A INTERDISCIPLINARIDADE ENTRE A FÍSICA E A QUÍMICA COMO FERRAMENTA DE ENSINO: UTILIZAÇÃO DE SOFTWARE DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

MIRITZ, Jênifer; Faculdade Venda Nova do Imigrante;
POSPICHIL, Renata; Universidade Luterana do Brasil; SCHMITT, Maurício de Almeida; Universidade Luterana do Brasil;

jenifermmuller98@gmail.com

RESUMO

O presente trabalho se trata de um relato de experiência ao inserir uma ferramenta de química computacional que utiliza princípios de mecânica quântica em uma disciplina de química orgânica de uma turma de graduação. Tendo como objetivo avaliar aceitação e opinião dos estudantes quanto a utilização de uma metodologia de ensino que aborda a física e a química juntas em um mesmo fenômeno da natureza, foi realizada uma aula experimental com uma turma de 17 alunos de graduação em engenharia ambiental e engenharia química na Universidade Luterana do Brasil. Ao mostrar os resultados gráficos dos cálculos de química computacional aos estudantes, foi discutido em aula a relação que a mecânica quântica possui com a química, ao passo que nenhum dos conhecimentos acerca dos átomos e moléculas foi desenvolvido isoladamente, mas sempre relacionando conceitos físicos e químicos. Os alunos acharam a metodologia de ensino boa e favorável para o aprendizado, uma vez que os mesmos afirmaram ter entendido melhor o porquê de certos fenômenos acontecerem, como por exemplo, o local onde ocorre o sítio ativo da molécula. Tendo em vista a aprovação dos alunos diante da abordagem interdisciplinar aplicada à disciplina, esse trabalho incentiva a realização de mais práticas didáticas que misturem os saberes, de modo que o estudante desenvolva uma visão mais aberta sobre os conhecimentos científicos e se tornem aptos para aplica-los em novas tecnologias.

Palavras-chave: Física, mecânica quântica, química orgânica, química computacional, ferramenta de ensino.

INTRODUÇÃO

As ciências da natureza estão intimamente interligadas, uma vez que conceitos de física e química muitas vezes se misturam para explicar um fenômeno (HACHIYA *et al.*, 2018). O surgimento e fragmentação das ciências da natureza em tópicos se deu pela necessidade de agregar as subáreas de acordo com a natureza de seus fenômenos, contudo, o isolamento desses grupos temáticos pode as vezes dificultar a aprendizagem (SANTOS, 2018).

A promoção de práticas interdisciplinares faz com que os alunos desenvolvam um saber mais abrangente acerca do assunto, incentivando-os a relacionar os conceitos e elevando o nível de entendimento ao conquistar um grau mais elevado de abstração acerca do conhecimento científico (SOUZA; SANTOS, 2018). A física e a química são áreas que possuem extrema correlação entre seus conceitos, porém, foram separadas devido a necessidade de abordar seus assuntos de forma mais específica. Contudo, ao unir novamente esses grupos de conhecimento, podemos obter uma explicação completa sobre determinados fenômenos da natureza (LUCA *et al.*, 2018).

Em disciplinas de química, como por exemplo a de química orgânica, alguns conceitos como polaridade da molécula e momento dipolo, a física desempenha um importante papel para explicar esses fenômenos, além de ajudar a facilitar o entendimento sobre estruturas químicas, distribuição eletrônica e a reatividade das moléculas (SUJA; REDHANA; SUDRIA, 2020).

A química computacional e modelagem molecular é uma área da ciência extremamente interdisciplinar, na qual envolve conceitos de química, matemática, programação e física, sobretudo a mecânica quântica, a fim de obter modelos e simulações de sistemas químicos (MCARDLE *et al.*, 2020). Através das simulações computacionais é possível visualizar as moléculas e entender via conceitos físicos como que a molécula se comporta, através do entendimento correto da interação entre os elétrons, densidade eletrônica e demais noções de física (SALES *et al.*, 2021).

Com base nas funções de onda dos orbitais atômicos e moleculares, é possível calcular as propriedades físicas e químicas dos sistemas químicos através de aproximações da

equação de Schrödinger (ABDULLAH; KHAZALI; SAULI, 2017). Além disso, a química computacional fornece uma série de outros métodos computacionais que propiciam excelentes resultados, como o método DFT (Teoria do Funcional de Densidade), o qual considera que a energia do estado fundamental da equação de Schrödinger é um funcional único de densidade (SCHLEDER *et al.*, 2019).

Tendo em vista benefícios que o aprendizado em conjunto dos fenômenos que física e a química podem propiciar aos alunos, foi observado em uma turma de graduação da disciplina de Química Orgânica da Universidade Luterana do Brasil, a aceitação e opinião dos estudantes diante da utilização de Software de química computacional para o ensino de química orgânica com a abordagem focada nos fenômenos físicos e visualizado através dos cálculos de química computacional e modelagem molecular.

METODOLOGIA

Para avaliar a aceitação dos alunos em vista da utilização metodologia interdisciplinar de física e química na disciplina de Química Orgânica, foi organizada uma aula remota via Google Meet para apresentar aos estudantes a proposta didática. Para a execução da aula, foram preparadas para os alunos observarem graficamente, via cálculo de otimização geométrica e single point com o software ORCA 4.2.1, as espécies químicas propanona e nitrobenzeno, a fim de mostrar para os estudantes a distribuição de polaridade das moléculas e as zonas de ataque nucleofílico. Através de uma apresentação com slides, foi demonstrado para os alunos os procedimentos teóricos para a realização dos cálculos e em seguida foi aberto um debate sobre o tema da apresentação. Ao final da aula, foi solicitado que os alunos respondessem o questionário a fim de recolher a opinião sobre o estudo.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Primeiramente, foi mostrado aos alunos a geometria das moléculas de propanona e nitrobenzeno (Figura 1 e Figura 2) obtidas via cálculos de química computacional, onde as esferas azuis, vermelhas, brancas e cinzas são os átomos de nitrogênio, oxigênio,

hidrogênio e carbono, respectivamente. Nesse momento, muitos alunos observaram que a conformação das moléculas é baseada na distribuição eletrônica e hibridização do sistema químico, as quais correspondem aos modelos teóricos propostos pela literatura estudada pelos mesmos.

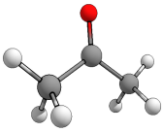


Figura 1 - Molécula de nitrobenzeno

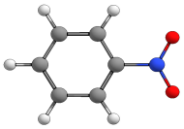


Figura 2 - Molécula de propanona

Orbitais moleculares

Em seguida, foi explicado aos alunos sobre a importância da localização dos orbitais HOMO e LUMO das moléculas, assim como o GAP HOMO-LUMO (diferença de energia entre o primeiro e o último orbital ocupado) para avaliar a reatividade do sistema (Figura 3 e Figura 4). Uma vez que os orbitais de um sistema são as zonas de maior probabilidade de se encontrar o elétron, foi mostrado para os alunos a plotagem gráfica dos orbitais ligantes (em vermelho) e antiligantes (em azul) dos orbitais HOMO das moléculas para que os estudantes observassem as zonas ricas em densidade eletrônica.

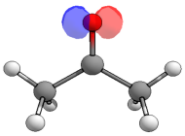


Figura 3 - Orbital HOMO do nitrobenzeno.

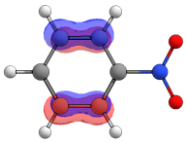
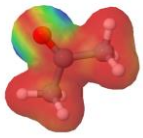


Figura 4 - Orbital HOMO da propanona.

Sítios ativos

Uma vez que os sítios ativos são os locais mais suscetíveis a ocorrer a reação química, foi mostrado para os alunos a zona de susceptibilidade nucleofílica (Figura 5 e Figura 6), onde os pontos azuis das moléculas são mais ricos em densidade eletrônica e os pontos em vermelho são pobres em densidade eletrônica.



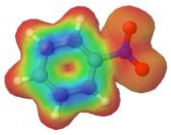


Figura 5 - Sítio ativo do nitrobenzeno. Figura 6 - Sítio ativo da propanona.

Ao final do experimento, os alunos responderam ao questionário disponibilizado via Google Forms, onde foi questionada a relevância da abordagem didática interdisciplinar entre a física e a química aplicada na turma. Todos os alunos da turma de graduação acharam a metodologia pertinente, uma vez que, segundo os mesmos, a ferramenta de química computacional auxiliou na visualização dos fenômenos físicos e químicos das moléculas. A metade da turma já tinha ouvido falar em química computacional, contudo, nenhum dos estudantes possuíam o conhecimento de que havia tantos conceitos físicos para entender os fenômenos que podem acontecer em reações químicas.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A relação que existe entre física e química é mais do que íntima, está entrelaçada em conceitos básicos da ciência que, em geral, os alunos não possuem conhecimento dessa interdisciplinaridade. Ensinar física junto com a química e vice-versa, é fundamental para o estudante ter noção da grandiosidade dos conhecimentos científicos e para que os mesmos possam em um futuro, aplicar esses saberes em novas tecnologias a fim de proporcionar desenvolvimento científico.

REFERÊNCIAS

ABDULLAH, N.; KHAZALI, K. A. M.; SAULI, Z. A review on the Skyrme Hartree-Fock model and related topics. *In*: 2017, **AIP Conference Proceedings**. : American Institute of Physics Inc., 2017. p. 020062. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.4980925. Acesso em: 28 mar. 2021.

HACHIYA, J. S. A. *et al.* Interdisciplinaridade em ciências da natureza: perspectivas a respeito do desenvolvimento de uma oficina de ensino. **Revista Ciências & Ideias ISSN:**

2176-1477, v. 9, n. 1, p. 19–36, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.22407/2176-1477/2018.V9I1.759. Acesso em: 31 jul. 2021.

LUCA, A. G. de *et al.* Episódio Histórico de Louis Pasteur: Uma proposta interdisciplinar para o ensino de Química, Física e Biologia. **História da Ciência e Ensino: construindo interfaces**, v. 17, n. 0, p. 81–98, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.23925/2178-2911.2018V17P81-98. Acesso em: 31 jul. 2021.

MCARDLE, S. *et al.* Quantum computational chemistry. **Reviews of Modern Physics**, v. 92, n. 1, p. 015003, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015003. Acesso em: 31 jul. 2021.

SALES, P. de T. F. *et al.* Cálculos químicos quânticos e seus usos. **Research, Society and Development**, v. 10, n. 8, p. e45910817567, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.33448/rsd-v10i8.17567. Acesso em: 31 jul. 2021.

SANTOS, C. A. Dos. Desafios para a interdisciplinaridade no ensino das ciências da natureza. **Revista Thema**, v. 15, n. 2, p. 363–370, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.15536/THEMA.15.2018.363-370.960. Acesso em: 31 jul. 2021.

SCHLEDER, G. R. *et al.* From DFT to machine learning: recent approaches to materials science–a review. **Journal of Physics: Materials**, v. 2, n. 3, p. 032001, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1088/2515-7639/AB084B. Acesso em: 29 ago. 2021.

SOUZA, R. V. de; SANTOS, B. F. dos. A exigência conceitual na prática pedagógica de dois professores de Química que ensinam Química e Física. **Ciência & Educação (Bauru)**, v. 24, n. 4, p. 945–958, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1590/1516-731320180040009. Acesso em: 31 jul. 2021.

SUJA, I. W.; REDHANA, I. W.; SUDRIA, I. B. N. Mental Model of Prospective Teachers on Structure and Properties Correlation of Organic Compounds. **Journal of Physics: Conference Series**, v. 1503, n. 1, p. 012034, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1088/1742-6596/1503/1/012034. Acesso em: 31 jul. 2021.