

## Programas de química computacional como ferramenta no processo de ensino e aprendizagem da reatividade química

Simone F. T. Marques (PG)<sup>1\*</sup>, Milena A. Pereira (PG)<sup>1\*</sup>, Júlia C. Magalhães (IC)<sup>1</sup>, Júlio de P. C. Oliveira (PG)<sup>1</sup>, Diego F. S. Paschoal (PQ)<sup>1</sup>

simonefloreny@gmail.com,  
julio.pco@hotmail.com, diegopaschoal01@gmail.com

milenaaguiarj18@gmail.com,

juliacandido@outlook.com,

<sup>1</sup>Núcleo de Química Teórica e Computacional de Macaé, Polo Ajuda, Instituto Multidisciplinar de Química, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Macaé, RJ, Brasil.

Palavras-Chave: Reatividade Química, Ensino.

### Introdução

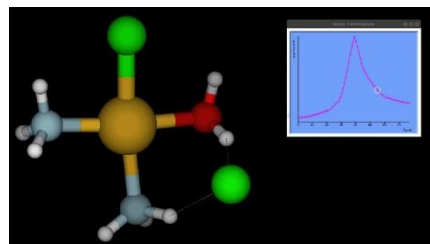
Tecnologias são cada vez mais empregadas na educação e na formação docente<sup>1</sup>. Tendo em vista o alto custo que a realização de atividades experimentais acarreta, o uso de Objetos de Aprendizagem (OA) a partir do auxílio das tecnologias digitais é uma excelente alternativa para auxiliar o professor no ensino de Química<sup>2</sup>. Nesse contexto, a Química Computacional é uma poderosa ferramenta capaz de atrair a atenção dos alunos e auxiliar no processo de ensino e aprendizagem. Para exemplificar, no presente estudo o conceito de reatividade química empregando programas como Avogadro (para desenhar a estrutura dos reagentes químicos) e Molden (para visualizar a reação química e o gráfico de energia) foram utilizados em uma oficina de Introdução à Modelagem Molecular para alunos do Ensino Médio de uma escola pública da cidade de Macaé.

### Resultados e Discussão

A atividade prática realizada com os alunos abordou o tópico de reatividade química. A atividade foi realizada em duas aulas de 40 minutos para um total de 30 alunos, que foram estimulados a responder cinco questões sobre reatividade química: 1. O que é uma reação química? 2. Quais desses processos corresponde(m) a uma reação química? 3. O que é o estado de transição? 4. O que é energia de ativação? 5. Identifique se a reação química representada no gráfico abaixo é favorável ou não de ocorrer. As mesmas questões foram propostas antes e após a realização da prática computacional, tendo sido obtidas 17 respostas no início e 22 após, indicando um maior interesse dos alunos após a realização da prática. No desenvolvimento da prática, foi desenhado no programa Avogadro os reagentes da reação química de ativação do fármaco anticâncer cisplatina em meio biológico. Após, foi mostrado para os alunos como realizar uma simulação

computacional para a modelagem da reação química. O programa Molden foi empregado para visualização da reação (Figura 1).

**Figura 1.** Arquivo de trajetória para reação de aeração da cisplatina visualizado no programa Molden



No geral, foi possível evidenciar que após a realização da prática os alunos obtiveram uma maior compreensão do que é uma reação química e um estado de transição. Além disso, apresentaram uma melhor compreensão da distinção entre processos físicos e químicos.

### Considerações Finais

O uso de ferramentas computacionais foi eficaz para auxiliar na compreensão dos conceitos de reatividade química. Entretanto, adaptações na metodologia aplicada serão incluídas para uma melhor abordagem dos conceitos e serão aplicadas para um maior número de alunos.

### Agradecimentos

FAPERJ (E-26/201.336/2022, E-26/210.215/2022, E-26/200.632/2023, E-26/202.935/2023) e CAPES (Código de Financiamento 001).

[1] CARNEIRO, A. P.; FIGUEIREDO, I. S. S.; LADEIRA, T. A. A importância das tecnologias digitais na Educação e seus desafios. Revista Educação Pública, v. 20, nº 35, 2020.

[2] RIBEIRO, A. A., GRECA, I. M. Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada. Química Nova, v. 26, nº 4, 2003.