujas etapas são explicadas logo a seguir.



Vídeo 11. Animação “Molecular Orbitals: Methyllithium – $(CH_3Li)_4$ ”.
Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=R45ISZIIIZA>.

De 08 até 57 segundos. A primeira parte da animação mostra a representação espacial mais comum do metil-lítio encontrada na literatura, na qual os átomos de lítio formam um tetraedro, e cada uma das metilas interage com uma

das faces do tetraedro de lítios. Então, a partir dos 36 segundos de animação, a forma tetraédrica transforma-se gradativamente, no qual os átomos de lítio e as metilas ocupam os vértices alternados de um cubo, conforme apresentado na Figura 10.

Essa transformação espacial foi realizada com o intuito de desmistificar a estrutura do oligômero para os alunos, já que a mesma é apresentada de maneira confusa nos livros didáticos. As combinações lineares e a formação dos orbitais moleculares baseiam-se na aproximação da estrutura cúbica.

De 00:58 até 01:25 minutos. Nesta etapa, a orientação espacial para os orbitais 2s dos lítios e HOMO das metilas é apresentada.

Na orientação espacial cúbica, os HOMOs das metilas estão posicionados na diagonal, apontando para o centro do cubo, como se cada metila estivesse interagindo com cada uma das faces do tetraedro de lítios.

De 01:30 até 06:52 minutos. O próximo e último passo é explicar as ligações químicas do metil-lítio somente através da teoria dos orbitais moleculares.

Para o metil-lítio, optou-se por uma dinâmica de animação diferenciada, na qual a construção do diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares ocorre concomitantemente às representações das CLAOs e dos OMs. Observamos que, independentemente da dinâmica da animação, o entendimento na construção do diagrama dos níveis de energia dos orbitais moleculares é facilitado.

A nova abordagem proposta na animação é explicada através das combinações lineares entre os OAs 2s dos lítios, e os HOMOs das metilas. Assim como para o metano, existe a possibilidade de cada orbital 2s dos lítios e de cada HOMO das metilas interagirem com mais de um orbital. Portanto, as CLAOs ocorrem entre as combinações possíveis dos orbitais 2s dos lítios, e as combinações possíveis dos HOMOs das metilas.

Os lítios contribuem com quatro OA 2s, totalizando quatro combinações lineares. Cada uma das metilas contribui com um HOMO, também totalizando quatro combinações lineares possíveis. Desta maneira, as quatro combinações lineares dos lítios combinam-se com as quatro combinações lineares das metilas, formando oito orbitais moleculares que se espalham por toda a molécula, sendo metade sigma

ligante, σ , e metade antiligante, σ^* . Os oito elétrons de valência: um de cada lítio e um de cada metila, são distribuídos nos quatro OMs formados de mais baixa energia, justificando as ligações na molécula:

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 &= [2s + 2s + 2s + 2s]Li + [HOMO_1 + HOMO_2 + HOMO_3 + HOMO_4]CH_3 \\
 \sigma_2 &= [2s + 2s - 2s - 2s]Li + [HOMO_1 + HOMO_2 - HOMO_3 - HOMO_4]CH_3 \\
 \sigma_3 &= [-2s - 2s + 2s + 2s]Li + [-HOMO_1 - HOMO_2 + HOMO_3 + HOMO_4]CH_3 \\
 \sigma_4 &= [2s - 2s - 2s + 2s]Li + [HOMO_1 - HOMO_2 - HOMO_3 + HOMO_4]CH_3 \\
 \hline
 \sigma_1^* &= [2s + 2s + 2s + 2s]Li - [HOMO_1 + HOMO_2 + HOMO_3 + HOMO_4]CH_3 \\
 \sigma_2^* &= [2s + 2s - 2s - 2s]Li - [HOMO_1 + HOMO_2 - HOMO_3 - HOMO_4]CH_3 \\
 \sigma_3^* &= [-2s - 2s + 2s + 2s]Li - [-HOMO_1 - HOMO_2 + HOMO_3 + HOMO_4]CH_3 \\
 \sigma_4^* &= [2s - 2s - 2s + 2s]Li - [HOMO_1 - HOMO_2 - HOMO_3 + HOMO_4]CH_3
 \end{aligned}$$

O orbital molecular de mais baixa energia é formado apenas por interações construtivas entre os orbitais 2s dos lítios e os HOMOs da metila e, portanto, não possui planos nodais.

Os orbitais ligantes σ_2 , σ_3 e σ_4 são degenerados pois as combinações lineares que os originam são equivalentes, formando apenas um nodo em cada orbital. A mesma linha de raciocínio pode ser utilizada para os orbitais antiligantes, nos quais os três últimos orbitais também são degenerados.

É importante ressaltar que a estratégia adotada na animação em que a metila contribui apenas com o HOMO é uma aproximação. A rigor, os orbitais 2s e 2p dos carbonos e 1s dos hidrogênios deveriam ser considerados. Neste cenário, as CLAOs seriam formadas a partir das combinações de doze orbitais atômicos dos carbonos, doze dos hidrogênios e quatro dos lítios, tornando o passo a passo confuso para os alunos, contrariando a intenção desejada com a animação.

4.10.3 SUGESTÕES DE UTILIZAÇÃO DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: METHYLLITHIUM – (CH₃Li)₄”

A linha de raciocínio para utilização desta animação pode ser construída a partir da justificativa do porque o metil-lítio é classificado como um composto

deficiente de elétrons pela literatura. O professor pode explicar a formação dos OMs da molécula através das combinações dos orbitais 2s dos lítios e dos orbitais sp^3 das metilas, já apontando e explicando as falhas dessa abordagem, supracitadas no item 4.10.1.

Então, o professor pode argumentar que a animação “*Molecular Orbitals: Methyllithium – $(CH_3Li)_4$* ” possui o objetivo de mostrar uma nova abordagem para a molécula, corrigindo equívocos tais como a utilização de duas teorias de ligação e formação de OMs localizados. A partir da construção deste argumento, sugere-se que o professor explique a formação dos OMs do metil-lítio mostrada na animação, através somente da TOM, combinando-se os orbitais 2s dos lítios com os HOMOs das metilas.

O caráter de carbânion dos carbonos da metila pode ser explicado através do DEOM apresentado na animação, devido ao fato de os elétrons que ocupam os orbitais ligantes apresentarem energias mais próximas aos carbonos das metilas. Deste modo, o metil-lítio atua como nucleófilo nas reações das quais participa.

Um exemplo é a reação de adição nucleofílica do metil-lítio ao acetaldeído, formando o álcool isopropílico, conforme Figura 26.



Figura 26. Síntese do álcool isopropílico através do ataque nucleofílico ao acetaldeído. Fonte: CLAYDEN et. al, 2001.

Observa-se que, devido ao seu caráter nucleófilo, o HOMO do metil-lítio interage com o LUMO da carboxila, de caráter eletrófilo, formando uma nova ligação C—C. Nesta interação, ocorre a doação de um par de elétrons do HOMO do metil-lítio, para o LUMO do acetaldeído, enfraquecendo as ligações Li—CH₃ e HC=O, formando uma nova ligação C—C. (CLAYDEN et. al, 2001).

4.11 HIDROFORMILAÇÃO CATALÍTICA

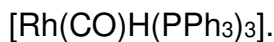
A hidroformilação, ou processo oxo, ou ainda oxo síntese, é um processo catalítico no qual olefinas reagem com monóxido de carbono, CO e hidrogênio, H₂, resultando em aldeídos que contém um átomo de carbono a mais em suas cadeias se comparados às olefinas originais (SHRIVER, *et. al*, 2010, HOUSECROFT e SHARPE, 2012). Catalisadores de cobalto, ródio e platina são os mais amplamente utilizados (HOUSECROFT e SHARPE, 2012, BOTTEGHI *et al.*, 1997).

Industrialmente, a hidroformilação vêm sendo explorada desde a Segunda Guerra Mundial. Os aldeídos produzidos pelo processo são comumente reduzidos à álcoois que são utilizados como solventes, plastificantes, e também na síntese de detergentes (SHRIVER, *et. al*, 2010). Ademais, a hidroformilação tem apresentado potencial notório para produção industrial de várias especialidades químicas e compostos farmacêuticos devido ao seu alto rendimento para com determinadas olefinas (BOTTEGHI *et al.*, 1997).

A hidroformilação pode formar uma mistura de aldeídos lineares (isômero *n*, *n*) e ramificados (isômero *i*, *i*), processo chamado de isomerização. Outro fator a ser considerado é a possibilidade da hidrogenação do aldeído para formar um álcool. O tipo de catalisador utilizado é o que controla e determina a proporção dos isômeros ao final do ciclo catalítico, e a hidrogenação. No caso, o catalisador de ródio representado na animação é seletivo para aldeídos lineares, sendo a taxa maior que 10:1, além de manter a taxa de hidrogenação muito baixa (HOUSECROFT e SHARPE, 2012).

O processo de isomerização da olefina pode ocorrer na etapa de adição do monóxido de carbono. Se o CO é adicionado primeiramente ao metal do catalisador, com posterior migração da olefina, o *n*-aldeído é produzido. Porém, se a adição do CO ocorre concomitante à migração do hidrocarboneto, forma-se o *i*-aldeído. Portanto, a hidroformilação do propileno representada na animação produz o *n*-butilaldeído, e a sua hidrogenação foi desconsiderada.

Para as animações produzidas, optou-se pela utilização do propileno, e do catalisador de ródio, hidreto de carbonilotris(trifenilfosfina)ródio(I)-

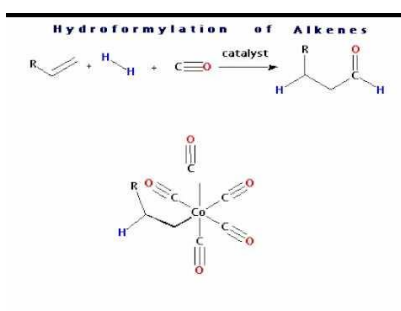


4.11.1 JUSTIFICATIVAS DA ESCOLHA DA HIDROFORMILAÇÃO CATALÍTICA

A química de organometálicos é temida pelos alunos pois envolve moléculas, interações e reações que por vezes não lhes são familiares. Além do mais, as regras de nomenclaturas dos complexos que dão origem a nomes como o do catalisador de ródio aqui utilizado, não são convidativas e acabam contribuindo para criação de bloqueios por parte dos alunos.

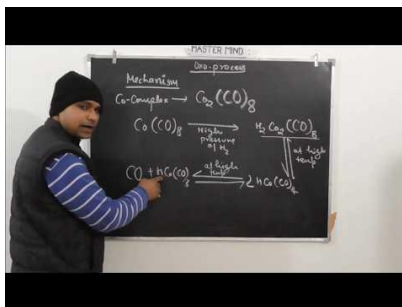
A falta de recursos visuais de qualidade que auxiliem os professores no ensino da química de organometálicos também é um ponto desfavorável, pois para que os alunos possam entender as reações que acontecem nos ciclos catalíticos é necessário a compreensão da geometria e orientação espacial dos ligantes que compõe os complexos que participam dos ciclos.

Também é necessário que os alunos compreendam a regra dos 18 elétrons para que a adição, eliminação e rearranjos de ligantes em um ciclo catalítico faça sentido. Os Vídeos 12 e 13 que explicam a hidroformilação catalítica, são exemplos de materiais disponíveis gratuitamente no youtube.



Vídeo 12. Vídeo que explica a hidroformilação catalítica em 30 segundos.

Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=3-hrQMzyAtM>



Vídeo 13. Videoaula sobre a hidroformilação catalítica. Publicada no youtube em janeiro de 2018, possui cerca de 2 mil visualizações. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=TVel1cDQuXQ>.

O Vídeo 12, feito com recursos gráficos pouco elaborados, não deixa claro aspectos importantes para o entendimento do ciclo catalítico, como posicionamento dos ligantes e reagentes, e impedimentos estéricos no catalisador hidreto de tetracarbonilcobalto, $\text{HCo}(\text{CO})_4$. Além disso, a animação ocorre em duas dimensões, limitando os ângulos em que a quebra e formação de ligações podem ser mostrados.

Em contrapartida ao Vídeo 12, o Vídeo 13 apresenta uma videoaula, que apesar de ser um recurso visual, e com uma quantidade relativamente alta de acessos—cerca de 2 mil em seis meses de publicação, não apresenta nenhuma inovação. O professor explica a hidroformilação utilizando o catalisador dicobaltooctacarbonilo, $\text{Co}_2(\text{CO})_8$, através de um simples quadro negro e giz.

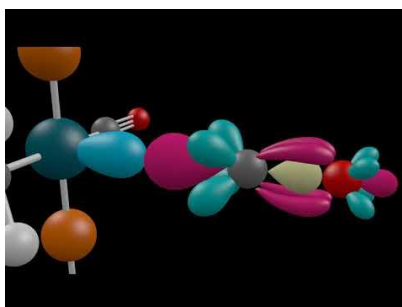
Ambos vídeos foram encontrados no youtube digitando-se “hydroformylation” no campo de pesquisa. Mais de 50 vídeos relacionados ao tema apareceram nos resultados. Todos apresentam similaridades com os Vídeos 12 e 13, ou seja, são feitos de forma caseira e com recursos computacionais muito simples que não apresentam resultados significantes para a melhora do aprendizado dos alunos.

Portanto, escolhemos trabalhar com a hidroformilação catalítica pois, além de ser de grande importância industrial, as reações e teorias envolvidas no ciclo não são triviais, e também para ajudar a sanar a escassez de recursos visuais acessíveis de boa qualidade didática relacionados a química de organometálicos.

4.11.2 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “HYDROFORMYLATION OF PROPYLENE – STEP BY STEP”

A animação *step by step* é importante como um recurso didático visual para os professores utilizarem em sala de aula. Através da animação, os professores conseguem mostrar e explicar as interações que, por muitas vezes, justamente pela falta de recursos visuais tridimensionais, acabam ficando no campo da abstração dos alunos, que necessitam criar mentalmente os ciclos catalíticos a partir somente de imagens bidimensionais de livros didáticos e vídeos e animações como os apresentados nos Vídeos 12 e 13.

A animação *step by step* mostra visualmente os orbitais que são formados e utilizados em cada etapa do ciclo catalítico, de maneira pausada, para que os alunos possam observar os detalhes das interações envolvidas. O link para acesso à animação: “*Hydroformylation of propylene – step by step*” consta no Vídeo 14.



Vídeo14. Animação “Hydroformylation of propylene –step by step”. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=lyJ6Rr-sMMU&t=12s>.

De 08 até 29 segundos. O início da animação apresenta uma imagem que contém todo o ciclo catalítico representado na animação. Esta etapa foi incluída com o objetivo de explicar, resumidamente, o ciclo catalítico para o propileno com o auxílio de legendas.

De 30 até 45 segundos. Logo após a explicação introdutória, o arranjo espacial dos ligantes no catalisador de ródio, $[\text{Rh}(\text{CO})\text{H}(\text{PPh}_3)_3]$, é mostrado. É importante que os alunos compreendam o arranjo do catalisador e impedimento estérico, pois são eles que determinam o posicionamento de novos ligantes no catalisador.

De 46 segundos até 1:10 minutos. Perda de uma trifenilfosfina, PPh_3 . A primeira etapa da hidroformilação catalítica consiste na perda de uma trifenilfosfina e na mudança da geometria do catalisador, que passa de bipirâmide trigonal para quadrado planar, abrindo espaço para a adição de um novo ligante. A perda de uma trifenilfosfina ocorre para minimizar o impedimento estérico pronunciado que existe entre as trifenilfosfinas e também para que o composto passe de 18 para 16 elétrons, possibilitando a adição de um novo ligante. Em seguida ocorre a coordenação de mais uma molécula de CO.

De 1:10 até 2:00 minutos. Inserção entre propileno e hidrogênio. Na segunda etapa, ocorre a coordenação do propileno, que envolve a interação entre os orbitais d do ródio, e o HOMO/LUMO da olefina. Posteriormente ocorre a inserção envolvendo o H e o propileno.

De 2:03 minutos até 3:02 minutos. Inserção entre o alquil e CO. Após a inserção entre o propileno e hidrogênio passa a existir um ligante propila em posição adjacente a uma carbonila, o que permite que ocorra uma segunda inserção, formando novamente um complexo quadrado planar de ródio(I).

De 3:03 minutos até 3:02 minutos. Adição oxidativa de hidrogênio e eliminação redutiva do aldeído. A etapa seguinte constitui da adição oxidativa de H_2 . Para esta adição, é requerida a interação entre os orbitais HOMO e LUMO da molécula de H_2 , e os orbitais d do Ródio. Nesta etapa, a geometria da molécula passa de quadrado planar para octaédrica, indo de 16 para 18 elétrons.

Por fim, ocorre a eliminação redutiva, na qual um dos hidrogênios ligados ao ródio é transferido para o ligante acil em posição adjacente e o aldeído é formado. O catalisador passa de 18 para 16 elétrons, retornando ao complexo quadrado planar e reiniciando o ciclo catalítico.

Para finalizar a animação, mostra-se as mudanças de geometria pelas quais o catalisador passa em cada uma das etapas da hidroformilação.

4.12 ANIMAÇÃO “HYDROFORMYLATION OF PROPYLENE – NONSTOP”

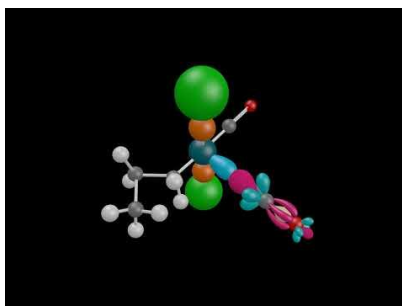
As reações químicas são comumente representadas em livros didáticos e

ensinadas em sala de aula com a utilização de setas que nos induzem a acreditar em um direcionamento único da reação, que na realidade de uma indústria ou laboratório não é bem assim.

Decidimos produzir a animação *nonstop* para salientar que, apesar da utilização de setas como indicadoras de sentidos das reações, as etapas pausadamente abordadas na animação *step by step* ocorrem, na verdade, de maneira contínua, e simultânea, com orbitais sendo formados e consumidos concomitante e sucessivamente, até que os reagentes limitantes sejam totalmente consumidos.

As movimentações em uma reação química ocorrem em velocidades que nossos olhos não são capazes de captar. Portanto, para que as reações sejam apresentadas didaticamente, as animações que retratam reações químicas necessitam ser produzidas em uma escala de tempo desacelerada, para serem utilizadas didaticamente em sala de aula pelos professores.

A animação discutida neste item pode ser assistida através do Vídeo 15.



Vídeo15. Animação “Hydroformylation of propylene - nonstop”. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=NVNKVXThRxc>.

A animação “*Hydroformylation of Propylene: nonstop*” não contém legendas, já que todas as explicações necessárias estão presentes na animação *step by step*.

As explicações das etapas da animação *nonstop* são as mesmas da *step by step*, apresentadas no item 4.11.2. A diferença é a escala de tempo em que as transformações são mostradas.

A perda da trifenilfosfina é representada em 03 segundos, de 08-11 segundos da animação. Então, o posicionamento da câmera é rapidamente alterado, mostrando a segunda etapa de inserção entre propileno e hidrogênio em 14 segundos, de 12-27 segundos no tempo da animação.

Logo em seguida, de 28 a 40 segundos, cerca de 12 segundos no total, é mostrada a inserção entre alquil e monóxido de carbono, e nos 15 segundos finais, de 45 segundos até 1:00 da animação, é mostrada a adição oxidativa de hidrogênio e a eliminação redutiva do produto final, n-butilaldeído.

4.12.1 SUGESTÕES DE UTILIZAÇÃO DAS ANIMAÇÕES “HYDROFORMYLATION OF PROPYLENE: STEP BY STEP” E “HYDROFORMYLATION OF PROPYLENE: NONSTOP”

A principal sugestão que pode ser dada ao professor é que utilize as duas animações para explicar a hidroformilação aos alunos.

Sugere-se que o professor inicie com a animação *step by step*, explicando aos alunos todas as etapas envolvidas no processo, salientando a importância do impedimento estérico dos ligantes, como a trifenilfosfina, no ciclo catalítico. Além disso, é interessante abordar a regra dos 18 elétrons e a sua relação com a estabilidade das configurações do catalisador de ródio durante o ciclo catalítico, já que as adições de ligantes acontecem apenas quando o complexo possui 16 elétrons.

As explicações das etapas da animação apresentadas no item 4.11.2 podem ser utilizadas como guia para o professor, podendo ser, inclusive, disponibilizadas em formato de texto para que os alunos possam consultá-las quando estiverem estudando em suas casas.

Então, sugere-se que após a apresentação e discussão da animação *step by step*, o professor mostre a animação *nonstop* aos alunos, abordando as argumentações previamente apresentadas no item 4.12. Os argumentos do item 4.12 são importantes pois fomentam o pensamento crítico dos alunos com relação as representações das reações químicas e ciclos catalíticos apresentadas na literatura e ensinadas em sala de aula.

O professor também pode disponibilizar uma lista de exercícios aos alunos, para que seja discutida e preenchida em aula, logo após a apresentação e explicação das animações.

É interessante que as animações da hidroformilação catalítica apresentadas nesta dissertação sejam utilizadas como introdução à química de organometálicos e ciclos catalíticos, para que a partir da fundamentação dos conceitos apresentados pela animação, o professor possa explorar outras reações e ciclos de catálise que envolvam organometálicos.

4.13 A ÁGUA

A água, cuja molécula é constituída por dois átomos de hidrogênio ligados a um átomo de oxigênio, é vital para sobrevivência da espécie humana, dos animais, das plantas e de muitos microrganismos, além de ser amplamente utilizada nos mais diversos processos industriais (PANG e DENG, 2008).

Porém, quando passamos a considerar um conjunto de moléculas de água, estruturas cada vez mais complexas se formam devido a sua capacidade de fazer ligações hidrogênio.

A ligação hidrogênio pode ser definida como uma força intermolecular de caráter eletrostático, do tipo dipolo-dipolo, predominante na água no estado líquido (Wang et al, 2012). Ela ocorre quando um átomo de hidrogênio ligado a um elemento altamente eletronegativo interage com outro elemento, também altamente eletronegativo, que possua um par de elétrons livres, tais como flúor, nitrogênio e oxigênio. Como o átomo de hidrogênio encontra-se alinhado com os dois elementos, a ligação é dita direcional (WANG *et. al*, 2012).

No caso da água, a ligação hidrogênio ocorre entre o hidrogênio de uma molécula que está ligado a um oxigênio, e o oxigênio de uma molécula de água vizinha, produzindo interações do tipo “O...H...O”. A ligação hidrogênio possui, aproximadamente, 30% de caráter covalente, sendo que cada molécula de água pode fazer até quatro ligações hidrogênio (CHAPLIN, 1999).

Estudos científicos mostram que a água, através das ligações hidrogênio,

organiza-se em clusters. Um cluster é uma estrutura tridimensional formada a partir de um conjunto de átomos ou moléculas, os monômeros, que interagem entre si, originando estruturas cujos tamanhos são intermediários entre uma molécula e um sólido volumoso (WATER STRUCTURE AND SCIENCE, 2016).

O menor cluster de água já encontrado é formado por seis moléculas, sendo referido como “a menor gota de água” (WANG *et. al*, 2012). Microclusters formados por 6, 8, 12, 15, ou até mais moléculas de água também já foram encontrados (CHAPLIN, 1999). Nos microclusters, as distâncias médias O ... O e O—H são 2,82Å e 0,96Å respectivamente, e o ângulo de ligação H-O-H possui valor médio de 108° (CHAPLIN, 1999).

Deste modo, a água no estado líquido é formada por uma mistura de vários microclusters (CHAPLIN, 1999) que interagem entre si através das ligações hidrogênio, formando estruturas geométricas em rede que, por sua vez, também interagem entre si, originando os clusters. Já foram encontrados clusters de até 280 moléculas de água que se organizam no formato de um icosaedro, com diâmetro aproximado de 3nm (CHAPLIN, 1999).

Por se tratar de um sistema dinâmico, os microclusters de água podem existir por apenas microssegundos, sendo difícil determinar o tamanho exato dos clusters formados na água no estado líquido. A presença de solutos também pode alterar a conformação inicial dos clusters.

4.13.1 RELEVÂNCIA DA ÁGUA CLUSTERIZADA E ESTUDOS CIENTÍFICOS

Masaru Emoto, cientista japonês, realizou um extenso trabalho de fotografar cristais de água. Ele trabalhou com dois cenários distintos. No primeiro, antes do congelamento e análise em microscópio, as amostras de água recolhidas no estado líquido eram expostas a condições diversas. No segundo cenário, as amostras eram congeladas e analisadas sem exposição a nenhuma condição. As fotografias eram tiradas em microscópios com ampliação de 200-500x, a -5°C (WATER CRYSTALS, 2018).

As amostras de água líquida foram expostas a orações, diversos tipos de música, palavras de amor e de ódio. Ademais, também foram coletadas amostras de

água de várias regiões do mundo, congeladas diretamente sem passar por nenhuma experimentação. As fotos obtidas mostram que, além da estrutura da água ser naturalmente diferente de local para local, a exposição das amostras às condições supracitadas alterou a estrutura dos cristais de água, conforme Figuras 27 e 28.



Figura 27. Cristais de amostras de água submetidas a diversas palavras.

Fonte: <https://www.masaru-emoto.net/en/crystal/>



Figura 28. Da esquerda para direita: cristal de amostra de gelo ártico, e cristal de amostra de água do rio Amazonas. Fonte: <https://www.masaru-emoto.net/en/crystal/>

Pode-se atribuir as diferenças observadas nas fotos à natureza sutil da água, sobre as quais tanto a presença de micro, ou até mesmo nano partículas, ou a exposição da água a ondas eletromagnéticas podem provocar mudanças em seu arranjo estrutural.

O cientista americano Dr. Lee H. Lorenzen, da universidade de Berkley, descobriu através de suas pesquisas que a água clusterizada pode apresentar propriedades medicinais. Em 2000, ele patenteou um processo de produção de água microclusterizada em que os microclusters formados podem perdurar de acordo com as condições de armazenamento (LORENZEN, 1998).

Dr. Lorenzen também descobriu que, ao colocar compostos medicinais em concentrações de cerca de 1% em massa, ou até menos, em contato com a água clusterizada obtida ao final do processo, uma estrutura molecular era criada de tal forma que, mesmo após uma diluição de $10^2 - 10^3$ dessa água, a mesma ainda apresentava as propriedades terapêuticas dos compostos inicialmente adicionados. Dr. Lorezen sugere a adição de compostos como vitaminas, aloe vera (para tratamento de feridas), até mesmo de íons cromo visando a diminuição do uso de insulina de pacientes diabéticos (LORENZEN, 2000).

Os resultados obtidos pelos Dr. Masaru Emoto e Lorenzen podem nos ajudar a entender, ou pelo menos propor um mecanismo acerca da efetividade de medicamentos homeopáticos e florais, cujos resultados positivos são reportados por vários médicos e pacientes.

Como todas as moléculas em uma amostra de água encontram-se conectadas através de ligações hidrogênio, a presença de apenas um íon de um soluto ou poluente qualquer altera o arranjo das moléculas de água ao seu redor, que alteram o arranjo das moléculas de água subsequentes, e assim por diante, como uma espécie de reação em cadeia. Logo, a estrutura dos cristais formados na presença de íons é diferente da estrutura observada na água pura. Esta nova estrutura pode ser propagada em um processo de diluição, que é o princípio da homeopatia e dos florais.

Hoje em dia, algumas marcas comercializam águas especiais, devido a sua origem de extração. Um litro da água DEEP, da marca Kona, pode ser adquirido

por até R\$1000. A água é extraída de uma profundidade de aproximadamente 1 km na ilha de Big Island, localizada no Havaí. Segundo informações no website da marca, o caminho percorrido pela corrente de águas profundas que passa pela ilha de Big Island envolve fissuras vulcânicas, que contém eletrólitos ionicamente carregados e traços de minerais que são absorvidos pela água. Como a ilha é uma das mais novas do Havaí, ainda não há formação de corais na costa, propiciando uma extração da água por métodos relativamente simples, não muito longe da costa da ilha.

A água passa por um processo de dessalinização por osmose reversa e segundo a marca, nenhum aditivo é adicionado.

Além da presença de eletrólitos diferenciados, a água DEEP é totalmente livre de poluentes, provavelmente possuindo uma estrutura de clusters tal que, ao ser ingerida, essa estrutura se propaga pelo organismo humano, trazendo benefícios que não são apresentados, por exemplo, ao se ingerir uma água urbana, que hoje em dia contém traços de poluentes como hormônios, que não são eliminados nos processos de purificação empregados.

Assim como a empresa Kona, o Dr. Lorenzen passou a produzir e comercializar a água microclusterizada através da metodologia por ele desenvolvida e patenteada. A água “*Wonder Water*” é comercializada nos Estados Unidos, Japão e Coreia (WONDER WATER, 2018).

Todos esses comentários, aparentemente estranhos do ponto de vista acadêmico, são passíveis de discussão. Independentemente disso, o arranjo entre as moléculas de água é o único argumento que pode ser usado para se tentar compreender esses resultados. O entendimento da natureza da água e sua infinidade de modos de organização merecem atenção; por isso, decidimos abordar este aspecto da água em nossas animações.

4.13.2 PRINCIPAIS MODELOS ABORDADOS NAS ANIMAÇÕES DA ÁGUA

A animação “*Clustered Water*” traz uma proposta de estrutura para água clusterizada. Para produzir a animação, escolheu-se trabalhar com três miniclusters

apresentados nos trabalhos de Wang e Chaplin, sendo eles:

- 1) Prisma, formado por seis moléculas de água, também chamado de hexâmero, mostrado na Figura 29 (WANG *et. al*, 2012):

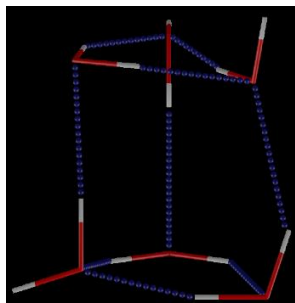


Figura 29. Prisma, hexâmero formado de moléculas de água. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=sCvhsodRBNq&t=103s>.

- 2) Caixa hexamérica, formada por doze moléculas de água organizadas na conformação cadeira, apresentada na Figura 30 (CHAPLIN, 1999):

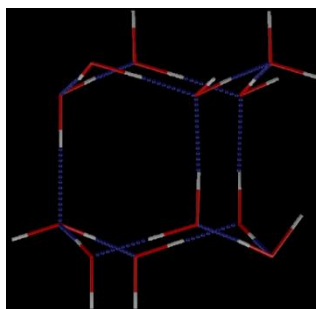


Figura 30. Microcluster de água - caixa hexamérica. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=sCvhsodRBNq&t=103s>.

- 3) Caixa pentagonal, formada por quinze moléculas de água organizadas em três pentágonos que interagem entre si por ligações hidrogênio, conforme a Figura 31 (CHAPLIN, 1999):

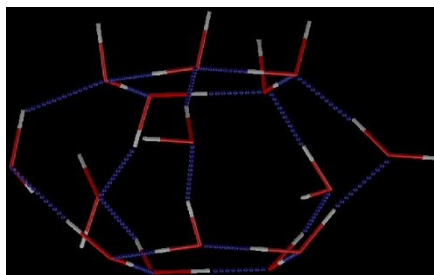


Figura 31. Microcluster de água - caixa pentagonal. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=sCvhsodRBNg&t=103s>.

Com a formação dos clusters, cavidades que são capazes de “engaiolar” os íons durante o processo de dissolução (CHAPLIN, 1999) passam a existir na estrutura.

A animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” utiliza o conceito da água clusterizada para explicar, por uma nova perspectiva, a dissolução do sal de cozinha, NaCl.

O NaCl é minimamente organizado em celas unitárias do tipo cúbica de face centrada, no qual ambos os íons possuem número de coordenação igual a 6, e cada cela unitária possui um total de 4 íons Na^+ e 4 íons Cl^- . A formação de um cristal de NaCl ocorre a partir da junção de várias celas unitárias, que se repetem num espaço tridimensional finito (QUIMICA 3D, 2016).

Na animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” optou-se por mostrar apenas as duas primeiras camadas de um retículo de NaCl, evidenciando as irregularidades através das quais a solubilização começa a acontecer.

A energia reticular, que pode ser definida como a energia liberada para o sistema quando se forma um mol do composto iônico a partir de seus íons no estado gasoso, é o parâmetro termodinâmico que justifica a existência do retículo cristalino do NaCl, e ajuda a entender a sua dureza e fragilidade.

É comum que a superfície do cristal possua irregularidades, que são causadas pela distribuição não regular dos íons Na^+ e Cl^- . O processo de solubilização começa preferencialmente pelos íons que se encontram nessas regiões de irregularidades na superfície, por ser energeticamente mais favorável. A literatura estima que para a completa solubilização de um par iônico Na^+Cl^- , é

necessário um cluster que possua, no mínimo, 12 moléculas de água (JUNGWIRTH, 2000).

O processo de solubilização inicia-se com a reorganização das moléculas de água que se encontram mais próximas dos íons. Poderíamos supor que essa reorganização se inicia com uma primeira molécula de água, que se propaga posteriormente para as outras moléculas. Esse processo de reorganização pode ocorrer sequencialmente com as moléculas de água mais próximas do íon. Quando seis destas moléculas de água tenham se reorganizado adequadamente ao redor de cada um dos íons, estes se desprendem completamente do retículo cristalino, sendo engaiolados pelas moléculas de água em solução.

A orientação das moléculas de água ao redor dos íons ocorre de acordo com a carga, positiva ou negativa, através de forças intermoleculares do tipo íon-dipolo. Logo, se o íon em questão for o cloreto, os hidrogênios da água orientam-se em sua direção; se for o sódio, o oxigênio da água é que se aproxima do íon.

Para que o valor de r_0 do retículo não seja alterado—sendo r_0 a distância de núcleo a núcleo entre os íons no retículo—, o processo de solubilização ocorre de forma direcional, ou seja, os íons sódio e cloreto que interagem com as moléculas de água afastam-se do retículo em um ângulo reto (90°), não desestabilizando as camadas subsequentes.

As moléculas de água que ficam entre os íons Na^+ e Cl^- após o engaiolamento, criam uma barreira física e energética de tal modo que impossibilitam a reconstrução do cristal de NaCl que foi solubilizado. Apenas a utilização de técnicas de recristalização permite que as interações $\text{Na}^+ \cdots \text{Cl}^-$ sejam restabelecidas, e que o sal recristalize.

4.13.3 JUSTIFICATIVA DA ESCOLHA DA ÁGUA

A forma como os livros de química de ensino médio e superior retratam a água induz os estudantes a acreditarem que a água existe como uma molécula isolada nas soluções.

Representações comuns em livros de química orgânica, como a da Figura

32, em que apenas uma molécula de água ataca o carbono, ou o hidrogênio, também influenciam o aluno a acreditar que a água pode existir como uma molécula isolada em solução.

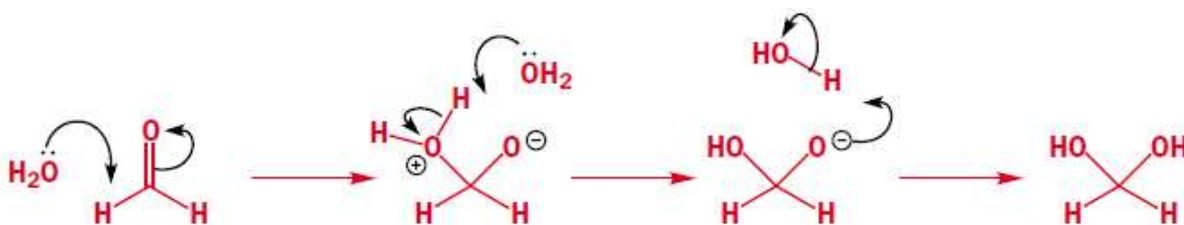


Figura 32. Representação da água como uma molécula isolada em um livro didático de química utilizado no ensino superior. Fonte: CLAYDEN et. al, 2001.

Resultados de pesquisas como os apresentados no item anterior apontam que, como no estado líquido a água existe em redes de clusters, na verdade, a carbonila da Figura 32 é atacada por um conjunto de microclusters de água, assim como o oxigênio da carbonila não se encontra isolado, interagindo com mais outros dois hidrogênios de moléculas de água, através de ligação hidrogênio.

Este entendimento equivocado acerca da água como uma molécula isolada é amplamente ensinado e difundido aos estudantes de química desde o ensino médio, limitando as abordagens dos conteúdos em sala de aula, além de induzir a imaginação dos alunos a recriarem cenários de reações químicas e solubilizações que não condizem com o que realmente acontece em meio aquoso.

Portanto, a água foi escolhida como tema de trabalho com o objetivo principal de propor uma abordagem alternativa para sua organização espacial, deixando de ser ensinada e entendida como uma molécula isolada, não somente em seu estado mais puro, mas também em dissoluções e reações químicas. Ademais, não há vídeos disponíveis na internet que mostrem todo o processo de determinação dos seus OMs, bem como da construção do diagrama dos níveis de energia desses orbitais.

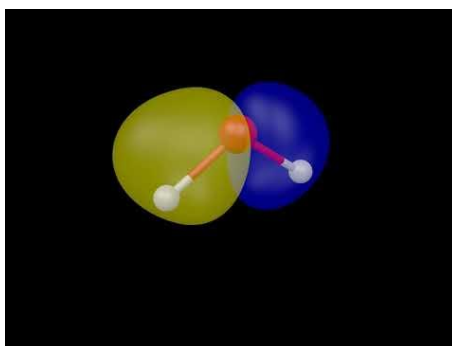
A primeira animação desenvolvida foi “*NaCl dissolution in water: a new approach*”, que explicava tanto a formação dos clusters de água, quanto a dissolução de NaCl. Posteriormente, a sua primeira parte foi removida e

transformada na animação intitulada “*Clustered Water*”.

As animações “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 1*” e “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 2*” surgiram com o objetivo de explicar as interações intermoleculares da água, servindo como material complementar as animações da água clusterizada e dissolução de NaCl em água.

4.13.4 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “MOLECULAR ORBITALS: WATER–H₂O, PART 1”

A animação “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 1*” segue a mesma sequência das demais animações da série dos orbitais moleculares, podendo ser acessada através do Vídeo 16.



Vídeo 16. Animação “*Molecular Orbitals: water – H₂O, part 1*”.
Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=LXJdxyKbY-Q>.

De 8 até 33 segundos. A primeira parte da animação mostra a água em sua geometria angular, conforme apresentado na Figura 8a.

De 00:34 até 01:00 minutos. A orientação dos orbitais atômicos de valência da molécula é apresentada, conforme Figura 12a.

De 01:01 até 03:42 minutos. A próxima etapa mostra as CLAOs que originam os seis orbitais moleculares da água, sendo que apenas os formatos dos três primeiros orbitais moleculares ligantes são mostrados. Para o não-ligante e os dois antiligantes são representadas apenas as CLAOs.

As combinações lineares que originam os OMs da água apresentados na

animação são:

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 &= [2s]O + [1s + 1s]H + [2p_z]O & \sigma_1^* &= [2p_y]O - [1s - 1s]H \\
 \sigma_2 &= [2p_y]O + [1s - 1s]H & \sigma_2^* &= [2s]O - [1s + 1s]H + [2p_z]O \\
 \sigma_3 &= [2s]O + [1s + 1s]H - [2p_z]O \\
 nb &= [2p_x]O
 \end{aligned}$$

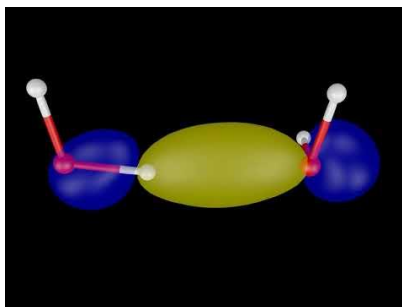
De 03:43 até 04:54 minutos. A última parte da animação mostra a construção do diagrama de níveis de energia dos seis OMs formados.

Assim como a amônia, a água possui um par de elétrons em seu orbital não ligante que ficam disponíveis para interagir, explicando assim o seu comportamento nucleofílico, bem como a presença de orbitais antiligantes não preenchidos permite com que a água também se comporte como um eletrófilo, justificando o seu caráter anfotérico atribuído pela literatura.

Apesar desta animação tratar da água como uma molécula isolada, que parece contraditório com a proposta de água clusterizada discutida até aqui, ela serve de embasamento para que a quebra de conceito aconteça de maneira efetiva, auxiliando no entendimento das animações que seguem: “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 2*”, “*Clustered Water*”, e “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

4.13.5 ETAPAS DAS ANIMAÇÕES “MOLECULAR ORBITALS: WATER – H₂O, PART 2”.

A animação “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 2*” explica a formação da ligação hidrogênio através da teoria do orbital molecular, mostrando a formação dos orbitais através da interação entre os HOMOs e LUMOs de duas moléculas de água, abordados na animação discutida no item anterior. Para assistir à animação, basta clicar no Vídeo 17:



Vídeo 17. Animação “Molecular Orbitals: water – H₂O, part 2”. Fonte: https://www.youtube.com/watch?v=83XwLYLqa_A.

De 08 até 28 segundos. A primeira etapa da animação mostra um prisma formado por seis moléculas de água, e as ligações hidrogênio da estrutura são representadas por pontilhados em azul. O prisma é uma das estruturas utilizadas na animação que explica a formação dos clusters de água, e na animação da dissolução de NaCl em água.

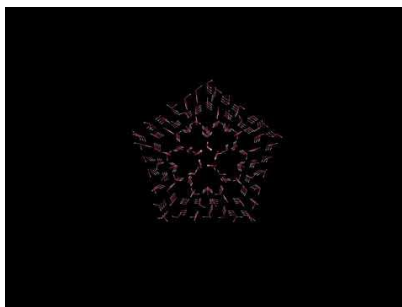
De 00:30 até 01:50 minutos. A segunda etapa mostra a formação dos orbitais moleculares responsáveis pela ligação hidrogênio, que se formam a partir da interação entre o HOMO da molécula A com o LUMO da molécula B, e vice-versa, formando-se quatro orbitais moleculares: dois sigma ligantes, σ_1 e σ_2 , e dois sigma antiligantes, σ_1^* e σ_2^* .

Os quatro elétrons disponíveis, provenientes dos HOMOs das duas moléculas, ocupam os dois orbitais moleculares sigma ligantes formados, explicando assim a estabilidade da água e das ligações hidrogênio.

A interação mostrada na animação não se aplica apenas as duas moléculas de água isoladas. Ela ocorre entre todas as moléculas de água, como explicado a seguir.

4.13.6 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “*CLUSTERED WATER*”

A animação discutida neste item pode ser assistida através do Vídeo 18:



Vídeo 18. Animação “Clustered Water”. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=sCvhsodRBNg>.

De 00:08, até 01:23 minutos. A animação inicia-se mostrando a estrutura dos três microclusters utilizados, sendo eles o prisma, a caixa hexamérica e a caixa pentagonal.

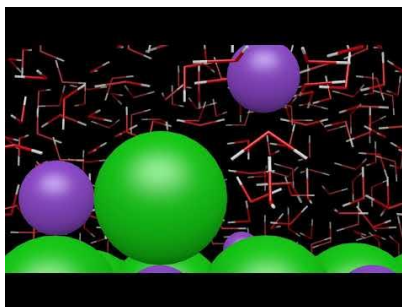
De 01:25 até 03:33 minutos. Em seguida, a animação mostra uma estrutura de rede da água, através da interação de clusters formados a partir da conexão sucessiva dos três miniclusters escolhidos, formando-se arranjos geométricos e também os espaçamentos, chamados de gaiolas.

As moléculas de água conectam-se em rede através das ligações hidrogênio, que já foram explicadas pelos argumentos da TOM no item 4.13.2. Portanto, pode-se concluir que também são formadas redes de orbitais moleculares, que se espalham por todas as moléculas, mantendo-as unidas.

Após a formação dos clusters, a câmera da animação mergulha no cluster formado para mostrar como as moléculas de água se organizam no seu interior.

4.13.7 ETAPAS DA ANIMAÇÃO “NaCl DISSOLUTION IN WATER: A NEW APPROACH”

A animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” é apresentada no Vídeo 19:



Vídeo 19. Animação “NaCl dissolution in Water: a new approach”. Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=P1VLMAUmiY0&t=4s>.

De 08 até 45 segundos. A primeira parte da animação inicia-se mostrando as duas primeiras camadas de um cristal de NaCl, sendo enfatizadas as irregularidades presentes na superfície, que é por onde a solubilização se inicia.

De 00:47 até 02:16 minutos. A seguir, mostra-se em detalhes a aproximação dos hexâmeros de água à primeira camada de íons do retículo de NaCl, marcando o início do processo de dissolução.

Na animação, o primeiro íon a ser dissolvido é o sódio. Percebe-se que as moléculas de água que a ele se aproximam têm o oxigênio orientado em direção ao íon, já que o sódio possui carga positiva. A orientação oposta acontece quando o íon cloreto é dissolvido. As moléculas de água interagem com os íons sódio e cloreto através de forças íon-dipolo.

Para ambos os íons, a dissolução acontece em um ângulo reto, para evitar que o parâmetro r_0 do retículo cristalino seja alterado, e assim, íon por íon seja retirado sem alterar o restante do retículo.

Deve-se salientar que a animação mostra o mecanismo de dissolução pausadamente, devido ao seu caráter didático. No mundo real, a velocidade em que o processo de dissolução ocorre é muito maior, além de vários íons serem solubilizados ao mesmo tempo.

O número mínimo de doze moléculas requeridas para solubilizar um par iônico $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$, também é respeitado na animação.

De 02:17 até 03:08 minutos. A animação é finalizada mostrando-se os íons Na^+ e Cl^- engaiolados, dispersos na rede de clusters de água.

Para esta animação, vale ressaltar que quando se mostra “uma” molécula de água se aproximando de um íon do retículo e mudando sua orientação, estamos querendo dizer que, na verdade, é um conjunto de moléculas de água que se reorganizam. Entretanto, infelizmente, por problemas associados à parte computacional, não fomos capazes de mostrar um conjunto de moléculas de água se reorganizando e por isso mostramos apenas uma.

4.13.8 SUGESTÕES DE UTILIZAÇÃO DAS ANIMAÇÕES DA ÁGUA

As animações que trazem a água como tema principal foram elaboradas visando a construção de uma linha de raciocínio, começando com conceitos mais básicos, como a explicação de uma molécula de água através da TOM, passando para a ligação hidrogênio, também explicada pela óptica dos orbitais moleculares, formação da água clusterizada e, finalmente, a dissolução de NaCl em água pela abordagem da água clusterizada.

Portanto, a primeira sugestão aos docentes é que apresentem e expliquem as animações na ordem proposta: “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 1*” → “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 2*” → “*Clustered Water*” → “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

As animações “*Molecular Orbitals: Water – H₂O, part 2*” e “*Clustered Water*” podem ser utilizadas para explicar a tensão superficial elevada da água pela óptica dos OMs, já que há OMs ligantes preenchidos que se espalham por todas as moléculas da rede de água.

O professor também pode partir de uma situação problema em que seja possível utilizar as animações da água para auxiliar na explicação. Por exemplo, os medicamentos homeopáticos. A seguinte pergunta pode ser feita aos alunos: “como explicar os resultados positivos e curas de pacientes que tratam as mais diversas enfermidades com medicamentos homeopáticos?”

A explicação pode ser fundamentada no fato de que apesar da concentração do princípio ativo no medicamento homeopático ser praticamente irrisória, a água utilizada nos processos de diluição do medicamento orientou-se de maneira única por ter entrado em contato com o princípio ativo, e é essa

estruturação única da água, representada nas animações “*Clustered Water*” e “*NaCl dissolution in water: a new approach*” a grande responsável pelo efeito comprovado da homeopatia.

Conforme já salientado anteriormente, a animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” pode passar a falsa impressão de moléculas de água isoladas, que se orientam uma a uma ao redor dos íons para solubiliza-los. Portanto, o professor deve salientar aos alunos que na verdade, o processo mostrado separadamente na animação para o sódio e cloreto, é dinâmico, no qual um conjunto de moléculas de água se orienta ao redor de diversos íons, alterando seu arranjo espacial e propagando a nova estrutura para as demais moléculas de água do meio.

4.14 RESULTADOS DA AVALIAÇÃO DA EFICÁCIA DA ANIMAÇÃO “NaCl DISSOLUTION IN WATER: A NEW APPROACH”

O resultado da avaliação foi atribuído com base na comparação entre as respostas dadas pelo mesmo aluno, em cada questão, nas duas vezes em que os formulários foram aplicados. As questões utilizadas nos formulários, bem como as respostas esperadas encontram-se na Quadro 3. O formulário de avaliação utilizado para turma de QG111 continha as questões 2, 3, 4 e 5. O formulário aplicado antes da animação para a turma de QG191 continha as questões de 2 – 7, e o formulário posterior a animação, as questões de 1 – 5.

O objetivo principal das avaliações das respostas era analisar o quanto efetiva e impactante a animação foi no processo de aprendizado dos alunos, justificando todo o esforço empregado para produzi-la. Além do mais, objetivou-se identificar, caso houvessem, possíveis pontos da animação que pudessem confundir os alunos, entendendo o agente causador, para que fosse evitado em animações futuras. As análises de conteúdo das respostas encontram-se a seguir.

Quadro 3. Perguntas e respostas esperadas depois da aula do questionário aplicado para avaliação da animação “NaCl dissolution in water: a new approach”.

1) Descreva o que a animação está mostrando.

Resposta Esperada:

O aluno deveria responder que a animação mostra o processo de dissolução de NaCl em água através do conceito de água clusterizada.

2) Descreva, sucintamente, passo-a-passo, como você imagina que ocorra a dissolução de uma amostra de NaCl_(s) em água, a partir do momento em que essas espécies entram em contato

Resposta Esperada:

O objetivo desta questão é avaliar se o aluno entendeu, minimamente, o conceito de dissolução de uma amostra de NaCl, e que a água estrutura-se em clusters/rede, e não através de moléculas isoladas. Espera-se que o aluno aborde em sua resposta pelo menos três dos cinco pontos a seguir:

- interação íon-dipolo entre os íons do sal e da água;
- orientação das moléculas de água que estão organizadas, com relação a carga do íon da superfície do cristal do sal;
- engaiolamento dos íons do sal pelas cavidades existentes na água;
- são necessárias pelo menos seis moléculas de água para diluir cada íon Na⁺ Cl⁻;
- processo de solubilização é direcional, indo da superfície para o interior do cristal, começando preferencialmente pelas regiões de irregularidades na superfície.

3) Como você *imagina* a água antes e depois da dissolução do sal? Faça desenhos (antes e depois) para ilustrar sua resposta.

Resposta Esperada:

Espera-se que os alunos, após assistirem à animação, deixem de pensar na água como uma molécula isolada. Portanto, os desenhos pós-animação devem conter elementos que indiquem este entendimento por parte dos alunos.

4) A energia reticular é o parâmetro termodinâmico que justifica a existência e a estabilidade do sal e seu retículo cristalino. Este parâmetro é muito sensível à separação entre os íons (r_0) e talvez isso explique a dureza e a fragilidade dos sais, bem como por que a dissolução do sal ocorre “da superfície para o interior” do retículo cristalino.

Se o retículo cristalino oferece resistência à alteração no valor de r_0 , como você *imagina* que a dissolução ocorra pelo simples contato com a água.

Resposta Esperada:

O aluno deveria explicar minimamente que, para que o r_0 do retículo não seja alterado, o processo de solubilização deve ocorrer direcionalmente, da superfície para o interior do retículo, provocando pequenos deslocamentos nas interações Na-Cl, o que não aumenta a energia de repulsão no cristal.

5) Sabe-se que o sal, depois de dissolvido em água, não cristaliza novamente. Como você **imagina** que a água impede que o sal cristalize novamente depois de dissolvido? Faça desenhos para ilustrar sua maneira de pensar.

Resposta Esperada:

Os desenhos aqui esperados deveriam representar, de alguma forma, a barreira física e energética representada pela água, que impede a aproximação dos íons.

6) Que tipo de interação ocorre entre a água e o íons do NaCl?

Resposta Esperada:

Ocorre a interação intermolecular do tipo íon-dipolo.

7) As interações que ocorrem entre água e NaCl são fortes ou fracas? Justifique sua resposta.

Resposta Esperada:

O aluno poderia basear sua justificativa na resposta da pergunta 4, já que as interações do tipo íon-dipolo são as mais fortes que podem ocorrer entre duas espécies.

Além das análises, as respostas foram classificadas de acordo com os parâmetros: Insatisfatório, Regular, Satisfatório e Muito Satisfatório, explicados em maior detalhe no Quadro 4. A classificação das respostas foi realizada para que se pudesse contabilizar, em porcentagem, o impacto da animação no aprendizado dos alunos.

Quadro 4. Parâmetros de classificação das respostas dos alunos das turmas de QG191 e QG111 as perguntas dos questionários de avaliação da eficácia da animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*”.

Classificação
Insatisfatório (I): O aluno não absorveu o conteúdo ministrado na aula/animação, apresentando alto nível de dificuldade ao responder o questionário, ou não respondeu as perguntas.
Regular (R): O aluno absorveu parte do conteúdo ministrado na aula/animação, apresentando dificuldade ao responder o questionário, ou o aluno deu a resposta certa, porém não conseguiu justificá-la corretamente, não utilizando em sua resposta nenhum dos conceitos apresentados na animação.
Satisfatório (S): O aluno absorveu o conteúdo ministrado na aula/animação, respondendo o questionário sem apresentar muitas dificuldades e/ou erros significativos, utilizando em sua resposta parte dos conceitos apresentados na animação.
Muito Satisfatório (MS): O aluno absorveu o conteúdo ministrado na aula/animação, e respondeu ao questionário apresentando poucas ou nenhuma dificuldade e/ou erros significativos de aprendizagem do conteúdo abordado.

Após as classificações, os resultados para as duas turmas foram contabilizados e representados nos gráficos das Figuras 33 e 34.

Foram avaliados um total de 76 questionários da turma de QG111, sendo 38 antes e 38 após a aplicação da animação, e 182 questionários da turma de QG191, sendo 91 antes, e 91 após a aplicação da animação.

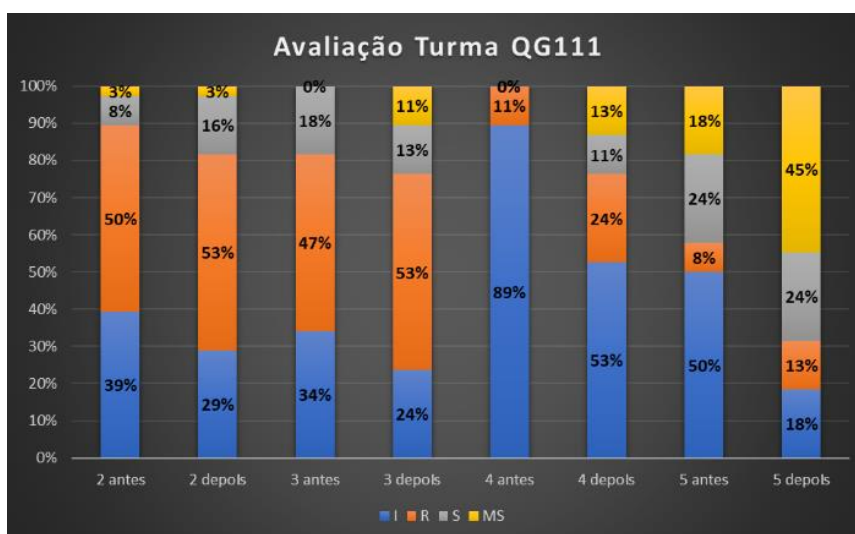


Figura 33. Resultado da avaliação da eficácia da animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” para turma QG111.

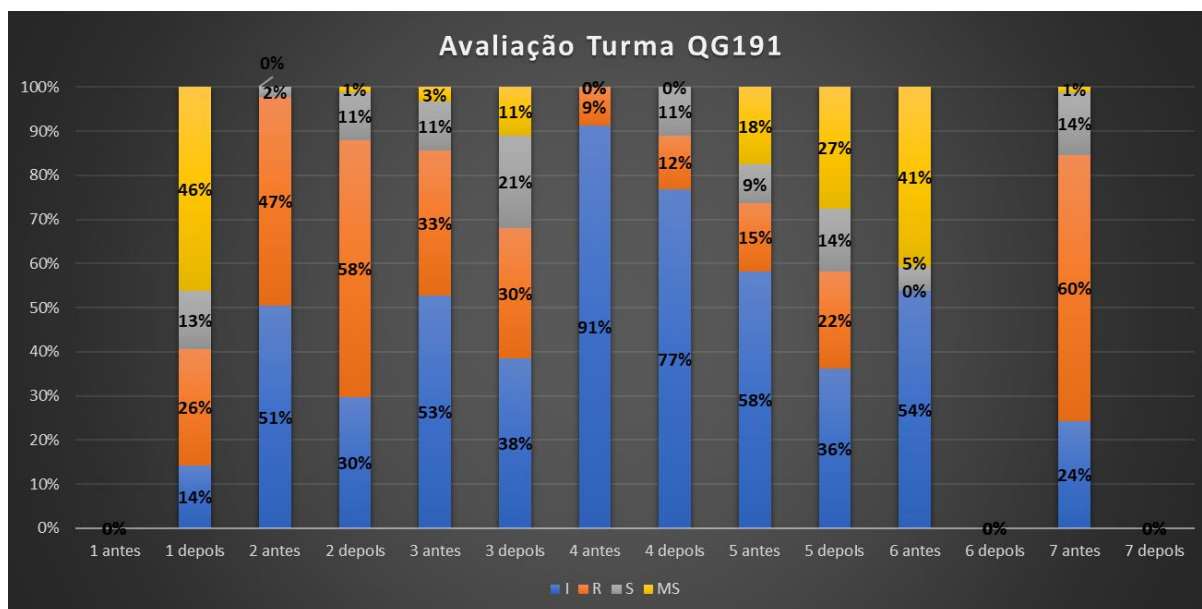


Figura 34. Resultado da avaliação da eficácia da animação “*NaCl dissolution in water: a new approach*” para turma QG191.

Antes de iniciar a análise propriamente dita da avaliação da eficácia, é necessário ressaltar que como os questionários da turma de QG191 foram aplicados eletronicamente, através do *Google Class Room*, foram recebidos e avaliados poucos desenhos para as respostas das perguntas três e quatro.

Comparando-se os gráficos das Figuras 33 e 34, percebe-se que houve uma diferença entre as respostas dos alunos das duas turmas, conforme já era esperado. Tais diferenças podem ser atribuídas ao fato da animação não ter sido trabalhada em sala de aula na turma de QG191, etapa que é de extrema importância quando da utilização de animações 3D como ferramentas didáticas. Outros fatores que podem ser responsáveis pelas diferenças observadas são tais como o nível socioeconômico dos alunos de cada turma, acesso à uma educação de boa qualidade desde o ensino básico até o médio, além da acessibilidade a instrumentos e atividades que contribuíram para o desenvolvimento das habilidades visuoespaciais dos alunos, que são essenciais quando recursos visuais como animações 3D são utilizadas em sala de aula.

Os dados socioeconômicos dos alunos ingressantes no vestibular 2017 da Unicamp nos cursos de engenharia mecânica e elétrica integral foram analisados

e comparados a dados de ingressantes em 2011 e 2012 do ProFIS. Não foram encontradas pesquisas mais recentes acerca do ProFIS, porém não existe uma tendência de grandes mudanças no perfil dos ingressantes de cada curso/ programa oferecidos pela Unicamp. Foram considerados dados apenas de estudantes das engenharias que residem na cidade de Campinas.

A análise de dados realizada indicou que cerca de 71% dos alunos ingressantes em 2011 e 2012 pelo ProFIS vieram de famílias cuja renda mensal era de até 5 salários mínimos, contra uma média de 35% dos alunos da engenharia elétrica e mecânica integrais, ingressantes no vestibular de 2017 e que moram na cidade de Campinas. (COMVEST, 2018, GOMES, 2012).

Uma média de 33,4% dos alunos da engenharia mecânica e elétrica do curso integral vieram de famílias com renda superior a 10 salários mínimos. Cerca de 59,4% dos alunos ingressantes nestes cursos fizeram todo o ensino médio em escolas particulares.

Em contrapartida, 100% dos alunos ingressantes no ProFIS vieram de escolas públicas da cidade de Campinas. Apesar do programa selecionar apenas o/a melhor aluno/a de cada escola pública com base na nota do ENEM, é evidente que a infraestrutura da maioria das escolas públicas é inferior à de escolas particulares. Portanto, o acesso a TICs de finalidades pedagógicas é desproporcional entre as duas turmas avaliadas, e inferior para os alunos ingressantes no ProFIS, provocando uma heterogeneidade de conhecimento entre as turmas de QG111 e QG191, que se reflete nas disparidades entre os resultados da avaliação da eficácia obtidos para as duas turmas.

O primeiro contraste observado nas respostas é em relação a proporção de alunos que obtiveram respostas classificadas como insatisfatórias, I, antes da apresentação da animação, considerando-se as questões de 2 a 5, que eram comuns nos questionários aplicados nas duas turmas. Para turma de QG111, 53% das respostas foram insatisfatórias, contra 63,25% das respostas da turma de QG191. Para responder as perguntas antes da explicação das novas propostas da animação, os alunos precisaram se basear quase que exclusivamente em seus conhecimentos de interações químicas adquiridos no ensino médio.

O fato de quase 70% dos alunos de QG111 terem cursado todo o ensino médio em escolas particulares, comparado a 100% dos alunos do ProFIS que vieram de escolas públicas, pode ajudar a entender a diferença de 10,25 pontos percentuais observada entre as duas turmas. As questões são as mais diversas, dada a ampla precariedade do sistema de ensino público brasileiro. Essa defasagem do ensino público é carregada pelos alunos para o ensino superior, refletindo-se nos resultados de avaliações de conteúdo como esta.

Outra evidência de tamanha defasagem aparece ao considerarmos os resultados das questões 6 e 7, presentes no questionário pré-animação da turma do ProFIS. As respostas esperadas para essas questões eram simples e poderiam ser tranquilamente respondidas caso o aluno houvesse aprendido interações intermoleculares nas aulas de química do ensino. Porém, o que se observa é uma grande dificuldade para responder principalmente à questão 6, com 54% das respostas classificadas como insuficientes. Para a questão 7, 24% das respostas foram insuficientes, e 60% regulares, R.

Agora, um ponto de similaridade entre as duas turmas foram as respostas para as questões 4 e 5. Os dados das Figuras 33 e 34 nos revelam que a questão 4 foi a mais difícil para ser respondida, antes e após a animação. Para a turma de QG111, 89% das respostas anteriores e 53% das respostas após a aplicação da animação foram classificadas como insuficientes, I, e para a turma de QG191, 91% das respostas pré, e 77% das respostas pós animação foram classificadas como insuficientes. Ao contrário da questão 4, a questão 5 foi a que os alunos tiveram mais facilidade para responder, obtendo a maior quantidade de respostas classificadas como muito satisfatórias, MS, tanto antes, 18%, quanto após, 45%, a aplicação da animação, para a turma de QG111. Para a turma de QG191 de alunos do ProFIS, 18%, das respostas também foram classificadas como MS antes da animação, e após, 27%.

Os dados acima apresentados, principalmente acerca da questão 5 são interessantes pois revelam, mais uma vez, a importância de se ter acesso a boas escolas de ensino médio, além do impacto positivo da utilização de animações 3D como ferramentas didáticas.

Apesar de ambas as turmas terem apresentado quantidades muito

próximas de respostas insuficientes para a questão 4 antes da apresentação da animação, percebe-se que a animação foi mais efetiva para os futuros engenheiros, do que para a turma do ProFIS. A diminuição de 36 pontos percentuais na quantidade de respostas insuficientes para a turma de QG111 indica que a animação foi útil para ajudar os alunos a entenderem com mais clareza o processo de dissolução do NaCl em água. Porém, para a turma de QG191, houve uma queda de apenas 14 pontos percentuais, indicando que a animação não foi tão efetiva para esses alunos quanto foi para a outra turma. O mesmo padrão é observado nas respostas da questão 5. Para a turma de QG111, houve um ganho para as respostas classificadas como MS de 27 pontos percentuais, contra 9 pontos para as respostas da turma de QG191.

Para responder a questão 4, os alunos precisavam se basear apenas no conteúdo apresentado na animação e discutido em sala de aula. Portanto, não se esperava um grande número de repostas satisfatórias, S, ou MS no questionário anterior a animação. Porém, a diferença observada no ganho das respostas principalmente para a turma de QG111, revela uma possível relação com o nível socioeconômico dos alunos. O fato de que quase 70% frequentou o ensino médio exclusivamente em escolas particulares, o acesso as TIC, principalmente nas escolas, foi muito mais garantido do que para os alunos do ProFIS. A mesma relação pode ser empregada para tentarmos compreender as diferenças observadas nas respostas da questão 5, que requeria que os alunos desenhasssem para exemplificar o seu entendimento da estrutura da água após a dissolução. Provavelmente os alunos da turma de QG111 apresentam habilidades visuoespaciais mais desenvolvidas que os alunos da turma de QG191, justificando a diferença no ganho das respostas da questão 5, de 17 pontos percentuais para a turma de QG111, contra apenas 9 pontos para a turma de QG191.

Porém, apesar de todas as diferenças socioeconômicas existentes entre as duas turmas avaliadas e do acesso à níveis diferenciados de escolas de ensino médio, é possível observar um ganho no aprendizado dos alunos, por menor que tenha sido.

Ao passo que, anteriormente a apresentação da animação, a turma de QG111 obteve 53% das respostas das questões de 2 a 5 classificadas como

insuficientes, e a turma de QG191, 63,25%, após a apresentação e discussão da animação, a porcentagem caiu para 31% para a turma de QG111—22 pontos percentuais, e 45,25% para a turma de QG191—18 pontos percentuais.

Os alunos que já veem com uma carga prévia de conhecimento do ensino médio já estruturadas, e com habilidades espaciais desenvolvidas, conseguem compreender com relativa facilidade os conteúdos apresentados nas animações, ao passo que os alunos que entram na universidade com defasagem de conteúdo, conseguem, através da animação 3D, compreender fenômenos químicos complexos através do acesso de ferramentas que os apresentam novas perspectivas de conhecimento e aprendizagem.

De modo geral, o uso da animação teve um impacto positivo, e de certa forma homogêneo para ambas as turmas. Assim, as animações podem atuar como uma ótima ferramenta para ajudar na adequação do ensino a era da tecnologia, auxiliando na padronização dos diferentes níveis de conhecimento de alunos ingressantes na universidade.

Entretanto, para além de seus potenciais, a viabilização do uso das animações 3D apenas é possível quando há previamente um planejamento e treinamento adequados dos docentes, tanto com relação ao uso propriamente dito das animações, quanto a utilização das TICs através das quais as animações são acessadas.

Portanto, apesar do uso das animações não ser sempre possível devido a infraestrutura das escolas e universidades e também a ausência de programas de treinamento para que os docentes possam se adequar as novas tecnologias de ensino, as animações 3D mostram-se como uma estratégia interessante de adequação e renovação das metodologias de ensino.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Independentemente de todas as dificuldades técnicas enfrentadas principalmente para a produção das animações da água, conseguimos produzir e publicar na internet dez animações que apresentam novos olhares para assuntos da química que há décadas, são retratados em livros didáticos e ensinados em sala de aula da mesma forma.

Apesar do pouco tempo que as animações foram disponibilizadas no canal Lili Tosta do *youtube*, e no site *quimica3d.com*, já temos cerca de 220 acessos do Brasil e da Rússia, mostrando que, por mais diferentes que sejam os assuntos abordados, em relação ao química 3D, elas continuam despertando atenção dos usuários e servindo como recurso didático.

As animações deste projeto têm o objetivo não de revolucionar, mas sim de mostrar a necessidade da adequação de metodologias visando a era tecnológica que vivenciamos hoje em dia em praticamente todas as áreas de nossas vidas.

Considerando que os alunos que hoje estão entrando na graduação de química têm contato com equipamentos eletrônicos e tecnológicos já desde muito pequenos, uma necessidade quase que urgente de introdução de recursos como animações 3D nas salas de aula é sinalizada.

Provavelmente, até a duração das aulas necessite ser diminuída, pois devido ao advento da tecnologia nas últimas décadas, e a facilidade de comunicação do mundo moderno, os alunos já não conseguem mais prestar atenção no professor por 40, 50, 60 minutos seguidos de aula. A ansiedade que atribuímos ao uso do celular, apelidado por muitos como “uma extensão do corpo humano”, leva os alunos a utilizarem o aparelho inclusive dentro das salas de aula, para responder mensagens ou até mesmo checar as redes sociais visando abstraírem-se um pouco do conteúdo que está sendo passado pelo professor de maneira inadequada, através de lousa, giz, e apresentações e figuras estáticas em power point.

Talvez tenha chegado o momento em que, ao invés do professor pedir para os alunos desligarem seus celulares durante as aulas, que eles acessem o aplicativo X, ou a animação Y que contém o conteúdo a ser ministrado de forma

interativa.

Porém, até mesmo para utilização de animações 3D em salas de aula, que aparentemente não se tratam de recursos tão complicados, é necessário que o professor informe-se e aprenda a trabalhar com o recurso antes de apresentá-lo aos alunos. Portanto, para que a inclusão de novos aplicativos e aparelhos eletrônicos nas salas de aula seja feita de modo efetivo, é necessária uma imersão dos professores no mundo das tecnologias pedagógicas para que possam dar o respaldo necessário aos alunos.

A avaliação realizada neste trabalho evidenciou uma outra questão, que também é antiga e necessita de atenção urgente, que é a defasagem no ensino em escolas públicas, principalmente de ensino médio. Enquanto as particulares adaptam-se cada vez mais a onda de tecnologia do mundo moderno, as públicas vão ficando cada vez mais sucateadas, indo na contramão do movimento tecnológico e impactando negativamente no aprendizado dos alunos. Não basta o aluno ter acesso a internet e computador apenas em sua casa. Estes acesso, hoje em dia, também necessita ser garantido nas escolas, para que os alunos desenvolvam ainda mais suas habilidades visoespaciais, conseguindo interpretar com mais assertividade desde figuras, até moléculas químicas e fenômenos representados em animações 3D.

Levantar os problemas relacionados a adequação dos espaços de ensino a era da tecnologia não é uma tarefa difícil, já que todos nós passamos boa parte da nossa vida nas escolas e universidades, e por sermos parte desta revolução tecnológica, estamos todos incluídos nessa problemática. A lacuna que ainda prevalece é o como solucionar estes problemas de acessibilidade a tecnologia, desenvolvimento de conteúdos didáticos interativos como os aplicativos para celulares, e de ambientalização dos professores as novas tecnologias. A elaboração e implementação de tais recursos não é simples, muito menos gratuita, requerendo investimentos tanto da iniciativa privada, quanto da máquina pública.

Apesar das animações 3D não serem recursos interativos, elas podem ser vistas como uma proposta inicial de inovação e adequação do ensino em todos níveis, complementando os materiais didáticos padrões como livros didáticos e anotações feitas em sala de aula.

Como planejamento futuro, aprecia-se a possibilidade de publicar os conteúdos aqui apresentados em páginas da wikipedia e em periódicos nacionais e/ou internacionais relacionados ao ensino de química, visando a ampliação da divulgação e do acesso as animações produzidas. Além do mais, as publicações tornam-se atrativas pois tanto para a wikipedia, quanto para os periódicos, faz-se necessária a elaboração de textos que instruem os professores e/ou usuários acerca da melhor forma de se utilizar as animações, servindo como uma complementação e as animações.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AL-BALUSHI, S. M.; AL-MUSAWI, A.S.; AMBUSAIDI, A. K.; AL-HAJIRI, F. H. “*The Effectiveness of Interacting with Scientific Animations in Chemistry Using Mobile Devices on Grade 12 Students’ Spatial Ability and Scientific Reasoning Skills*”, Journal of Science Education Technology, 26, p. 70-81, 2017.
- ANIMAÇÃO. Dicionário online Michaelis. Disponível em: <<https://michaelis.uol.com.br/>>. Acesso em novembro de 2018.
- ATKINS, P.; Jones, L. Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio ambiente. 3ª edição. Rio de Janeiro: Bookman, 2006, p 197 – 206.
- BERNEY, S.; BÉTRANCOURT, M. “Does animation enhance learning? A meta-analysis.”, Elsevier, 101, 150-167, 2016.
- BOTTEGHI, C.; MARCHETTI, M.; PONTE, D. G. “Contribuições Recentes da Reação de Hidroformilação na Síntese de Produtos Farmacêuticos. Parte II”, Química Nova, 20(1), 30-48, 1997.
- BLENDER. definição do software Blender®. Disponível em: <<https://www.Blender®.org/>>. Acesso em novembro de 2018.
- CAMERAS. Tipos de câmeras disponíveis no Blender. Disponível em: <<https://docs.blender.org/manual/en/dev/render/cycles/camera.html?highlights=orthographic>>. Acesso em novembro de 2018.
- CHAPLIN, MF. “A proposal for the structuring of water”, Elsevier, 83, 211-221, 1999.
- CIENLAB. Valor do kit molecular. Disponível em: <<https://www.cienlab.com.br/kit-molecular/>>. Acesso em novembro de 2018.
- CLAYDEN, J.; GREEVS, N.; WARREN, S.; WOTHERS, P. Organic Chemistry. 2nd Edition. United Kingdom: Oxford University Press, 2001.
- _____. Methane. In: CLAYDEN, J.; GREEVS, N.; WARREN, S.; WOTHERS, P. Organic Chemistry. 2nd Edition. United Kingdom: Oxford University Press, 2001. Cap. 2 e 3, p. 31 e 48.
- _____. Hybridization. In: CLAYDEN, J.; GREEVS, N.; WARREN, S.; WOTHERS, P. Organic Chemistry. 2nd Edition. United Kingdom: Oxford University Press, 2001. Cap. 4, p. 105-108.
- _____. Methyl lithium. In: CLAYDEN, J.; GREEVS, N.; WARREN, S.;

- WOTHERS, P. Organic Chemistry. 2nd Edition. United Kingdom: Oxford University Press, 2001. Cap. 6 e 9, p. 142 e 212.
- COMVEST. Dados Socioeconômicos de ingressantes nos cursos de engenharia mecânica e elétrica no vestibular 2017 - <<http://www.comvest.unicamp.br/estatisticas/2017/quest/quest1.php>>. Acesso em novembro de 2018.
- DA SILVA, D. V.; JOLY, M. C. R. A.; PRIETO, G. "Relação entre Habilidades Espaciais e Desempenho no Ensino Médio". Polis e Psique, v. 1, n. 1, 61-79, 2011.
- DAVIS, B.; SUMMERS, M. "Applying Dale's Cone of Experience to Increase Learning and Retention: A Study of Student Learning in Foundational Leadership Course". QScienceProceedings, p. 1-7, 2015.
- DIBORANO. Orbitais adaptados por simetria. Disponível em: <http://www.huntresearchgroup.org.uk/teaching/teaching_MOs_year2/L4_Slides_web_viewing.pdf>. Acesso em agosto de 2018.
- FREY, C. A.; MIKASEN, M. L.; GRIEP, M. A. "Put Some Movie Wow! in Your Chemistry Teaching", Journal of Chemical Education, 89 (7), 1138-1143, 2012.
- GOBERT, D. J. Leveraging Technology and Cognitive Theory on Visualization to Promote Student's Science. In: GILBERT, J.K. Visualization in Science Education. Holanda: Springer, cap.5, p.76, 2005.
- GOMES, F. M. ProFIS: Um Retrato do Primeiro Ano do Programa de Formação Geral da Unicamp. Editora Unicamp, 2012. Disponível em <https://www.ime.unicamp.br/~chico/brochura_profis_compacta.pdf>. Acesso em novembro de 2018.
- GREENWOOD, N. N.; EARNSHAW, A. Chemistry of the Elements. 2nd edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998.
- _____. Methyllithium. In: GREENWOOD, N. N.; EARNSHAW, A. Chemistry of the Elements. 2nd edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998. Cap. 4, p. 103–104.
- HARLE, Marissa; TOWNS, Marcy. "A Review of Spatial Ability Literature, Its Connection to Chemistry, and Implication for Instruction", Journal of

- Chemical Education, 88(3), 351-360, 2011.
- HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. *Inorganic Chemistry*. 4th edition. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2012.
- _____. Group Theory: ammonia. In: HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. *Inorganic Chemistry*. 4th edition. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2012. Cap. 5, p. 152 - 154.
- _____. Group Theory: methane. In: HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. *Inorganic Chemistry*. 4th edition. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2012. Cap. 5, p. 155.
- _____. Methyllithium. In: HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. *Inorganic Chemistry*. 4th edition. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2012. Cap. 23, p 849 – 850.
- _____. Organometallic reactions. In: HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. *Inorganic Chemistry*. 4th edition. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2012. Cap. 24, p. 909 – 912.
- _____. Hydroformylation (Oxo-Process). In: HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. *Inorganic Chemistry*. 4th edition. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2012. Cap. 25, p. 953 – 955.
- HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L. *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*. 4th edition. New York: HarperCollins College Publishers, 1993.
- _____. Boron Cage Compounds. In: HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L. *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*. 4th edition. New York: HarperCollins College Publishers, 1993. Cap. 16, p. 789–792.
- JMOL. Cores utilizadas nas animações. Disponível em: <http://jmol.sourceforge.net/jscolors/>. Acesso em setembro de 2018.
- JUNGWIRTH, Pavel. “How Many Waters Are Necessary To Dissolve a Rock Salt Molecule?”, *J. Phys. Chem.*, 104, 145-148, 2000.
- KORAKAKIS, G.; BOUDOUVIS, A.; PALLYVOS, J.; PAVLATOU, E. A. “The impact of 3D visualization types in instructional multimedia applications for teaching science”. *Procedia - Social and Behavioral Sciences*, 31, 145-149, 2012.

KUMAR, B. Senthil. "3D Animation as an Effective Learning Tool". International Research Journal of Engineering and Technology (IRJET), v. 31, n. 11, 392-394, 2016.

LORENZEN, L. H. Process for Preparing Clustered Water. Estados Unidos da America. n. 5711950. 27 de janeiro de 1998.

LORENZEN, L. H. Microclustered Water. Estados Unidos da America. n. 6033678. 7 de março de 2000.

MAYA – valor da assinatura mensal. Disponível em: <https://www.autodesk.com.br/products/maya/subscribe?plc=MAYA&term=1-YEAR&support=ADVANCED&quantity=1>>. Acesso em novembro de 2018.

MESSLER, A. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A. Inorganic Chemistry. 5th edition. New Jersey: Pearson Education, 2014.

_____. Molecular Orbitals. In: MIESSLER, A. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A. Inorganic Chemistry. 5th edition. New Jersey: Pearson Education, 2014. Cap. 5, p 266– 268.

_____. Diborane. In: MIESSLER, A. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A. Inorganic Chemistry. 5th edition. New Jersey: Pearson Education, 2014. Cap 8, p. 266– 268.

MOREIRA, Baptista M., "*Development and utilization of 3D animations in Chemistry teaching*". 2013. 141f. Tese (Doutorado em Ensino de Química). Instituto de Química. Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2013.

OLIVEIRA, Cláudio de; MOURA, Samuel Pedrosa. TIC'S na Educação: A Utilização das Tecnologias da Informação e Comunicação na Aprendizagem do Aluno. Pedagogia em Ação, v. 7, n. 1, 75-95, 2015.

OREGON STATE UNIVERSITY. Orbitais Moleculares do Metano. Disponível em: <http://www.science.oregonstate.edu/~gablek/CH334/Chapter1/methane MOs.htm>>. Acesso em novembro de 2016.

PANG, X.; DENG, B. Investigation of Changes in Properties of Water Under the Action of a Magnetic Field. Science in China Press, v. 51, n. 11, 1621-1632, 2008.

ProFIS. Definição do programa. Disponível em:

<<https://profis.prg.unicamp.br/index.php/o-curso>>. Acesso em novembro de 2018.

QUÍMICA 3D – Animação 007: Interação entre o HOMO e LUMO do Etileno e os orbitais-d do Tetracloreto de Platina. Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em março de 2018.

_____. Animação 008: Interação entre o HOMO e LUMO do Hidrogênio (H_2) e os orbitais-d da Platina. Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em março de 2018.

_____. Animação 010: Ligação Covalente explicada pela Teoria do Orbital Molecular para o CO. Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em fevereiro de 2017.

_____. Animação 020: Teoria do Orbital Atômico. Disponível em <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em 14 de fevereiro de 2017.

_____. Animação 024: Cella unitária da Halita (NaCl). Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em setembro de 2016.

_____. Animação 025: Estrutura do cristal da Halita (NaCl). Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em setembro de 2016.

_____. Animação 064: Polimerização. Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em março de 2018.

_____. Animação 065: Reação de inversão com Monóxido de Carbono. Disponível em: <<http://www.quimica3d.com/br/acesso.php>>. Acesso em março de 2018.

SANTOS FILHO *et al.* “A Periodicidade e a Ligação Química nos Compostos de Boro Abordadas em Nível de Pós-graduação”, Revista Brasileira de

Ensino de Química, 2009, 4 (2), 43-62.

SHAIK, S.; HIBERTY, P. C. *A Chemist's Guide to Valence Bond Theory*. New Jersey: John Wiley & Sons, 2008. Cap. 1, p. 1.

SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010.

_____. Valence Bond Theory. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010, Cap. 2, p 39 - 41.

_____. Molecular Orbitals Theory. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010. Cap. 2, p 42 – 45.

_____. Electron Deficiency. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010. Cap. 2, p 56.

_____. Bronsted base, ammonia. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010. Cap. 2, p 112.

_____. Symmetry-adapted linear combinations, ammonia. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010. Cap. 6, p 191 - 194.

_____. Methyllithium. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M. *Inorganic Chemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010. Cap. 11, p 307.

_____. Hydroformylation. In: SHRIVER, D.; ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M.

M.*InorganicChemistry*. 5th edition. New York: W. H. Freeman and Company, 2010. Cap. 26, p 698 – 699.

VASCONCELOS, C.; PRAIA, J. F.; ALMEIDA, L. S. Teorias de aprendizagem e o ensino/aprendizagem das ciências: da instrução à aprendizagem. *Psicol. esc. educ.*, v.7, n. 1, p. 11-19, 2003. Disponível em <http://pepsic.bvsalud.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1413-85572003000100002&lng=pt&nrm=iso>. acesso em outubro de 2018.

WANG, Y.; BABIN, V.; BOWMAN, J. M.; PAESANI, F. “The Water Hexamer: Cage, Prism, or Both. Full Dimensional Quantum Simulations Say Both”, *Journal of The American Chemical Society*, 134, 11116-11119, 2012.

WATER CRYSTALS. Disponível em: <<https://www.masaru-emoto.net/en/>>. Acesso em outubro de 2018.

WATER STRUCTURE AND SCIENCE – águaclusterizada. Disponível em: <http://www1.lsbu.ac.uk/water/clusters_overview.html>. Acesso em setembro de 2016.

WONDER WATER – água clusterizada engarrafada. Disponível em: <<http://wonderwatersa.co.za/dr-lee-lorenzen/>>. Acesso em novembro de 2018.