

UTILIZAÇÃO DE SOFTWARES DE QUÍMICA COMPUTACIONAL PARA O ENSINO DE INTERAÇÕES NÃO-COVALENTES: UMA SUGESTÃO DE FERRAMENTA PEDAGÓGICA

MIRITZ, Jênifer; Faculdade Venda Nova do Imigrante;

[*jenfermmuller98@gmail.com;*](mailto:jenfermmuller98@gmail.com)

POSPICHIL, Renata; Universidade Luterana do Brasil;

[*renatapospichil@rede.ulbra.br;*](mailto:renatapospichil@rede.ulbra.br)

SCHMITT, Maurício de Almeida; Universidade Luterana do Brasil;

[*mauricio.schmitt@ulbra.br;*](mailto:mauricio.schmitt@ulbra.br)

Palavras-chave: Química computacional; Software de química computacional; Interações não-covalentes (NCI); Ferramenta pedagógica.

1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

A disciplina de química, que está presente no eixo das Ciências da Natureza, no curso de Ensino Médio no Brasil e também em cursos de graduações nas áreas de ciências naturais e engenharias, possui alto índice de reprovação em ambos os níveis acadêmicos (BELO; LEITE; MEOTTI, 2019). As dificuldades que muitos alunos de graduação possuem para aprender esta disciplina está em maior parte enraizada nos problemas encontrados na aprendizagem da mesma ao longo do Ensino Médio, onde a falta de infraestrutura, baixa carga horária disponibilizada à disciplina e despreparo de professores são alguns fatores que influenciam no baixo rendimento dos estudos em química (MUELLER *et al.*, 2020).

A química computacional é uma ferramenta que tem ganhado cada vez mais atenção devido aos seus feitos e descobertas nas ciências que propiciam o desenvolvimento de tecnologias e soluções, contudo, além de ser um utensílio que tem ajudado em trabalhos de química teórica, a química computacional pode ser utilizada de forma didática, a fim

de obter maior compreensão dos alunos em relação aos fenômenos químicos (BATISTA *et al.*, 2018).

Fundamentada em conceitos sólidos de física, química e mecânica quântica, a química computacional possui capacidade de calcular propriedades físico-químicas de moléculas que revelam seu comportamento (SALES *et al.*, 2021). Devido a isso, a química computacional tem sido utilizada também como ferramenta didática, uma vez que têm o potencial de facilitar o entendimento de conceitos químicos através de visualizações gráficas (GOH; HODAS; VISHNU, 2017).

2. OBJETIVO

Para facilitar a compreensão dos alunos, tanto de ensino médio quanto de graduação, e fazer com que os mesmos consigam visualizar que, em uma molécula pode ocorrer mais de um tipo de interação entre seus átomos, esse trabalho visa demonstrar a possibilidade que os softwares de química computacional possuem em potencializar o aprendizado através da descrição detalhada das interações não-covalentes (NCI) de uma molécula orgânica chamada glucosamina, representadas pelas ligações de hidrogênio, interações de Van Der Waals e forças repulsivas.

3. METODOLOGIA

Para obter a estrutura da glucosamina, foi utilizado o Software Avogadro para modelar o a molécula. Após obter as coordenadas da estrutura, foi realizado otimização geométrica com o Software ORCA 4.2.1 e também cálculo de single point, utilizando a função de base def2-SVP, função de base auxiliar def2/J e funcional B3LYP. Ao término do cálculo, a estrutura foi aberta no software MoCalc2012 e visualizada no software Jmol. Todos os softwares utilizados são de acesso gratuito.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Após o processo de cálculos, foi obtida a estrutura da glucosamina (Figura 1), na qual as esferas brancas, vermelhas, azuis e cinzas representam, respectivamente, as espécies químicas hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e carbono.

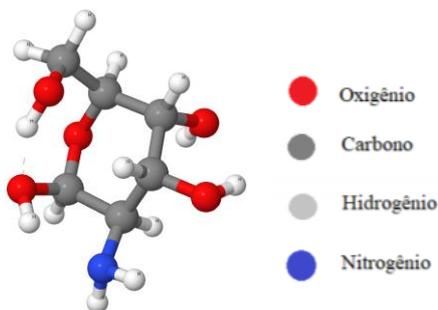


Figura 1 - Estrutura da glucosamina.

Os mapas das interações não-covalentes, representadas pelas ligações de hidrogênio, interações de Van Der Waals e forças repulsivas foram plotados com o auxílio do software MoCalc2012 e visualizados com o software Jmol. As Figura 2 e a Figura 3 são vistas diferentes do mapa de Interações Não-Covalentes (NCI) da molécula, dispostas de modo a mostrar com detalhes as informações contidas nas imagens.

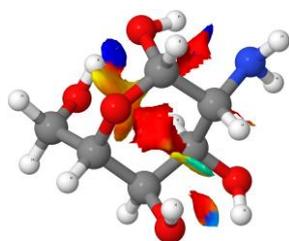


Figura 2 - Vista lateral direita.

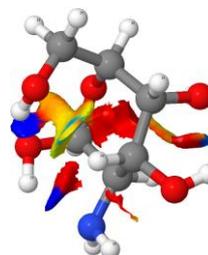


Figura 3 - Vista lateral esquerda.

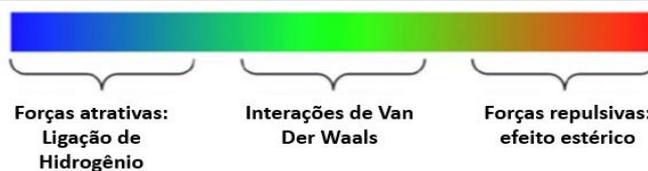


Figura 4 - Escala de Interações Não-Covalentes.

Ao observar os mapas de Interações Não-Covalentes da glucosamina e a escala de Interações Não-Covalentes (Figura 4), é possível reparar que no centro da molécula possui uma força de repulsão forte, o que sugere que outras espécies químicas não são atraídas para aquela região da molécula. Além disso, podemos visualizar que, nos locais com colocação azul, temos forças atrativas atuando no sistema justamente entre os átomos de hidrogênio, nitrogênio e oxigênio que estão localizados nas extremidades da molécula. Apesar de poucas colorações na tonalidade verde, interações de Van Der Waals estão presentes no sistema químico e são realizadas entre os hidrogênios da glucosamina.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através desse estudo, é possível que professores de ensino médio e de graduação possam se motivar ao passo de criar mais materiais didáticos para ampliar os conhecimentos de química em suas aulas, uma vez que essa discussão criada acerca da molécula de glucosamina possui alto potencial pedagógico. Coerente com a bibliografia, a utilização de ferramentas computacionais é bem aceita pelos os estudantes e a adaptação desses métodos computacionais para as salas de aula é promissora. Mais rico que os cálculos computacionais, é a discussão criada em sala de aula junto com os alunos, a fim de fomentar a curiosidade e o senso crítico dos mesmos.

6. REFERÊNCIAS

BATISTA, G. da C. *et al.* Avogadro no ensino de química: um avançado editor molecular de visualização de um grande potencial pedagógico. **Redin - Revista Educacional Interdisciplinar**, v. 7, n. 1, 2018. Disponível em: <http://seer.faccat.br/index.php/redin/article/view/1076>. Acesso em: 29 ago. 2021.

BELO, T. N.; LEITE, L. B. P.; MEOTTI, P. R. M. As dificuldades de aprendizagem de química: um estudo feito com alunos da Universidade Federal do Amazonas. **Scientia Naturalis**, v. 1, n. 3, 2019. Disponível em: <https://periodicos.ufac.br/index.php/SciNat/article/view/2540>. Acesso em: 29 ago. 2021.

GOH, G. B.; HODAS, N. O.; VISHNU, A. Deep learning for computational chemistry. **Journal of Computational Chemistry**, [S. l.], v. 38, n. 16, p. 1291–1307, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/jcc.24764>. Acesso em: 7 abr. 2021.

MUELLER, E. R. *et al.* Porque a disciplina de química geral reprova tanto? **Revista Prática Docente**, v. 5, n. 1, p. 449–468, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.23926/RPD.2526-2149.2020.v5.n1.p449-468.id643>. Acesso em: 29 ago. 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.