

MANUEL MOREIRA BAPTISTA

"DESENVOLVIMENTO E UTILIZAÇÃO DE ANIMAÇÕES EM 3D NO ENSINO DE QUÍMICA"

CAMPINAS

2013



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS INSTITUTO DE QUÍMICA DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

MANUEL MOREIRA BAPTISTA

"DESENVOLVIMENTO E UTILIZAÇÃO DE ANIMAÇÕES EM 3D NO ENSINO DE QUÍMICA"

ORIENTADOR: PROF. DR. PEDRO FARIA DOS SANTOS FILHO

TESE DE DOUTORADO APRESENTADA AO INSTITUTO DE QUÍMICA DA UNICAMP PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE DOUTOR EM CIÊNCIAS

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL	DA TESE DEFENDIDA POR MANUEL
MOREIRA BAPTISTA, E ORIENTADA PELO PROF. DR.	PEDRO FARIA DOS SANTOS FILHO

Assinatura do Orientador	_
	CAMPINAS

2013

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca do Instituto de Química Danielle Dantas de Sousa - CRB 8/6490

Baptista, Manuel Moreira, 1956-

B119 Desenvolvimento e utilização de animações em 3D no ensino de química / Manuel Moreira Baptista. – Campinas, SP: [s.n.], 2013.

Orientador: Pedro Faria dos Santos Filho. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química.

1. Animação. 2. Estrutura atômica. 3. Ligação química. 4. Química - Estudo e ensino. I. Santos Filho, Pedro Faria dos. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Development and utilization of 3D animations in chemistry teaching **Palavras-chave em inglês:**

Animation
Atomic structure
Chemistry bond
Chemistry - Studies and research

Área de concentração: Química Inorgânica

Titulação: Doutor em Ciências

Banca examinadora:

Pedro Faria dos Santos Filho [Orientador] Márlon Herbert Flora Barbosa Soares Flavio Antonio Maximiano

Pedro Luiz Onófrio Volpe Sebastião Ferreira Fonseca **Data de defesa:** 04-10-2013

Programa de Pós-Graduação: Química

Aos meus pais

Pelo exemplo de vida.

AGRADECIMENTOS

Ao meu pai Elísio Fernandes Batista Vermelho e à minha mãe Maria Rodrigues Moreira, pelo exemplo de vida. À mãe de meus filhos, Dra. Lourdes de Fátima Duarte Machado. À minha filha Dra. Daniela Duarte Moreira, pelo incentivo e pela "energia de ativação". À minha filha Dra. Debora Duarte Moreira, pela amizade e pelo incentivo. Ao meu filho Dr. Andre Duarte Moreira, pelas sugestões, pelo bom-humor e pela alegria contagiante.

À Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), na pessoa do Magnífico Reitor **Prof. Dr. José Tadeu Jorge.**

Ao Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas, na pessoa de seu Diretor, **Prof. Dr. Watson Loh**.

Ao **Prof. Dr. Pedro Faria dos Santos Filho**, pela orientação e pela amizade.

Ao Sr. **Ton Roosendaal**, criador do software Blender[®] e presidente da Blender Foundation, por ter generosamente doado e enviado da Holanda, em 2005, o manual de seu software.

A: Eng. Hadi Ahmed Khalifa, Prof. Dr. Italo Odone Mazali, Prof. Dr. Marco-Aurelio de Paoli, Dra. Nilza Minguini, Prof. Dr. Renato Henriques de Souza, Prof. Dr. Rogerio Custódio, Prof. Dr. Ronaldo Aloise Pilli, Prof. Vinícius Freaza, pelas discussões e sugestões.

A: Danielle Dantas de Sousa, Elaine Aparecida Bianchin, Gabriela Lima Marques, Izabel Aquino Calasso e Miguel da Silva Morel, pelo suporte técnico e administrativo.

"A mente que se abre a uma nova idéia, jamais voltará ao seu tamanho original."

(Albert Einstein)

Curriculum Vitae

Formação Acadêmica/Titulação

2009 - 2013

Doutorado em Química Inorgânica, na linha de pesquisa Ensino de Química Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas - SP, Brasil

2005 - 2007

Graduação em Licenciatura em Química Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas - SP, Brasil

2003 - 2004

Graduação em Licenciatura em Física Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas - SP, Brasil

1982 - 1983

Graduação em Licenciatura em Eletrotécnica Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, UNESP, São Paulo - SP, Brasil

1982 - 1984

Mestrado em Engenharia Elétrica Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas – SP, Brasil

1977 - 1981

Graduação em Engenharia Elétrica Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas – SP, Brasil

RESUMO

As animações deste trabalho foram desenvolvidas utilizando o software Blender[®]. Este software, de código aberto e gratuito, é atualmente um dos recursos computacionais mais avançados para modelagem e animação em 3D. As animações foram planejadas para serem usadas em sala de aula e, portanto, são desprovidas de narração e legenda.

Os assuntos contemplados foram: Teoria do Orbital Atômico, distribuição eletrônica, hibridização, Teoria do Orbital Molecular, Teoria de Ligação de Valência, Teoria VSEPR, estruturas de Lewis, estruturas cristalinas dos compostos iônicos e metais (cela unitária, empacotamento e retículo cristalino), transformações químicas e polímeros. As animações de maior interesse estão relacionadas com a teoria do orbital atômico e molecular.

As animações foram avaliadas no IQ-UNICAMP através de questionários respondidos pelos alunos da disciplina de pós-graduação QP443, e pelos alunos da disciplina de graduação QG101. No questionário da disciplina QP443, procurouse descobrir o planejamento que o professor deve fazer para inserir as animações em uma aula tradicional. No questionário da disciplina QG101, procurou-se avaliar a contribuição que as animações podem dar para o ensino-aprendizado de Química em aulas presenciais. As animações também foram avaliadas através das informações fornecidas pela estatística dos websites www.quimica3d.com e www.youtube.com/user/m770596.

As respostas dos questionários aplicados nas disciplinas QG101 e QP443 permitem-nos concluir que as animações facilitaram a visualização tridimensional e estimularam o desenvolvimento da capacidade de abstração dos alunos. As informações da estatística do canal www.youtube/user/m770596 e do website www.quimica3d.com mostram que houve grande interesse pelas animações.

Palavras-chave: Animação, Estrutura atômica, Ligação química, Química – Estudo e ensino.



ABSTRACT

The animations of this work were developed using the Blender [®] software. This free and open-source software is currently one of the most advanced computing resources for 3D modeling and animation. The animations were designed for classroom application and for this reason they have no narration and subtitles.

The topics covered were: Atomic Orbital Theory, electronic distribution, hybridization, Molecular Orbital Theory, Valence Bond Theory, VSEPR Theory, Lewis structures, crystal structure of ionic compounds and metals (unit cell, packing and crystal lattice), chemical transformations and polymers. The animations of most interest are related to atomic and molecular orbital theory.

The animations were valued at the IQ-UNICAMP through questionnaires answered by the QP443 discipline postgraduate students, and by the QG101 discipline undergraduate students. In the questionnaire of the QP443 discipline, we intended to find the schedule that the teacher should use to insert the animations in a traditional classroom. In the questionnaire of the QG101 discipline, we intended to evaluate the contribution of the animations to Chemistry teaching and learning in classroom. The animations were also valued through the information given by the statistics of the www.youtube.com/user/m770596 YouTube channel and www.quimica3d.com website.

The answers from the questionnaires of the QG101 and QP443 disciplines allowed us to conclude that the three-dimensional visualization animations facilitated and stimulated the development of students' capacity for abstraction. The statistical information from the www.youtube/user/m770596 YouTube channel and www.quimica3d.com website showed that there was great interest for the animations.

Keywords: Animation, Atomic structure, Chemistry bond, Chemistry - Studies and research

.



ÍNDICE

1- INTRODUÇÃO	1
1.1 - Contextualização histórica	2
1.2 - Contextualização pedagógica	9
2 - OBJETIVOS	23
3 - PLANEJAMENTO DO TRABALHO	24
3.1 - Criação de um conjunto de símbolos	26
3.2 - Recursos necessários para desenvolver animações	28
3.3 - Desenvolvimento das animações	29
3.4 - Critério de escolha dos assuntos e formas de avaliação	38
3.5 - Disponibilização das animações	39
4 - DESENVOLVIMENTO DO.TRABALHO	40
4.1 - Assuntos contemplados	45
4.2 - Ligação iônica	46
4.3 - Retículos cristalinos	52
4.4 - Interações eletrostáticas nos compostos iônicos	55
4.4.1 - Empacotamento cúbico denso (ABCABC)	56
4.4.2 - Empacotamento hexagonal denso (ABAB)	61
4.4.3 - Empacotamento cúbico simples (AAA)	62
4.5 - Metais	62
4.5.1 - Empacotamento hexagonal denso (HCP)	63
4.5.2 - Empacotamento cúbico denso	65
4.5.3 - Empacotamento cúbico de corpo centrado	66
4.5.4 - Exemplo de estrutura não usual : cúbica simples	67
4.6 - Ocupação do volume nas celas unitárias dos metais	69
4.7 - Ligação covalente	70
4.7.1 - Orbitais atômicos	
4.7.2 - Teoria do Orbital Atômico e configuração eletrônica	73

4.7.3 - Uma comparação entre átomos e seus respectivos íons	75
4.7.4 - Teoria da Ligação de Valência (TLV)	. 76
4.7.5 - Teoria do Orbital Molecular (TOM)	. 80
4.8 - Transformações químicas	. 83
5 - RESULTADOS DA AVALIAÇÃO DO USO DAS ANIMAÇÕES	92
5.1 - Avaliação das animações na disciplina QP443	. 92
5.1.1 - Gráficos com a média aritmética das respostas da disciplina	
QP443 e análise das respostas	. 93
5.2 - Avaliação das animações na disciplina Química Geral-QG101	103
5.2.1 - Gráficos com a média aritmética das respostas da disciplina	
QG101 e análise das respostas	104
5.3 - Avaliação das animações através da estatística do website	
www.youtube.com/user/m770596	120
5.4 - Avaliação das animações através da estatística do website	
www.quimica3d.com	127
6 - COMENTÁRIOS FINAIS 1	31
7 - PERSPECTIVAS PARA O FUTURO 1	36
8 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 1	137

1 - INTRODUÇÃO

As animações em 3D são, atualmente, um dos recursos pedagógicos mais modernos para o ensino de Química e estão integradas às recentes tecnologias de informação e comunicação. Elas podem ser acessadas em qualquer lugar do planeta através da internet com o uso de computadores desktop, notebooks, tablets, smartphones e computador-*Data Show*. Por se tratar de um recurso que está na fronteira da pesquisa em educação, ou seja, por conter hipertexto, imagens com links, som e vídeo, exige uma conexão com a internet. Para poder acessar o conteúdo integral deste trabalho, foi criada a sua versão digital, que está hospedada no endereço www.biq.iqm.unicamp.br/arquivos/770596/tese.htm. Por isso, para que a leitura deste texto possa ser contemplada em todos os seus aspectos, é necessário que o leitor esteja conectado à internet neste endereço, para que possa ter acesso aos links citados ou indicados ao longo de todo o texto.

A dificuldade de abstração e de visualização tridimensional dos alunos sempre foi apontada, pelos professores, como um dos principais problemas no aprendizado de Química. Essa dificuldade dos alunos está relacionada com a limitação dos recursos que os professores tradicionalmente tiveram para representar os aspectos tridimensionais dos modelos conceituais: giz, lousa, e retro-projetor. A recente informatização das universidades trouxe para a sala de aula o *Data Show* e o computador, o que tornou possível a utilização de recursos hipermídia, entre eles, as animações em 3D. Se antes o aluno tinha dificuldade de imaginar o que o professor estava dizendo, ao mesmo tempo em que o professor não sabia o que o aluno estava imaginando, com as animações em 3D esse problema deixa de existir. As animações em 3D estimulam a capacidade de abstração dos alunos e facilitam a visualização tridimensional dos modelos conceituais, contribuindo, dessa forma, para que todos tenham o mesmo nível de aprendizado.

Vários conceitos, tais como hibridização, estruturas de Lewis, ligação química, formação de polímeros, transformações químicas, teoria do orbital atômico, teoria do orbital molecular, retículos cristalinos, celas unitárias, relação estequiométrica de compostos iônicos, que exigem bastante capacidade de abstração e visualização tridimensional, são alguns exemplos de conceitos que podem ser ensinados usando animações em 3D. Os velhos modelos químicos não precisam ser substituídos porque continuam sendo úteis, mas podem ser melhorados.

Para ajudar a entender como as animações em 3D podem contribuir para melhorar o ensino e aprendizado de Química, dividimos esta introdução em duas partes. Na primeira parte faremos uma breve retrospectiva histórica de como as imagens foram criadas e utilizadas, até chegarmos às atuais animações em 3D desenvolvidas por software. O foco desta abordagem será direcionado para a utilização de animações no ensino e aprendizado de Química ao longo da história. Na segunda parte faremos um levantamento bibliográfico dos recursos pedagógicos que têm sido usados para facilitar a visualização tridimensional e estimular o desenvolvimento da capacidade de abstração dos alunos. As limitações desses recursos pedagógicos serviram de subsídio para o planejamento das animações em 3D deste trabalho.

1.1 - Contextualização histórica

Estamos vivendo no meio da maior revolução dos meios de comunicação que a humanidade já presenciou. Essa revolução, que começou com a transmissão e recepção de som e imagem no final do século XIX, teve um rápido desenvolvimento a partir da década de 1980. Nesta década, que ficou conhecida como a era da digitalização, os processadores passaram a controlar práticamente tudo que nos cerca, como por exemplo, editores de texto, editores de imagem, eletrodomésticos, computadores pessoais, celulares, smartphones, tablets, carros e aviões.

A grande mudança observada nos meios de comunicação foi a utilização de imagens digitais e a popularização da internet. O conhecimento científico, que antes era restrito a quem tinha acesso às revistas de publicações científicas e livros didáticos, passou a ficar, literalmente, na ponta dos dedos. Além da facilidade de acesso, a internet também causou uma profunda mudança na forma de divulgar o conhecimento ao permitir o uso de texto, links, som, imagem e vídeo.

A facilidade que a internet oferece para divulgar o conhecimento, associada ao surgimento de softwares de modelagem e animação em 3D para computadores pessoais na década de 2000, vem causando mudanças no ensino e aprendizado de Química. Em nossa opinião, a visualização tridimensional e o movimento em transformações químicas, por exemplo, têm mostrado que as animações em 3D são um recurso didático importante.

Para melhor entender a importância do uso de animações em 3D no ensino e aprendizado de Química, sentimos que é necessário fazer uma breve retrospectiva de sua criação e de seu uso. Nessa retrospectiva apresentaremos uma síntese dos principais acontecimentos históricos da criação de imagens, que levaram ao atual estágio de modelagem e animação em 3D.

Mais de quarenta mil anos antes da invenção da escrita, o ser humano já utilizava as imagens como forma de expressão artística e de registro. Através das imagens encontradas nas cavernas em várias partes do planeta sabemos, por exemplo, como se caçava, que a guerra já existia, e até mesmo que o ser humano se divertia dançando. Na Figura 1.1 podemos ver, por exemplo, quais animais existiam naquela época na região de Lascaux, na França.

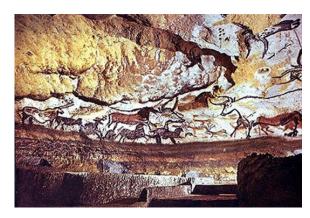


Figura 1.1 – Pintura reconstituida encontrada numa caverna na região de Lascaux, França, datada de 20000 AC Fonte: http://www.lascaux.culture.fr.

A técnica criada pelo ser humano primitivo para produzir imagens, só mudaria com a invenção da fotografia pelo francês Joseph Nicèphore Niépce, em 1825. Niépce é aceito como sendo o inventor porque é dele a fotografia mais antiga que sobreviveu, mostrada na Figura 1.2, onde o próprio Niépce aparece no telhado de sua casa.

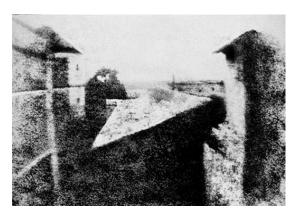


Figura 1.2 – Fotografia de Joseph Nicèphore Niépce, de 1825, considerada a primeira por ser a mais antiga que sobreviveu Fonte: http://en.wikipedia.org/wiki/Nicéphore_Niépce.

A conseqüência natural da invenção da fotografia foi a invenção do cinema, pelos irmãos Auguste e Louis Lumière (Figura 1.3), em 1895, também na França. Os irmãos Lumière, que herdaram uma fábrica de películas fundada por seu pai e detinham a patente do cinematógrafo,

inventado pelo francês Léon Bouly em 1892, tiveram os recursos técnicos necessários para inventar o cinema.



Figura 1.3 – Auguste e Louis Lumière, fabricantes de peliculas fotográficas e inventores do cinema Fonte: http://pt.wikipedia.org/wiki/Auguste_e_Louis_Lumière.

A invenção do cinema levou à criação do primeiro desenho animado, Fantasmagorie, em 1908, pelo francês Emile Cohl. Neste desenho animado, acessado através do Link 1.1, podemos observar a técnica usada pelo autor. No início aparece a mão do autor desenhando um boneco, mostrando que foram tiradas várias fotos dos desenhos, em posições diferentes, produzindo o movimento. Esse processo, de tirar fotos, também foi repetido para os demais desenhos. No final, as películas fotográficas foram colocadas em sequência e ao serem reproduzidas no cinematógrafo da época, criaram a ilusão de movimento.



Link 1.1 – Primeiro desenho animado moderno, Fantasmagorie, produzido por Emile Cohl em 1908.

A invenção da fotografia e do cinema desencadaram uma rápida revolução nos meios de comunicação. Pouco mais de três décadas após a invenção do cinema, o som chegou às "fotos em movimento", com eram chamados os filmes no início do século 20. Em 1928, foi produzido o primeiro desenho animado com som, Steamboat Willie, nos estúdios de Walt Disney. Neste desenho animado, mostrado no Link1.2, também vemos a primeira aparição pública de Mickey Mouse.



Link 1.2 – Steamboat Willie, primeiro desenho animado com som produzido nos estúdios de Walt Disney.

Com a invenção da televisão na década de 1920 e com a sua rápida popularização, começa a produção de desenhos animados em escala industrial. Por terem a preferência do público infantil, foram produzidos para entreter e educar. Podemos imaginar que os desenhos animados mostraram,

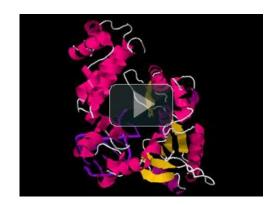
desde o início, que seriam um dos recursos pedagógicos mais importantes para o ensino de Química, porque permitiam representar o mundo invisível.

"Our Friend the Atom", produzido para a televisão em 1957 por Walt Disney, é um exemplo de filme que utiliza desenhos animados para mostrar o mundo invisível da Química. Neste filme são utilizados desenhos animados para mostrar todos os modelos do átomo, dos Gregos a Einstein. No Link 1.3 é mostrado um trecho do filme que explica o modelo do átomo na Grécia Antiga.



Link 1.3 – Trecho do filme "Our Friend the Atom" sobre o modelo do átomo na Grécia Antiga.

As imagens nos desenhos animados, e conseqüentemente as imagens relacionadas com a Química, foram produzidas manualmente durante quase todo o século XX. Só em 1992, quando David e Jane Richardson lançaram o Kinemage, o primeiro software para modelar e animar moléculas em 3D, é que as imagens de estruturas moleculares, que eram feitas totalmente à mão, começaram a ser produzidas com auxílio de software. O Link 1.4 mostra um exemplo de animação desenvolvida utilizando o Kinemage.



Link 1.4 – Exemplo de aplicação do Kinemage: as várias possibilidades de visualização da molécula de DNA Beta Polimerase humano Fonte:http://www.rcsb.org/pdb/101/motm_disscussed_entry.do?id=1zqa.

Em 2003, foi lançada a primeira versão do Blender[®], um software de modelagem e animação em 3D, livre e gratuito. Enquanto o Kinemage é um software específico, que só serve para modelar e animar moléculas, o Blender[®] é um software de uso geral, o que significa que praticamente tudo pode ser modelado e animado – a imaginação é o único limite para o que pode ser criado. Um exemplo da utilização deste software é mostrado no Link 1.5, onde se pode perceber o seu potencial.



Link 1.5 – Exemplo de animação criada usando o Blender[®].

1.2 - Contextualização pedagógica

Toda e qualquer atividade docente deve ser permeada pela seguinte pergunta: que contribuição esta atividade pode dar para o ensino e para o aprendizado?

Para responder esta pergunta precisamos conhecer as dificuldades do ensino-aprendizado de Química e os recursos pedagógicos que têm sido usados para tentar diminuir essas dificuldades. Felizmente, esses recursos pedagógicos já foram extensamente pesquisados e os resultados dessas pesquisas foram publicados nas principais revistas especializadas em ensino de Química. A revisão dos artigos publicados nessas revistas nos permite identificar as limitações de cada recurso pedagógico — o que é fundamental para planejar outros recursos que podem ajudar a superar essas limitações.

Marson e Torres (2011), ao mencionarem que o aprendizado científico é a moldura da ciência da educação, criam um cenário para mostrar como as animações podem contribuir para o ensino de Química. Nessa analogia, de uma moldura que é formada por quatro arestas, o aprendizado científico é formado por quatro elementos essenciais: conceitual, epistemológico, social e cognitivo. Os autores concluem que animações em 3D podem facilitar o aprendizado de conceitos químicos.

A atual era de informação digital oferece uma enorme quantidade de recursos educacionais baseados em multimídia, tais como, softwares de modelagem e animação em 3D de moléculas, tutoriais e simuladores. Diversos estudos têm indicado que a escolha adequada desses recursos pode facilitar a integração dos modos de representação e, conseqüentemente, facilitar o aprendizado dos conceitos químicos.

A dificuldade de visualização espacial é um dos maiores problemas do ensino-aprendizado de Química. Há muito tempo os químicos usam as habilidades espaciais, como por exemplo, a visualização de estruturas em

3D, para identificar e caracterizar centros estéreos e a representação de processos em 2D, usando rotações e reflexões. Na sala de aula, os alunos aprendem a geometria molecular para, por exemplo, desenhar estruturas orgânicas em uma variedade de formatos, estereoquímica e teoria de grupos. Todos estes conceitos exigem o uso de habilidades espaciais (Harle e Towns, 2011).

A ciência da educação ainda não foi capaz de fornecer um conjunto claro e coerente de diretrizes para a concepção de uma instrução multimídia eficaz. Na maior parte dos casos, a intuição dos professores sobre o que funcionaria melhor, associada a considerações estéticas, tem sido a força motriz por trás do desenvolvimento desses recursos pedagógicos para o ensino-aprendizado de Química (Korakakis et *al.*, 2012).

Essa busca de novos recursos pedagógicos, baseada na intuição, associada às considerações estéticas, está documentada nas publicações científicas especializadas em ensino de Química. Pinto (2012) mostra a contribuição dos modelos físicos de moléculas para o ensino-aprendizado de Química:

A forma como os átomos estão organizados em estruturas cristalinas, é ensinada para os estudantes nas disciplinas de Química Geral. A transposição das ilustrações dos livros didáticos para estruturas tridimensionais causa dificuldade para alguns alunos. Para facilitar esta transposição, Cady (1997) propôs o uso de modelos construídos com bolas de isopor e palitos de dente. Desde seu primeiro uso por Dalton. em 1810, os modelos físicos de moléculas têm sido empregados por químicos para aumentar a visualização e o entendimento do mundo molecular. Os modelos físicos de moléculas têm sido usados até mesmo para decorar praças públicas, como é o caso do Atomium em Bruxelas, mostrado na Figura 1.4. O conhecimento dos diferentes retículos cristalinos e de suas respectivas celas unitárias, permite calcular os raios atômicos da tabela periódica e os parâmetros das estruturas cristalinas. Este exercício desenvolve nos alunos a visualização espacial e a percepção dos aspectos tridimensionais envolvidos.



Figura 1.4 – Vista do Atomium em Bruxelas, Bélgica.

Schiltz e Oliver-Hoyo (2012) também estudaram a utilização de modelos físicos no ensino de Química. Em seu trabalho, desenvolveram três modelos físicos 3D, mostrados na Figura 1.5, para ajudar os alunos a explorar e refinar a visualização associada a tópicos de simetria inorgânica:

A Química Inorgânica cobre um número considerável de tópicos que requerem a visualização mental, tais como simetria e teoria de grupo. A visualização mental inclui a percepção, a retenção, e a manipulação mental das formas. Os estudantes com boa habilidade de visualização têm maior facilidade de resolver problemas. Uma habilidade avançada de visualização também pode indicar um nível avançado de pensar.



Figura 1.5 – Modelos físicos utilizados para ajudar a visualização tridimensional.

Outro recurso pedagógico que tem sido usado no ensino de Química, citado por Jagodzinski e Wolski (2012), é o uso de filmes didáticos:

A visualização do conteúdo educacional é um aspecto muito importante da educação moderna. Filmes didáticos ajudam significativamente os professores a enriquecer suas aulas. O uso de filmes no ensino pode atender as seguintes funções: ilustrar, criar, verificar, praticar. consolidar. instruir е controlar. Pedagogicamente, uso eficiente de filmes 0 dependende dos conceitos presentes no filme, de sua estrutura e da forma como são aplicados nas aulas. Os filmes, além de promover a aproximação entre os estudantes e os fenômenos químicos, explicam os experimentos que eles próprios irão realizar laboratório (Whelan e Zare, 2003).

O trabalho realizado por Frey et *al.* (2012), mostra que trechos de filmes comerciais, com algum tipo de conteúdo químico, podem ser usados como recurso pedagógico:

Os estudantes que assistiram os trechos dos filmes aumentaram a habilidade de usar a informação e a memorização a longo-prazo dos fatos, comparado com estudantes que só estudaram o conteúdo. O envolvimento dos alunos com os trechos dos filmes criou um caminho para contextualizar a nova informação e permitiu que os alunos conectassem os novos fatos do trecho do filme com seu conhecimento anterior. Os alunos assimilam melhor a informação quando o aprendizado está conectado com imagens dinâmicas, do que quando está conectado com imagens estáticas.

Os jogos são outro recurso pedagógico encontrado na literatura. Antunes et *al.* (2012) apresentam alguns benefícios de seu uso em sala de aula:

Os jogos podem ser considerados educacionais quando desenvolvem as habilidades cognitivas e operacionais, tais como, a habilidade de resolver problemas, a percepção, a criatividade e o raciocínio, importantes para а construção são Habilidades cognitivas conhecimento. relacionadas com a capacidade de diferenciar objetos, eventos ou estímulos, identificar e classificar conceitos, aplicar regras e resolver problemas. Habilidades operacionais podem ser definidas como atitudes ou capacidades cognitivas que contribuem para o aprendizado individual e para a intervenção em fenômenos sociais e culturais, o que também ajuda a construir o relacionamento.

Com o surgimento da internet, foram desenvolvidos novos recursos pedagógicos, que se somaram à lista dos recursos mencionados até agora (modelos físicos, filmes didáticos, trechos de filmes comerciais e jogos). Esses novos recursos pedagógicos ganharam até um nome: aprendizado baseado na internet (web-based learning).

A recente integração dos celulares com a internet e a incorporação de várias funções aos celulares, tem sido apontada como um dos principais fatores para o incremento do aprendizado baseado na internet (Benedict e Pence, 2012):

A sociedade está se movendo rapidamente dos computadores desktop e laptop para os dispositivos móveis, como por exemplo, os smartphones. De acordo com o "The Pew Internet and American Life Project", mais de 75% dos adolescentes nos Estados Unidos possuem seu próprio celular. Esse número é ainda maior entre os estudantes de nível superior, e a maior parte desses celulares são smartphones, que incluem funções como câmeras de vídeo, sistemas de posicionamento global, acesso à internet, e

processadores com desempenho igual aos desktops de apenas alguns anos atrás.

O elevado número de estudantes universitários, nos Estados Unidos, que têm celular, indica que a inclusão deste dispositivo para ensinar é inevitável (Lichter, 2012):

Estudos recentes mostram que 99% dos estudantes universitários (nos EUA) têm celulares, 97% usam mensagens de texto como forma principal de comunicação e 53% têm smartphones, que têm acesso à internet. O crescimento do uso de smartphones indica que aumentará a inclusão desses dispositivos no ensino de Química, o que tornará o aprendizado mais fácil e acessível.

O uso da internet vai muito além de disponibilizar vídeos criados como material complementar para as aulas. A internet também pode ser usada para disponibilizar vídeos de tutoriais, criados por professores a partir das dúvidas dos alunos, observadas nas respostas das provas e nas listas de exercícios para serem resolvidas em casa. Este uso revoluciona a pedagogia do aprendizado (He et *al.*, 2012):

O uso das recentes tecnologias na educação tem aperfeiçoado e, até mesmo revolucionado, a pedagogia em muitas áreas da educação de nível superior, como está acontecendo, por exemplo, através do uso de vídeos tutoriais como suplemento de aprendizado nas disciplinas de Química do nível superior. Os conceitos e problemas em que os alunos mostraram maior foram inicialmente identificados dificuldade respostas das provas e nas listas de exercícios para serem resolvidas em casa. Depois, foram desenvolvidos e disponibilizados vídeos tutoriais na internet, para tirar as dúvidas de tópicos específicos. Para avaliar a eficiência dos tutoriais, foram comparadas as notas dos alunos que assistiram os tutoriais com as notas dos alunos de turmas anteriores que não tiveram contato com os tutoriais. Os resultados indicam que os vídeos disponibilizados tutoriais na internet são uma ferramenta valiosa, flexível e de baixo-custo, que aumenta o domínio do aluno para resolver problemas.

Os vídeos tutoriais foram o primeiro passo para divulgar conhecimento através da internet. Atualmente já são produzidos e disponibilizados complementos de todas as aulas de uma disciplina lecionada durante um semestre, como relata Franz (2012).

Os smartphones, por facilitarem o acesso dos alunos aos tutoriais, acabam por incentivar a produção de vídeos didáticos para serem disponibilizados na internet (McRae et *al.*, 2012).

Além dos vídeos didáticos e dos tutoriais, outro recurso pedagógico muito usado no ensino de Química através da internet são as animações em 3D. A facilidade de acesso à internet através dos smartphones, o uso do YouTube como plataforma de ensino, e a interatividade que a internet oferece, impulsionaram a utilização de realidade virtual na educação (Chittaro e Ranon, 2007).

Os benefícios do uso de animações e os problemas envolvidos na sua concepção são apontados por Burke et *al.* (1998):

Como os alunos geralmente têm dificuldade de visualizar, entender e memorizar como os processos dinâmicos acontecem, o uso de computadores para representar o movimento dinâmico, ajuda os estudantes a entender os complexos conceitos químicos abstratos.

Podem ser criadas animações para o ensino de Química que permitam comunicar idéias abstratas, conceitos e processos para os alunos. Uma animação conceitual de computador deveria ser desenvolvida para fornecer a visualização de um processo químico específico.

Um exemplo de dificuldade de visualização espacial apontada por Donaghy (2012) é a repulsão de pares de elétrons da camada de valência (VSEPR - Valence Shell Electron Pair Repulsion):

Tem sido nossa experiência que os estudantes gastam muito tempo para fazer a conexão entre a representação bidimensional das estruturas de Lewis e as estruturas tridimensionais usadas para prever sua geometria molecular. Por exemplo, uma pergunta comum que é geralmente feita é: Porque uma estrutura composta de cinco átomos é chamada de tetraédrica, tetra não significa quatro?

Apesar de muitas atividades terem sido publicadas sobre como melhorar as aulas, poucos modelos como, por exemplo, os da Figura 1.6, são atualmente feitos ou manipulados pelos estudantes.

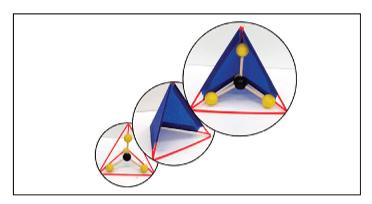


Figura 1.6 – Construindo um tetraedro e conectando-o com moléculas de geometria tetraédrica, como a do metano.

A dificuldade de visualização espacial dos alunos, relatada por Donaghy (2012), associada ao fato de serem produzidos poucos modelos físicos, pode ser contornada com o uso de animações em 3D.

Os modelos físicos, como os da Figura 1.6, podem ser modelados em 3D e animados, usando o Blender[®], permitindo que sejam mostrados detalhadamente os pontos onde os alunos têm dúvida. A manipulação de objetos físicos, outro problema mencionado no artigo, também pode ser

contornado através da interatividade de objetos modelados em 3D pela internet.

Além do Blender[®], outros softwares permitem criar animações interativas através da internet. Os benefícios de usar animações interativas pela internet são descritos por Barak et *al.* (2011):

O desenvolvimento de Java, Flash e outras aplicações baseadas internet. permite na professores e educadores atualmente usem animações complexas de forma interativa. Na ciência da educação, animações criadas por software, são usadas para descrever, explicar e prever processos científicos. Fenômenos científicos abstratos que ocorrem em nível microscópico, como moléculas e átomos, podem ser atrativamente ilustrados por animações. As animações são empregadas para enfatizar as transições do abstrato para as operações mentais concretas e vice versa.

O Java é o software interativo mais utilizado na internet atualmente, porque foi desenvolvido para atender essa necessidade. Podemos encontrar vários exemplos na internet de aplicações voltadas para o ensino de Química, escritos em Java. Um exemplo é sobre um dos tópicos que mais exigem visualização tridimensional, as operações de simetria (Cass et *al.*, 2005):

A possibilidade de desenvolver animações moleculares em 3D para ensinar simetria molecular usando tecnologias computacionais ainda é um sonho do futuro. Com o uso de programas de visualização apropriados, uma molécula pode ser animada para sofrer uma reflexão, inversão ou rotação imprópria, um processo que requer considerável imaginação quando é feito com um modelo físico. Neste artigo, nós compartilhamos alguns dos detalhes desenvolvimento de um conjunto de páginas da internet para ensinar simetria molecular no Imperial College London usando animações.

Este artigo mostra muito mais que a opinião de seus autores sobre os benefícios das animações em 3D para o ensino de Química – mostra seu entusiasmo. Cass (2008) também mostra o mesmo entusiasmo:

Entender os complicados fenômenos moleculares através de desenhos bidimensionais pode ser um desafio. Gostaríamos de enfatizar as visualizações animadas com três exemplos, as operações de simetria C₂ e C₃ nos triquelatos quirais, a designação das configurações absolutas nessas moléculas e os mecanismos não-dissociativos (Bailar Twist e Rây-Dutt).

Outra aplicação importante da interatividade dos softwares de modelagem e animação em 3D é a sua utilização para criar ambientes virtuais de simulação tridimensional, os laboratórios de química virtuais (Dalgarno et *al.*, 2009):

Muitos estudantes de Química, quando têm suas primeiras aulas de laboratório, sentem-se inseguros e experimentam uma sensação de ansiedade. Este é o caso especial dos alunos que têm aula à distância, quando realizam suas sessões de laboratório. A oferta de recursos preparatórios para aliviar este problema, ajudará os alunos a alcançarem os benefícios esperados nas sessões de laboratório.

Os laboratórios de química virtuais, ambientes virtuais de simulação tridimensional, são um recurso pedagógico que prepara os alunos de ensino a distância para as sessões de laboratório no campus da universidade.

Outra forma de usar ambientes virtuais de simulação tridimensional é a inclusão de animações em arquivos Adobe Reader, que permitem a visualização das animações interativas sem precisar estar conectado à internet. Essa também é uma forma bastante simples e prática de enviar e receber animações em um documento de formato portátil (Cody et al., 2012).

Há muitos anos a visualização tem sido reconhecida como um componente importante para o aprendizado de Química, o que é especialmente verdadeiro para o estudo de estereoquímica. A extensa variedade de idéias e artigos sobre o ensino de estereoquímica mostra a complexidade e a importância desta matéria. O desafio de ensinar estereoquímica resulta, em parte, da limitada habilidade dos estudantes para visualizar estruturas moleculares em três dimensões.

Animações em 3D podem ser incluídas em arquivos Adobe Reader, 3D-pdf, para serem usados, por exemplo, no ensino de estereoquímica em Química Orgânica de nível superior. As imagens de estruturas moleculares em 3D podem ser visualizadas como bolas e bastões, arame, ou espaço preenchido. Quando os estudantes visualizam as estruturas interativas em 3D, eles podem rotacionar, girar, aproximar, e retornar à posição inicial.

O aumento da velocidade dos processadores dos computadores pessoais atuais, que já ultrapassou os 2 GHz, associado ao baixo preço dos computadores pessoais, facilitou e impulsionou a produção de animações direcionadas para o ensino, em particular, de Química. A grande quantidade e diversidade de animações disponíveis atualmente, entretanto, dificultam avaliar seus efeitos sobre o aprendizado (Ploetzner e Lowe, 2012):

O uso de animações na educação tem se intensificado com a intenção de melhorar entendimento dos alunos de processos complexos e conceitos abstratos que envolvem variação no espaço e tempo. As animações são frequentemente incluídas em ambientes de aprendizado informatizado, como por exemplo, Digital Curriculum Resources of The Learning Federation na Australia, Online Teaching (MERLT) nos EUA, e ARIADNEF Foundation na Europa. Apesar da adocão das animações na educação e de sua difusão ter sido rápida, a pesquisa sobre os efeitos das animações sobre o aprendizado ainda está na infância. Esta pesquisa é altamente fragmentada devido à falta de um procedimento teórico global para unificar essa avaliação. Um dos fatores que contribui para a heterogeneidade dos resultados das pesquisas é a grande diversidade de animações empregadas nas pesquisas.

Até este ponto, foram apresentados artigos sobre animações em que os elementos nelas presentes são modelados "artisticamente" em 3D por um animador. Existem também softwares que modelam em 3D a partir das equações matemáticas. O Blender[®], por exemplo, pode importar cálculos feitos por um programa externo e, a partir desses dados, modelar objetos em 3D. Outro software que também modela desta forma é o ChemBio3D. Na Figura 1.7 temos um exemplo de orbitais HOMO e LUMO modelados com o ChemBio3D por Ruddick et *al.* (2012):

Avanços tecnológicos tornaram possível o desenvolvimento de programas computacionais de pesquisa em Química, que trouxeram um grande avanço para a Química. Os incômodos procedimentos computacionais para o modelamento de sistemas químicos podem ser substituidos por interfaces intuituivas. Neste estudo, é apresentado um módulo computacional que foi usado para introduzir a teoria do orbital molecular para os alunos de Química Geral.

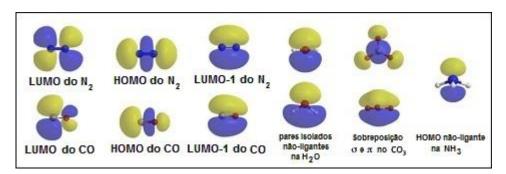


Figura 1.7 – Orbitais moleculares gerados com o software ChemBio3D.

Quando ouvimos falar de realidade virtual, o que nos vem à mente são imagens que foram criadas usando software de modelagem e animação em 3D. Essas imagens chamam a atenção pelo seu realismo - chegamos mesmo a duvidar que tenham sido criadas usando software - porque

poderiam perfeitamente ser fotos de objetos reais ou pessoas. Observemos, por exemplo, as imagens da Figura 1.8. É possível responder se essas imagens foram criadas com o uso de um software de modelagem em 3D? Decididamente, não é possível responder esta pergunta. Acreditamos que foram criadas por software porque foram copiadas da galeria de imagens do website www.blender.org.



Figura 1.8 – Imagens criadas usando o Blender[®] copiadas do website www.blender.org.

A realidade virtual, entretanto, não é a última palavra em animações em 3D. A realidade virtual imersiva é atualmente a última palavra. Realidade virtual imersiva é a que está presente nos desenhos animados em 3D, que estamos acostumados a assistir no cinema com óculos especiais.

A realidade virtual imersiva também já está presente no ensino de Química. Ambientes de realidade virtual imersiva, como o CAVE™, mostrado na Figura 1.9, permitem a interação do aluno com átomos e moléculas. Comparando as animações de Química em 2D e 3D desenvolvidas para computadores pessoais, com animações de Química em 3D desenvolvidas para realidade virtual imersiva, verifica-se que os dispositivos de realidade virtual aumentam o interesse e a motivação do aprendizado (Limniou et *al.*, 2008).

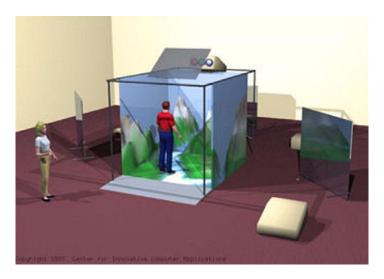


Figura 1.9 – Ambiente de realidade virtual imersiva do CAVE™.

Ao resgatar alguns dos recursos pedagógicos que têm sido usados para facilitar a visualização tridimensional, necessários para entender diversos conceitos químicos, criamos um cenário para mostrar como as animações em 3D podem contribuir para melhorar o ensino-aprendizado de Química. Aos recursos pedagógicos apresentados (modelos físicos, filmes educacionais, filmes comerciais, jogos educacionais, web-based learning, arquivos Adobe Reader, e realidade virtual imersiva), acrescentamos as animações em 3D - um recurso pedagógico que pode ajudar o professor a criar um discurso com detalhes conceituais antes inimagináveis.

2 - OBJETIVOS

- Desenvolver animações em 3D, utilizando o software Blender[®], para serem usadas em disciplinas de Química;
- Aplicar as animações em disciplinas de graduação e pós-graduação oferecidas no IQ/UNICAMP;
- Avaliar a utilização das animações através da análise das respostas aos questionários respondidos pelos alunos;
- Avaliar o interesse pelas animações através da estatística dos sites www.quimica3d.com e www.youtube.com/user/m770596.

3 - PLANEJAMENTO DO TRABALHO

Antes de explicar como foi feito o planejamento deste trabalho, é importante mencionar as dificuldades encontradas para aprender a usar o software Blender[®], para se ter uma visão mais ampla do esforço envolvido no desenvolvimento de animações.

O aprendizado do Blender[®], teve início em 2006, três anos após o lançamento da sua primeira versão, ainda com poucas funcionalidades. O primeiro manual do Blender, com 768 páginas, foi lançado em 2004, mas o acesso a ele era difícil porque não era vendido comercialmente.

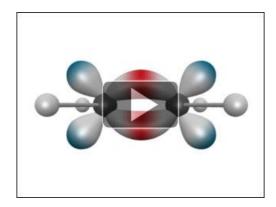
Em 2006, ao fazer uma busca no Google, a única referência que aparecia sobre o Blender[®] era o endereço do website da Fundação Blender (www.blender.org). Nesse website, 0 download do software disponibilizado gratuitamente, mas não existia sua correspondente documentação. Como o software é extremamente complexo, com centenas de botões, mostrou-se impossível aprender a usá-lo sem a sua documentação. Diante dessa dificuldade, enviamos um e-mail para o Sr. Ton Rosendaal, criador do software e presidente da Fundação Blender, expondo a nossa dificuldade. Sensibilizado com a nossa situação, o Sr. Ton Rosendaal enviou, gratuitamente, uma cópia do manual Blender[®], única fonte de informação sobre este software disponível naquela época. Com o manual em mãos, iniciou-se um aprendizado solitário porque não conhecíamos ninguém que já tivesse tido contato com este software. Ressalte-se que, mesmo com o auxílio do manual, o aprendizado foi difícil - alguns meses se passaram até ver o primeiro objeto, um cubo, mover-se na tela do computador, da esquerda para a direita.

Superada a dificuldade inicial de aprender a usar o software, surgiu o próximo desafio, criar animações para o ensino de Química utilizando um software que havia sido concebido, originalmente, para criar desenhos

animados como aquele mostrado no link 1.5. Seria possível, por exemplo, modelar em 3D os orbitais \mathbf{s} , \mathbf{p} , $\mathbf{\sigma}$ e π , de forma que não fossem apenas uma representação artística, mas que fossem fiéis às equações da mecânica quântica?

A resposta foi afirmativa e veio através da primeira animação desenvolvida no IQ-UNICAMP, mostrada no Link 3.1. Para obtê-la foram necessárias várias semanas de trabalho e doze tentativas; a animação que mostra os orbitais de fronteira HOMO e LUMO do etileno representa, assim, a sua décima segunda versão. Para se chegar a esse resultado foi necessário, portanto, muito trabalho.

Desenvolver animações requer muito tempo, muita dedicação e muita paciência. Em nosso trabalho, foram necessárias mais de oitenta horas de trabalho para cada minuto de animação, sem incluir o tempo de processamento gasto pela CPU do computador. O tempo de processamento também é enorme; para renderizar um minuto de animação, podem ser necessárias até seis horas, dependendo da complexidade das imagens e da velocidade do processador. Durante a renderização, o processador pode trabalhar na sua capacidade máxima, o que comprome a sua vida útil. Neste trabalho a vida útil de um processador foi em torno de um ano e, portanto, foram "queimados" três processadores.



Link 3.1– Animação que mostra os orbitais de fronteira HOMO e LUMO do etileno.

Antes de desenvolver esta primeira animação foi necessário criar um conjunto de símbolos. Os símbolos criados para este trabalho têm a mesma função de um alfabeto; eles permitem que as animações em 3D se transformem em uma linguagem química que possa ser entendida por alunos e professores de todo o mundo.

3.1 - Criação de um conjunto de símbolos

Para representar os átomos, adotamos as cores do website http://jmol.sourceforge.net/jscolors/ (Jmol Colors) mostrados na Figura 3.1.

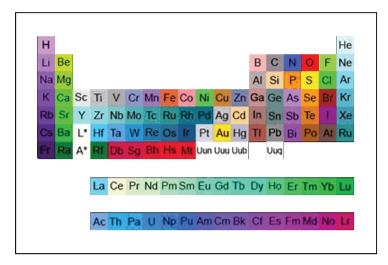


Figura 3.1 – Cores usadas para representar os átomos.

Para representar os orbitais atômicos **s** foram adotados os símbolos mostrados na Figura 3.2:

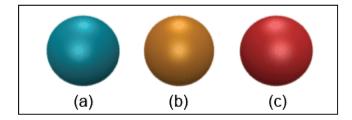


Figura 3.2 – Orbitais atômicos **s**: (a) vazio, (b) semi-preenchido, (c) preenchido.

Para representar os orbitais atômicos p foram adotados os símbolos mostrados na Figura 3.3:

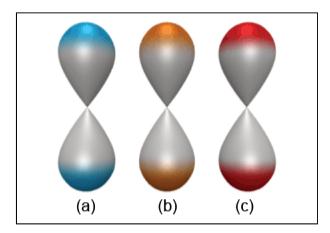


Figura 3.3 – Orbitais atômicos **p**: (a) vazio, (b) semi-preenchido, (c) preenchido.

Para representar os orbitais moleculares π foram adotados os símbolos mostrados na Figura 3.4:

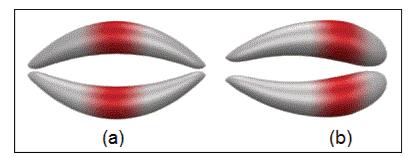


Figura 3.4 – Orbitais moleculares π : (a) preenchido e entre átomos de mesma eletronegatividade, (b) preenchido e entre átomos de eletronegatividades diferentes.

Para representar os orbitais moleculares σ foram adotados os símbolos mostrados na Figura 3.5:

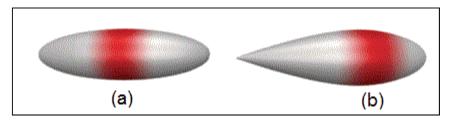


Figura 3.5 - Orbitais moleculares σ: (a) preenchido e entre átomos de mesma eletronegatividade, (b) preenchido e entre átomos de eletronegatividades diferentes.

3.2 - Recursos necessários para desenvolver animações

Para desenvolver animações são necessários programadores, softwares e conceitos, como é mostrado na Figura 3.6.

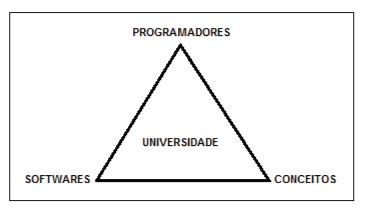


Figura 3.6 – Recursos necessários para desenvolver animações.

O conhecimento do conteúdo é o ponto crítico no desenvolvimento de uma animação porque esta não pode conter erros conceituais. Para eliminar o risco de introduzir erros conceituais numa animação, é necessário o apoio de profissionais com absoluto domínio conceitual. Esses profissionais estão na universidade, porque é lá que se gera e se discute o conhecimento. Isto significa que, para desenvolver animações, é necessária a participação de professores especialistas das diversas áreas da Química.

O programador, por outro lado, não precisa ser especialista em todas as áreas do conhecimento da Química, o que nem seria possível, mas precisa

estar capacitado para conversar com os especialistas de cada assunto e assimilar os conceitos presentes em cada animação. Para desenvolver uma animação não é suficiente apenas que o programador saiba programar; o programador também precisa saber Química.

Para desenvolver uma animação é necessário um software de modelagem e animação em 3D, como o Blender[®], que foi usado neste trabalho. Este software, entretanto, não é suficiente; são necessários vários outros softwares como, por exemplo, o MatLab[®] e o Origin[®], que foram usados para fazer os cálculos dos orbitais.

Para utilização das animações através da internet, é necessário escrever web-pages, o que exige o domínio de softwares como, por exemplo, HTML e PHP. Como web-pages são hipertextos, podem usar hiperlinks, alguns na forma de figuras. Para criar figuras que possam ser usadas como hiperlinks, são necessários softwares de edição de imagem como, por exemplo, o Paint[®] e o Photoshop[®].

Animações com narração exigem o uso de softwares de edição de vídeo como, por exemplo, o Windows Movie Maker[®], além de softwares de edição de som como, por exemplo, o Sony Sound Forge[®].

Estes são apenas alguns softwares que foram utilizados neste trabalho. A lista é bem mais longa, mas os softwares citados já dão uma boa idéia do enorme conhecimento de software que é necessário para o desenvolvimento e a utilização de animações.

3.3 - Desenvolvimento das animações

O desenvolvimento das animações começava com a escolha de um assunto. A escolha, geralmente, recaia sobre um assunto onde se sabe que

os alunos apresentam grande dificuldade de abstração e visualização tridimensional.

Uma vez escolhido o assunto, começávamos a discussão dos conceitos envolvidos e era definida uma estratégia para as animações facilitarem o entendimento dos alunos. O resultado dessas discussões era a criação de um *story-board*, ou seja, um roteiro da animação. A Figura 3.7, por exemplo, mostra uma página do roteiro da inversão da amônia. Nesta parte do roteiro foi discutida a hibridização sp³ da amônia e o que acontece com o par isolado de elétrons ao longo da inversão.

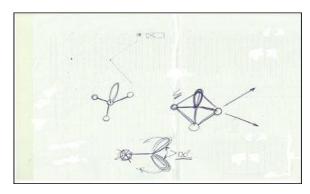


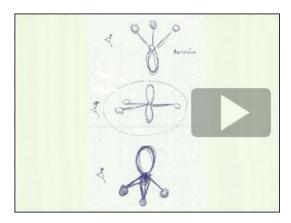
Figura 3.7 – Representação de parte do roteiro para a animação da inversão da amônia, em que se pode observar a definição dos movimentos pretendidos para facilitar o entendimento desta transformação.

Como resultado da discussão sobre a inversão da amônia, ficou decidido que seria dada ênfase para os seguintes aspectos:

- Inserir os átomos da amônia e do orbital com um par de elétrons não compartilhado em um tetraedro, para chamar a atenção para a hibridização sp³;
- Mostrar que na inversão há a passagem por uma situação planar, que corresponde à hibridização sp²;

 Mostrar que, completada a inversão, o par de elétrons não compartilhado encontra-se do outro lado, e a molécula volta a ter hibridização sp³.

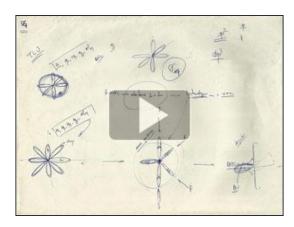
Estes aspectos, transformados em movimento, podem ser vistos na animação do Link 3.2.



Link 3.2 – Inversão na molécula de amônia.

Outro exemplo que pode ser citado para mostrar como era feito o desenvolvimento de uma animação, trata-se da ilustração da fórmula estrutural da molécula de SF₄. Neste caso, o foco da discussão era a repulsão entre os diferentes pares de elétrons, os compartilhados e o não compartilhado, ao redor do átomo central. Devido a esta repulsão, a estrutura do SF₄ trata-se de uma bipirâmide trigonal distorcida, o que dá à molécula a geometria conhecida por "gangorra", como pode ser visto na animação do Link 3.3.

A discussão conceitual exaustiva sempre foi o ponto mais importante no desenvolvimento das animações porque, além de diminuir o tempo na fase de modelagem e animação, resultaria em animações isentas de erros conceituais.



Link 3.3 – Hibridização e geometria na molécula de SF₄.

Para entender melhor a função dos roteiros, vejamos detalhadamente quais foram os conceitos discutidos no roteiro da Figura 3.8, criado para a animação da molécula de CO, interpretada segundo a Teoria do Orbital Molecular, um dos modelos usados para ensinar a ligação covalente. Esta animação é a mais visualizada no canal do YouTube (www.youtube.com/user/m770596) e contava, em outubro de 2013, com mais de 220.000 visualizações.

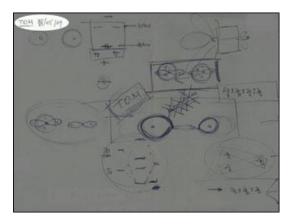


Figura 3.8 - Roteiro da animação da molécula de CO, interpretada segundo a Teoria do Orbital Molecular.

No detalhe da Figura 3.9, podemos observar que foi discutido que a Teoria do Orbital Molecular é um procedimento matemático em que é feita a combinação linear de orbitais atômicos de átomos diferentes. Para o

monóxido de carbono, por exemplo, a combinação linear é feita entre os orbitais atômicos 2s e 2p do carbono e 2s e 2p do oxigênio $(2s_c \pm 2p_c \pm 2s_o \pm 2p_o)$.

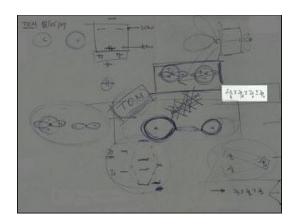


Figura 3.9 – Na Teoria do Orbital Molecular é feita a combinação linear de orbitais atômicos de átomos diferentes.

Como na Teoria do Orbital Molecular não existe hibridização, isto tinha que ser muito bem discutido na confecção do roteiro, como destacado na figura 3.10. Isto foi muito bem enfatizado para que não se cometesse um erro conceitual gravíssimo, que é o de se misturar modelos na discussão de uma mesma molécula. A hibridização, que é a base da Teoria da Ligação de Valência, é a combinação linear de orbitais atômicos de um mesmo átomo.

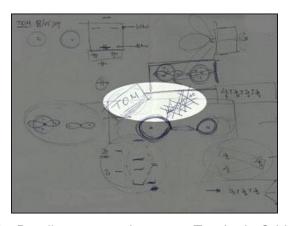


Figura 3.10 - Detalhe mostrando que na Teoria do Orbital Molecular não existe hibridização.

Como o procedimento matemático da combinação linear também pode ser representado de forma de diagrama de níveis de energia, isto também aparece no roteiro que precedeu a animação da molécula de CO, como mostrado na Figura 3.11.

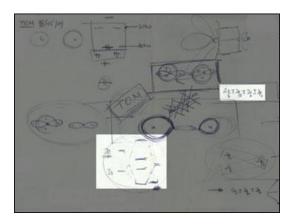


Figura 3.11 – Detalhe da representação da combinação linear na forma de diagrama.

O mesmo procedimento que é usado para fazer a distribuição eletrônica para um átomo também pode ser usado para fazer a distribuição eletrônica para a molécula de monóxido de carbono. O orbital molecular ocupado de mais alta energia é o HOMO da molécula e o orbital molecular desocupado de menor energia é o LUMO da molécula. Esta é a discussão que foi feita e que é mostrada no detalhe da Figura 3.12.

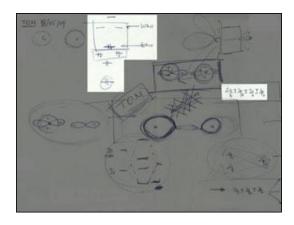


Figura 3.12 - Níveis de energia associados ao HOMO e LUMO da molécula de monóxido de carbono.

Para entender as propriedades e a reatividade da molécula de monóxido de carbono, é necessário imaginar espacialmente onde estão todos os orbitais moleculares. No detalhe da figura 3.13, é mostrada a localização dos orbitais de fronteira fronteira HOMO e LUMO da molécula, responsáveis pela reatividade.

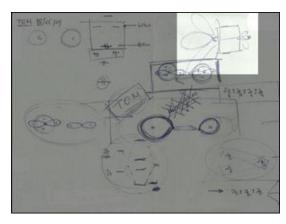


Figura 3.13 – Orbitais de fronteira HOMO e LUMO da molécula de monóxido de carbono.

O diagrama que mostra os níveis de energia para a molécula de monóxido de carbono, mostrado na Figura 3.14, é usado da mesma forma desde o início do século passado. As combinações lineares são representadas neste diagrama através de traços e setas e são fáceis de serem identificadas. Entretanto, o diagrama exige um grande esforço de abstração quando pretende-se imaginar, espacialmente, onde estão todos os orbitais moleculares ao redor dos dois átomos.

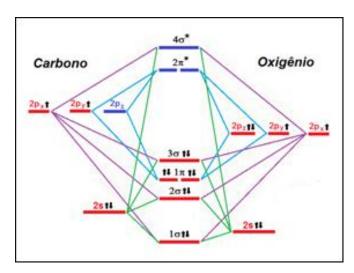
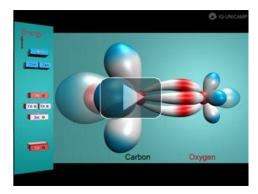


Figura 3.14 – Diagrama dos níveis de energia do monóxido de carbono.

As animações em 3D não pretendem substituir o diagrama de níveis de energia, como alguém poderia pensar; muito pelo contrário, partem desse diagrama para dar-lhe significado físico, como pode ser visto na animação do Link 3.4. Parando a animação nos pontos indicados a seguir, é possível observar que em:

- 00:00, os orbitais 1s saem de cena porque fazem parte do caroço dos átomos e, portanto, não entram na combinação linear;
- 00:20, é feita a combinação linear dos orbitais 2s e $2p_z$ do carbono e 2s e $2p_z$ do oxigênio, resultando na formação dos quatro orbitais σ ;
- 00:30, é feita a combinação linear dos orbitais $2p_y$ do carbono e $2p_y$ do oxigênio, resultando na formação de dois orbitais π ;
- 00:40, é feita a combinação linear dos orbitais $2p_x$ do carbono e $2p_x$ do oxigênio, resultando na formação de outros dois orbitais π ;
- 00:40, é mostrado o diagrama resultante da combinação linear;

- 00:50, é feita a associação dos "traços" com os orbitais moleculares correspondentes;
- 01:30, é mostrado que a região do lado do oxigênio é rica em elétrons e a região do lado do carbono é pobre em elétrons. O tamanho dos orbitais ao redor dos átomos é proporcional às suas energias no diagrama de níveis de energia. A molécula reage como ácido e base de Lewis pelo lado do carbono, porque a energia mais alta dos orbitais favorece a interação com orbitais de outra espécie.



Link 3.4 – Animação enfatizando o significado físico dos "traços e setas" do diagrama dos níveis de energia do monóxido de carbono.

Estes são apenas alguns poucos exemplos de como os roteiros que precediam as animações eram discutidos e elaborados. Como já dissemos, esta era uma parte fundamental do trabalho, imprescindível para o posterior entendimento e aproveitamento das animações.

O planejamento deste trabalho também envolveu a escolha dos assuntos para os quais seriam desenvolvidas as animações em 3D, a aplicação em disciplinas no IQ-UNICAMP, as formas de avaliação e a disponibilização através da internet.

3.4 - Critério de escolha dos assuntos e formas de avaliação

A escolha dos assuntos foi feita a partir de informações de professores sobre os conceitos de maior dificuldade de visualização tridimensional dos alunos.

Como se sabe que a dificuldade de visualização tridimensional dos alunos tem origem nas figuras bidimensionais dos livros didáticos, que exigem um enorme esforço de visualização tridimensional, foi feito um levantamento dos livros que são usados nas disciplinas oferecidas pelo Instituto de Química da UNICAMP para localizar essas dificuldades. Entre esses livros estão: (Santos Filho, 2000), (Shriver e Atkins, 2003), (Huheey et *al.*, 1993), (Kotz et *al.*, 2006), (Jones e Atkins, 2002), (Wells, 1962), (Greenwood e Earnshaw, 1997), e (Fleming et *al.*,1998).

Ao iniciarmos o planejamento deste trabalho logo percebemos que, para poder avaliar a contribuição das animações que iríamos desenvolver, precisaríamos aplicá-las em algumas disciplinas oferecida pelo Instituto de Química da Unicamp. Escolhemos uma disciplina de Química Geral por alguns motivos, dentre eles:

- Como as disciplinas de Química Geral fazem parte da grade curricular de vários cursos como por exemplo, Química, Farmácia, Física, e Engenharias, isto facilitaria a aplicação das animações porque estas disciplinas são oferecidas todos os semestres;
- A avaliação das animações por alunos de cursos diferentes permitiria obter uma maior diversidade de dados para serem analisados;
- Quando as disciplinas de Química Geral são oferecidas no primeiro semestre, elas estão na interface entre os conceitos químicos do ensino médio e do ensino superior. A aplicação das animações nessa interface, facilitaria a avaliação da contribuição das animações para a

ampliação do entendimento dos conceitos químicos com que os alunos chegam à universidade.

Além da avaliação da utilização das animações em aulas presenciais, optou-se pela avaliação através da internet. Como as animações podem ser usadas em instituições de ensino de todo o planeta através da internet, isso permite avaliar o interesse dos professores e alunos. Essa avaliação foi feita através da estatística e dos comentários fornecidos pelo website www.quimica3d.com e pelo canal do YouTube www.youtube.com/user/m770596, onde as animações foram disponibilizadas.

3.5 - Disponibilização das animações

As animações foram disponibilizadas no website www.quimica3d.com e no canal do YouTube www.youtube.com/user/m770596 para que pudessem ser visualizadas, não apenas pelos professores e alunos do IQ/UNICAMP, mas por professores e alunos de qualquer parte do mundo.

Os originais das animações também foram disponibilizadas para download no website www.quimica3d.com, para poderem ser usadas em aulas presenciais pelos professores. A disponibilização das animações para download mostrou-se necessária por alguns motivos, entre eles:

- Muitas salas de aula em várias partes do planeta ainda não estão conectadas à internet:
- A velocidade da internet de alguns servidores pode ser baixa para a reprodução das animações em alguns pontos do planeta ou em horários de pico;
- As cópias originais das animações disponibilizadas para download oferecem a melhor qualidade possível.

4 - DESENVOLVIMENTO DO TRABALHO

As animações deste trabalho foram desenvolvidas utilizando o software de modelagem em 3D Blender[®]. Este software, de código aberto e gratuito, é atualmente um dos recursos computacionais mais avançados para a produção de imagens tridimensionais. Apesar do Blender[®] ser um software de modelagem e animação em 3D que não foi concebido específicamente para modelar moléculas como, por exemplo, o <u>Kinemage</u> (Kinemage), <u>Rasmol</u> (Rasmol), e <u>Jmol</u> (Jmol), mostrou-se bastante apropriado para esta finalidade.

As animações deste trabalho foram planejadas para serem usadas em aulas presenciais e, por este motivo, são desprovidas de legendas e narração. A ausência de legendas e narração permite que os professores criem seu próprio discurso com riqueza de detalhes conceituais. Para os alunos, as animações pretendem facilitar a visualização tridimensional e estimular o desenvolvimento da capacidade de abstração. Em outros ambientes, tais como livros eletrônicos e websites, é desejável que as animações tenham narração e/ou legendas, de preferência em inglês.

Um exemplo muito claro que pode ser citado para mostrar como as animações em 3D podem facilitar a visualização tridimensional e estimular o desenvolvimento da capacidade de abstração, é o trecho de Huheey et *al.* (1993):

A reação mais simples a que uma molécula pode estar sujeita, é a inversão dos átomos de hidrogênio em torno do átomo de nitrogênio, de maneira análoga à inversão de um guarda-chuva num vento forte (Figura 4.1).

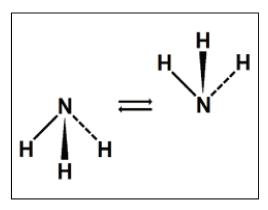
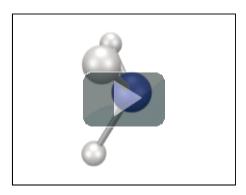


Figura 4.1 – Inversão dos átomos de hidrogênio da amônia em torno do átomo de nitrogênio.

Como podemos observar, para entender como ocorre a inversão dos átomos de hidrogênio em torno do átomo de nitrogênio é necessário criar mentalmente imagens tridimensionais. Para ajudar o leitor a criar essas imagens, Huheey et *al.* (1993) usaram uma analogia e uma representação gráfica. O autor e colaboradores esperam que o leitor transforme a representação gráfica da Figura 4.1 em imagens tridimensionais parecidas com as de um guarda-chuva num vento forte. Essas imagens podem ser criadas diretamente utilizando software de modelagem e animação em 3D, como podemos ver na animação do Link 4.1.

Depois de assistir a animação do Link 4.1, é interessante observar a limitação da analogia, que não consegue mostrar o movimento contínuo de "vai e vem" na inversão. Esse movimento contínuo, reversível, é tradicionalmente representado através dos símbolos da Figura 4.1.

Essa é uma dificuldade geralmente encontrada nos livros didáticos - a representação de movimento através de figuras estáticas - dificuldade essa que é facilmente solucionada com as animações em 3D.

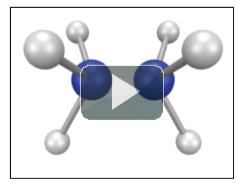


Link 4.1 – Animação mostrando a inversão dos átomos de hidrogênio em torno do átomo de nitrogênio.

Os autores ainda afirmam que:

Alguém poderia argumentar que a inversão da amônia não representa uma reação porque o "produto" é idêntico ao "reagente" e que nenhuma ligação foi formada ou quebrada no processo.

Para identificar que o "produto" é idêntico ao "reagente" é necessário criar imagens tridimensionais que permitam "enxergar" a sobreposição do "produto" e do "reagente". Com as animações em 3D, esse esforço de visualização tridimensional é literalmente eliminado, como pode ser confirmado na animação do Link 4.2.

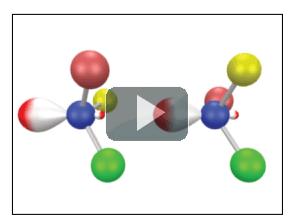


Link 4.2 – Animação mostrando que, na inversão da amônia, o reagente é igual ao produto.

Semântica à parte, o processo ilustrado é de interesse químico e digno de estudo químico. A

racemização de material opticamente ativo pode ocorrer através do mecanismo apresentado. Deve ser observado que a barreira de energia para inversão é fortemente dependente da natureza do átomo central e de seus substituintes. Como as imagens especulares dessas moléculas não se sobrepõem (i.e., elas são quirais), elas são potencialmente opticamente ativas, e a separação dos enantiômeros é, pelo menos, teoricamente possível.

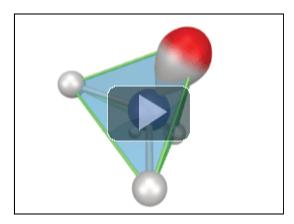
Podemos notar que a dificuldade de visualização tridimensional está aumentando. É exigido que o leitor crie imagens tridimensionais mentalmente para acompanhar o texto, ou seja, é exigido que o leitor transforme as palavras do texto em imagens. Este é o caso mais comum e é onde os alunos encontram a maior dificuldade. Os softwares de modelagem e animação em 3D permitem transformar palavras em imagens, e é onde têm a sua maior aplicação, como mostra a animação do Link 4.3:



Link 4.3 – Animação mostrando que as imagens especulares de aminas com três substituintes diferentes não se sobrepõem, i.e., elas são quirais.

Como o estado de transição no processo de inversão envolve uma hibridização sp² planar em torno do átomo central, a barreira de inversão estará relacionada com a facilidade com que a molécula pode ser convertida de seu estado piramidal fundamental.

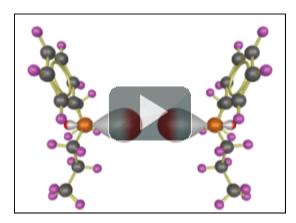
É exigido que o leitor imagine uma hibridização sp³, contida em uma pirâmide, passar por uma hibridização sp² planar, e depois voltar à hibridização sp³. Este movimento, que exige um certo grau de visualização tridimensional, é mostrado na animação do Link 4.4.



Link 4.4 – Animação da inversão da amônia, passando por uma hibridização sp².

Por exemplo, a barreira de inversão da etilpropilfenilfosfina é de cerca de 120 kJ/mol. Isto é suficiente para permitir a separação dos isômeros óticos, e sua racemização pode ser feita a seguir por técnicas clássicas.

Para entender o significado físico da barreira de inversão é necessário visualizar o impedimento estérico da etilpropilfenilfosfina. Criar mentalmente uma imagem tridimensional desta molécula, por si só, já é uma tarefa difícil, imaginar o seu impedimento estérico na hibridização sp², é ainda mais difícil. E para complicar mais, o leitor deve criar mentalmente as imagens especulares da inversão. A animação do Link 4.5 deixa claro como a modelagem e animação em 3D da etilpropilfenilfosfina ajuda a criar mentalmente imagens tridimensionais.



Link 4.5 – Animação ilustrando a inversão na etilpropilfenilfosfina.

Este foi apenas um exemplo adaptado a partir de um texto já consolidado e usado da mesma maneira há mais de quarenta anos.

4.1 - Assuntos contemplados

Os assuntos contemplados e o número de animações por assunto foram: Teoria do Orbital Atômico (3), distribuição eletrônica (1), hibridização (3), ligação covalente: Teoria do Orbital Molecular (2) e Teoria da Ligação de Valência (5), Teoria VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion): estruturas de Lewis, geometria e hibridação (1), os 7 sistemas cristalinos (1), os 14 retículos de Bravais (1), celas unitárias de compostos iônicos (6), empacotamentos de compostos iônicos: Hexagonal Denso, Cúbico Denso, Empacotamento Cúbico de Face-centrada, Empacotamento Cúbico de Corpo-centrado e Empacotamento Cúbico Simples (5), retículos cristalinos de metais: Hexagonal Denso, Cúbico de Face-centrada, Cúbico de Corpocentrado e Cúbico Simples (4), retículos cristalinos de metais (4), buraco tetraédrico (1), buraco octaédrico (1), transformações químicas (1), catálise (5), polimerização(1), ligação iônica: interações eletrostáticas (1).

As animações foram desenvolvidas para serem usadas nas disciplinas de Química Geral e, dentre os conteúdos dessa disciplina que poderiam ser abordados, foi dada ênfase à ligação química.

4.2 - Ligação iônica

A forma como a ligação iônica é tradicionalmente ensinada, baseada na transferência de elétrons entre átomos isolados para formar o par iônico, pode ter sido criada a partir do famoso artigo de Lewis de 1916, <u>The Atom and the Molecule</u> (Lewis, 1916). Nesse artigo, Lewis considera o cloreto de sódio como sendo uma molécula extremamente polar, pelo que podemos inferir que a formação do par iônico a partir de átomos isolados esteja relacionada com esse artigo.

Hoje sabemos que os íons não formam moléculas, sabemos que se encontram agrupados em retículos cristalinos, mas quando Lewis escreveu o artigo, esse conhecimento ainda não existia. A coesão desses retículos devese à interação eletrostática entre um íon e todos os demais íons do retículo cristalino e não apenas à interação eletrostática do par iônico. Se quisermos dar um significado físico à ligação iônica, devemos entendê-la como sendo a força resultante a que cada íon do retículo cristalino está submetido, devido à atração de todos os íons de carga oposta e à repulsão de todos os íons de mesma carga. Cada íon está submetido a uma força resultante atrativa.

A ligação iônica, ensinada a partir do par iônico, pressupõe a existência de átomos isolados. Os únicos átomos isolados da tabela periódica são os gases nobres, todos os outros átomos se encontram combinados. Partir de átomos isolados para explicar a formação de íons através da transferência de elétrons é, portanto, um grave erro conceitual.

Ao fazer uma <u>revisão dos modelos do átomo</u>, dos Gregos a Einstein, é possível notar que o átomo geralmente aparece isolado quando é explicada a

sua estrutura. Talvez seja por esse motivo que os professores não questionem a existência de átomos isolados, quando ensinam a ligação iônica baseada no par iônico.

Quando a primeira tentativa de explicar a ligação química foi proposta por Lewis, a difração de raio-X ainda não estava suficientemente desenvolvida. Não era possível, portanto, saber que os compostos iônicos tinham estrutura cristalina. Para Lewis, só existiam átomos e moléculas. O conhecimento de que Lewis dispunha em 1916 para formular sua teoria, estava restrito à descoberta do elétron por J.J. Thomson em 1897, e à descoberta do núcleo por Ernest Rutherford em 1911. Como a técnica de difração de raio-X estava no início em 1921 (Bragg et *al.*, 1921), podemos entender que em 1916 Lewis não poderia conhecer a estrutura cristalina dos compostos iônicos e, consequentemente, não poderia diferenciar a estrutura reticular de um composto iônico da estrutura de uma molécula.

A estratégia de ensinar a ligação iônica que é proposta neste trabalho, além de corrigir a distorção do par iônico, cria a necessidade de ensinar os empacotamentos, as celas unitárias, e os retículos cristalinos, encontrados nos diversos compostos iônicos.

Para mostrar as vantagens desta estratégia, faremos uma revisão de como a ligação iônica é ensinada e depois apresentaremos os conceitos que são necessários para ensinar a ligação iônica a partir do retículo cristalino. Veremos que a principal consequência de ensinar a ligação iônica através do retículo cristalino é que o aluno já aprende os conceitos que são necessários para as futuras disciplinas de Química de Estado Sólido.

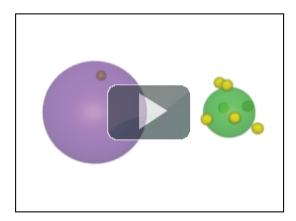
A argumentação usada para ensinar a ligação química no ensino médio é semelhante em vários livros didáticos e, segundo (Carvalho, 1997), tem a seguinte estrutura:

- As substâncias químicas são formadas por átomos de elementos químicos unidos por ligações químicas. A água, por exemplo, é formada por dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio que se mantêm unidos através de ligações químicas;
- As ligações químicas formam-se para aumentar a estabilidade dos átomos. Assim, o conjunto H-O-H é mais estável que os átomos isolados;
- As únicas substâncias formadas por átomos isolados são os gases nobres;
- Todos os outros átomos isolados são instáveis e estão sempre unidos a outros átomos através de ligações químicas;
- Se os gases nobres são estáveis e formados por átomos isolados, deve haver alguma particularidade em suas configurações eletrônicas que justifique esse comportamento;
- Todos os gases nobres são estáveis porque têm oito elétrons na camada de valência (ou dois se ela for a camada K);
- Existe uma lei geral segundo a qual todos os sistemas da natureza tendem a aumentar sua estabilidade e isso só pode ser conseguido se os átomos adquirirem a configuração estável;
- A configuração estável dos átomos só pode ser conseguida através do compartilhamento de elétrons entre os átomos ou da transferência de elétrons de um átomo para outro;
- Esta teoria, proposta em 1916 pelo químico norteamericano Gilbert Newton Lewis e pelo físico alemão Walther Kossel, e complementada em 1919 pelo físico norte-americano Irving Langmuir, ficou conhecida como Teoria de Lewis.

Canto e Peruzzo (2002), apresentam uma estrutura de argumentação semelhante para a formação de compostos iônicos:

Antes de sódio e cloro se unirem para formar NaCl, ambos os átomos estavam eletricamente neutros (carga elétrica total zero), porém não estavam com o octeto completo (não-estáveis), pois não possuiam oito elétrons na última camada. Depois da união dos dois, eles deixaram de ser eletricamente neutros: agora são íons Na⁺ e Cl⁻. O conjunto formado pelos íons Na⁺ e Cl⁻ é estável, pois ambos passam a ter oito elétrons na última camada.

A estrutura da argumentação encontrada nos livros didáticos para explicar a ligação iônica, também é encontrada nas animações disponíveis na internet, como a que é mostrada no Link 4.6.



Link 4.6 – Animação amplamente difundida no ensino médio para ensinar a ligação iônica
Fonte: http://www.youtube.com/watch?v=QqjcCvzWwww.

A argumentação para ensinar a ligação iônica, baseada na regra do octeto e na transferência de elétrons entre átomos neutros, está tão difundida e é tão forte, que experimentos, como o que é mostrado no Link 4.7 são produzidos para mostrar que basta colocar "átomos" de sódio na presença de "átomos" de cloro, para que aconteça a "transferência explosiva" de elétrons dos átomos de sódio para os átomos de cloro para formar cloreto de sódio.



Link 4.7 - Vídeo usado para ensinar a ligação iônica através da formação de cloreto de sódio, onde a reação ocorre espontâneamente Fonte: http://www.youtube.com/watch?v=yjge1WdCFPs.

Apesar do autor do vídeo do Link 4.7 ter tido a intenção de ser didático, sabemos que a reação química do vídeo é interpretada erroneamente. A reação entre sódio metálico e cloro gasoso não ocorre espontâneamente à temperatura ambiente (Sodium in chlorine gas) e, levando em consideração que o contato de sódio metálico com água produz uma reação química altamente exotérmica (Sodium and water), concluimos que havia água misturada com a areia no fundo do balão.

Como o autor da animação do Link 4.6 e do vídeo do Link 4.7 é o mesmo, fica clara a sua intenção didática de explicar a "transferência de elétrons de um átomo para outro" para alcançar a configuração estável. Isto está presente, tanto na animação quanto no vídeo, e é concordante com a argumentação encontrada nos livros didáticos (Carvalho, 1997) e (Canto e Peruzzo, 2002).

O autor do vídeo do Link 4.8 (Reaction of sodium & chlorine) procura corrigir o erro do autor da animação do vídeo do Link 4.7, mostrando que a reação entre sódio metálico e cloro gasoso não é espontânea, ao adicionar uma gota de água ao sódio para iniciar a reação. O vídeo do Link 4.8, apesar

de corrigir o erro da espontaneidade da reação do Link 4.7, não explica como ocorre a transferência de elétrons entre o sólido metálico e o cloro gasoso, induzindo ao erro de que a transferência de elétrons ocorre entre átomos isolados e neutros.



Link 4.8 – Vídeo usado para ensinar a ligação iônica através da formação de cloreto de sódio, com adição de água para iniciar a reação Fonte: http://www.youtube.com/watch?v=Mx5JJWI2aaw.

Para enfatizar que a formação de cloreto de sódio não ocorre através da transferência de elétrons entre átomos isolados e neutros, faremos uma análise das transformações químicas que ocorrem no experimento do vídeo do Link 4.8.

Inicialmente ocorre a reação entre o sódio metálico e água. Esta reação, por ser altamente exotérmica, leva à formação de íons no estado gasoso:

$$Na_{(s)} + H_2O_{(l)} \rightarrow Na^+_{(q)} + OH^-_{(q)} + \frac{1}{2} H_{2(q)}$$

O calor liberado pela reação inicial desencadeia as reações relacionadas a seguir:

$$CI_{2(g)} + 2 OH^{-}_{(g)} \rightarrow CIO^{-}_{(g)} + CI^{-}_{(g)} + H_2O_{(g)}$$
 $CIO^{-}_{(g)} + H_2O_{(g)} \rightarrow HCIO_{(g)} + OH^{-}_{(g)}$
51

$$HCIO_{(g)} \rightarrow HCI_{(aq)} + \frac{1}{2} O_{2(g)}$$
 $Na^{+}_{(g)} + CI^{-}_{(g)} \rightarrow NaCI_{(s)}$
 $\frac{1}{2} H_{2(q)} + \frac{1}{4} O_{2(q)} \rightarrow \frac{1}{2} H_{2}O_{(q)}$

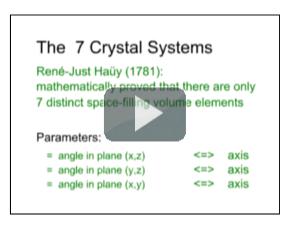
Somando todas as etapas, temos a equação da reação:

$$Na_{(s)} + \frac{1}{2} H_2O_{(l)} + Cl_{2(g)} \rightarrow NaCl_{(s)} + HCl_{(g)} + \frac{1}{4} O_{2(g)}$$

Como mencionamos anteriormente, a transferência de elétrons entre átomos neutros para formar o par iônico é uma distorção que foi introduzida, desnecessariamente, para ensinar a ligação iônica. Para eliminar essa distorção, as interações eletrostáticas entre os íons devem ser entendidas no ambiente do retículo cristalino, como mostraremos a seguir.

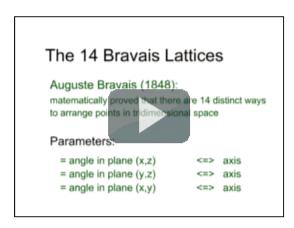
4.3 - Retículos cristalinos

Apesar dos cristais serem admirados por sua simetria e regularidade desde a antiguidade, os primeiros estudos científicos só foram iniciados por Nicolas Steno em 1669, que mostrou que os ângulos entre as faces são os mesmos em cristais do mesmo tipo, e por René Just Haüy em 1784, que demonstrou matematicamente que existem apenas sete formas volumétricas para preencher o espaço, como mostra a animação do Link 4.9. Quando se descobriu, experimentalmente, que os cristais são formados por um arranjo tridimensional de íons, verificou-se que os estudos de Haüy, apesar de terem sido teóricos, estavam corretos.



Link 4.9 – Os 7 sistemas cristalinos.

Um estudo completo das simetrias possíveis de um cristal foi feito por Auguste Bravais em 1848. Ele provou matematicamente que existem quatorze formas diferentes de organizar pontos tridimensionalmente, como mostra a animação do Link 4.10.



Link 4.10 – Os 14 retículos de Bravais.

Estes estudos, apesar de considerarem corretamente que os cristais eram formados por esferas organizadas tridimensionalmente, eram teóricos e a comprovação experimental só seria possível a partir da descoberta do raio-X por Wilhelm Conrad Röntgen em 1895.

Apenas em 1913 é que foi determinada a primeira estrutura cristalina, a do cloreto de sódio, utilizando cristalografia de raio-X (Bragg, 1913). A

resolução da estrutura cristalina do cloreto de sódio, feita por William Lawrence Bragg e seu pai William Henry Bragg, era simples e mostrava apenas a simetria em uma dimensão.

Esta leitura histórica permite entender porque Lewis, em 1916, se referiu ao cloreto de sódio como uma molécula extremamente polar. Com certeza Lewis conhecia os resultados da cristalografia de raio-X, porque os Bragg compartilharam o prêmio Nobel de Física em 1915, por seu trabalho em cristalografia. Isto mostra que, apesar do trabalho inicial da cristalografia de raio-X revelar a existência de uma estrutura organizada na matéria (Bragg et al., 1921), essa técnica ainda não estava suficientemente desenvolvida para diferenciar a ligação iônica da ligação covalente.

Nas décadas seguintes, com métodos experimentais e computacionais, foi possível determinar as posições tridimensionais dos íons na cela unitária, o que permitiu calcular as interações eletrostáticas nas estruturas iônicas.

A formação do par iônico a partir da transferência de elétrons entre átomos neutros e isolados, além de ser um grave erro conceitual, induz o aluno a pensar que a ligação iônica se establece entre dois íons de carga oposta. Na natureza, nem mesmo em laboratório, não existem compostos iônicos formados por apenas dois íons; os compostos iônicos são formados por muitos íons que estão organizados em retículos cristalinos. Em um minúsculo cubo de NaCl de apenas 1cm³ há mais íons do que pessoas em todo o planeta. Para se entender a verdadeira natureza da ligação iônica é necessário conhecer as interações eletrostáticas entre íons de carga oposta, e também de mesma carga, na estrutura cristalina dos compostos iônicos.

4.4 - Interações eletrostáticas nos compostos iônicos

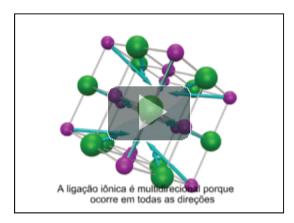
Para abordar as interações eletrostáticas que ocorrem na estrutura cristalina dos compostos iônicos, usaremos o cloreto de sódio como exemplo.

A produção de cloreto de sódio pode ser feita em laboratório a partir de sódio metálico, cloro gasoso e água, como vimos em dois experimentos diferentes, (Reaction of sodium & chlorine) e (Sodium in chlorine gas). Esta forma de produzir cloreto de sódio, entretanto, tem apenas interesse científico. Industrialmente, a produção de cloreto de sódio é feita a partir da água dos oceanos, onde os íons Na⁺ e Cl⁻ já se encontram disponíveis.

Não é fundamental, para este trabalho, conhecer como se formaram os íons de sódio e cloro, nem como chegaram nos oceanos — a principal fonte de obtenção de cloreto de sódio. Por se encontrarem em concentrações baixas, as interações eletrostáticas entre esses íons são insuficientes para formar cristais de cloreto de sódio. As interações ocorrem preferencialmente com as moléculas de água que, por serem polares, solvatam os íons de Na⁺ e Cl⁻ (Dissociation of salt). Os íons, por estarem solvatados, não podem aproximar-se e interagir eletrostáticamente para formar retículos cristalinos. Retirando água do oceano e represando-a, à medida que sofre evaporação natural por ação da luz do sol, a solvatação torna-se menos efetiva, permitindo que os íons se aproximem. Ao se aproximarem, os íons interagem eletrostáticamente e se organizam num retículo cristalino. Cada íon está submetido à força de atração eletrostática dos íons de carga oposta e à força de repulsão eletrostática dos íons de mesma carga.

Como os íons ocupam posições bem definidas no retículo cristalino, é possível calcular, pela Lei de Coulomb, todas as forças de atração e repulsão que atuam sobre cada íon do retículo cristalino e determinar que essa força resultante é de atração. Essa força resultante é vetorial e, para cada íon do retículo cristalino, tem módulo, direção e sentido diferente, o que caracteriza

a ligação iônica como sendo multidirecional, como pode ser visto no modelo clássico eletrostático da ligação iônica do Link 4.11.



Link 4.11 – Modelo clássico eletrostático da ligação iônica.

Se, por um lado, a força eletrostática resultante permite entender a força atrativa entre cada íon e os demais íons do retículo cristalino, por outro lado, se calcularmos a energia reticular veremos que a formação dos compostos iônicos é termodinâmicamente favorável.

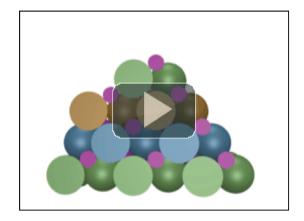
Como as forças eletrostáticas e a energia reticular estão diretamente associadas à organização tridimensional dos íons no composto iônico, para ter um entendimento completo da ligação iônica, é necessário conhecer a organização dos íons no retículo cristalino.

4.4.1 - Empacotamento cúbico denso (ABCABC)

O empacotamento de íons é o modelo consolidado na literatura para mostrar como se forma o retículo cristalino. Segundo este modelo, os compostos iônicos são formados por camadas sobrepostas de ânions, com os cátions ocupando os interstícios entre os ânions. O cloreto de sódio, por exemplo, é formado pela sobreposição de camadas de ânions na forma ABCABC. Esta sobreposição de camadas também é chamada de empacotamento cúbico denso.

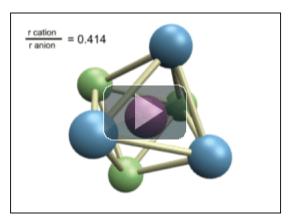
Desconhecemos quem criou os termos "empacotamento" e "sobreposição de camadas", mas quem os criou, usou uma analogia para facilitar a visualização tridimensional dos diferentes retículos cristalinos. Esses termos, entretanto, podem induzir ao erro, uma vez que as "camadas" de íons de mesma carga não podem ser físicamente separadas para serem "sobrepostas". Nas animações usou-se o modelo consolidado de "camadas sobrepostas", mas deve ser feita a ressalva de que essa separação não tem significado físico.

Os espaços vazios entre os ânions também são chamados de buracos e no cloreto de sódio, os cátions ocupam buracos octaédricos. O empacotamento, a ocupação dos buracos pelos cátions e a forma geométrica cúbica da cela unitária são mostrados na animação do Link 4.12.



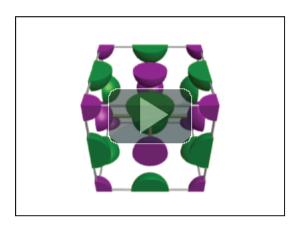
Link 4.12 – Empacotamento cúbico denso (ABCABC) do cloreto de sódio.

O buraco octaédrico é definido pela figura geométrica delimitada pela união dos centros dos ânions vizinhos a um cátion, como mostra a animação do Link 4.13. É importante observar que a geometria dos buracos é determinada pela razão entre o raio do cátion e do ânion.



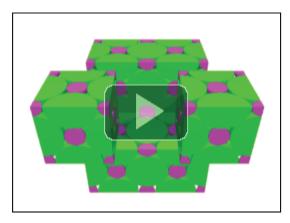
Link 4.13 – Buraco octaédrico.

Além do empacotamento, outra forma de mostrar como se forma o retículo cristalino é através da repetição tridimensional da cela unitária. Todo empacotamento contém uma unidade elementar chamada de cela unitária, como pode ser visto na animação do Link 4.14.



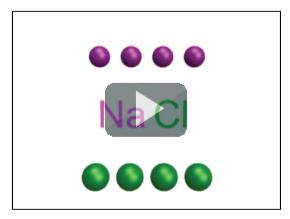
Link 4.14 – Cela unitária do cloreto de sódio.

A repetição tridimensional da cela unitária forma o retículo cristalino, como pode ser visto na animação do Link 4.15.



Link 4.15 – Retículo cristalino do cloreto de sódio.

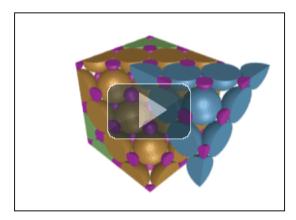
Além da repetição tridimensional, a cela unitária também contém outra informação importante – a relação estequiométrica do composto iônico. A fórmula química NaCl, origina-se na relação estequiométrica da cela unitária do cloreto de sódio, que é formada por quatro cátions e quatro ânions, o que dá a relação de 1:1, como mostra a animação do Link 4.16.



Link 4.16 – Relação estequiométrica da cela unitária do cloreto de sódio.

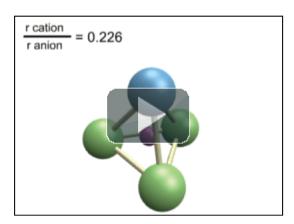
A animação do Link 4.17 mostra que a repetição tridimensional da cela unitária forma o retículo cristalino, e que no retículo cristalino estão contidas as camadas de íons que formam o empacotamento do cloreto de sódio. Esta animação enfatiza que o retículo cristalino pode tanto ser representado pela

sobreposição de camadas, quanto pela repetição tridimensional da cela unitária.



Link 4.17 – Da cela unitária ao empacotamento do cloreto de sódio.

Além dos buracos octaédricos, os cátions também podem ocupar os buracos tetraédricos no empacotamento cúbico denso. O buraco tetraédrico é definido pela figura geométrica delimitada pela união dos centros dos ânions vizinhos a um cátion, como mostra a animação do Link 4.18. A razão entre o raio do cátion e do ânion é teoricamente igual a 0.226.



Link 4.18 - Buraco tetraédrico.

A esfalerita, (Zn,Fe)S, é um exemplo onde os cátions de zinco e de ferro ocupam os buracos tetraédricos. Sua estrutura cristalina pode ser vista nos links a seguir:

- Empacotamento cúbico denso (ABCABC) da esfalerita (Zn,Fe)S;
- Cela unitária e relação estequiométrica da esfalerita;
- Retículo cristalino da esfalerita;
- Da cela unitária ao empacotamento da esfalerita.

4.4.2 - Empacotamento hexagonal denso (ABAB)

Para apresentar o empacotamento hexagonal denso com cátions ocupando buracos tetraédricos, usaremos como exemplo a wurtzita, (Zn,Fe)S, que, coincidentemente, tem a mesma fórmula química da esfalerita. Este é um caso raro de alotropria na Química Inorgânica onde dois compostos iônicos com a mesma fórmula química têm empacotamentos diferentes e, consequentemente, celas unitárias e retículos cristalinos diferentes. Sua estrutura cristalina pode ser vista nos links a seguir:

- Empacotamento e cela unitária da wurtzita (Zn,Fe)S;
- Retículo cristalino da wurtzita (Zn,Fe)S.

Para apresentar o empacotamento hexagonal denso com cátions ocupando buracos octaédricos, usaremos como exemplo o rutilo, TiO₂. Sua estrutura cristalina pode ser vista nos links a seguir:

- Empacotamento hexagonal denso (ABAB) do dióxido de titânio;
- Cela unitária e relação estequiométrica do dióxido de titânio;
- Retículo cristalino do dióxido de titânio;
- <u>Da cela unitária ao empacotamento do dióxido de titânio.</u>

4.4.3 - Empacotamento cúbico simples (AAA)

Para apresentar o empacotamento cúbico simples de face-centrada, usaremos como exemplo a fluorita, CaF₂. Sua estrutura cristalina pode ser vista nos links a seguir:

- Empacotamento cúbico simples (AAA) de face-centrada da fluorita;
- Buraco do empacotamento cúbico simples de face-centrada;
- Cela unitária e relação estequiométrica da fluorita;
- Retículo cristalino da fluorita;
- Da cela unitária ao empacotamento da fluorita;
- Coordenação da fluorita.

Para apresentar o empacotamento cúbico simples de corpo-centrado, usaremos como exemplo o cloreto de césio. Sua estrutura cristalina pode ser vista nos links a seguir:

- Empacotamento cúbico simples de corpo-centrado do cloreto de césio;
- Retículo cristalino do cloreto de césio.

Estes três empacotamentos são os mais comuns, mas existem ainda alguns compostos iônicos que apresentam retículos desconhecidos ou irregulares.

4.5 - Metais

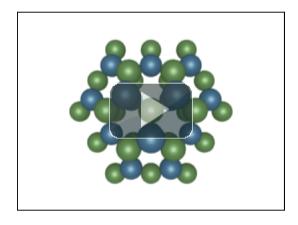
Os metais, a exemplo dos compostos iônicos, também apresentam estrutura cristalina. Os átomos estão organizados espacialmente de forma a minimizar o espaço vazio. Essa forma eficiente de ocupar o espaço conduz, basicamente, a três maneiras diferentes de empacotar os átomos: o empacotamento hexagonal denso, o empacotamento cúbico denso, e o empacotamento cúbico de corpo-centrado, como mostra a animação do Link 4.19.



Link 4.19 – Empacotamentos dos metais.

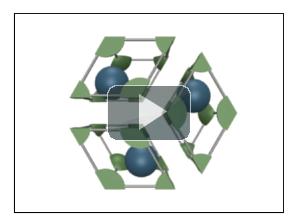
4.5.1 - Empacotamento hexagonal denso (HCP)

O empacotamento hexagonal denso, mostrado na animação do Link 4.20, é formado por camadas de cátions sobrepostas, que se repetem na forma ABAB.



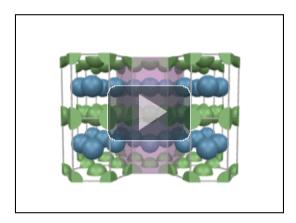
Link 4.20 – Empacotamento hexagonal denso.

A cela unitária do empacotamento hexagonal denso é mostrada na animação do Link 4.21. É comum ver a associação entre o prisma de base hexagonal e a cela unitária deste empacotamento. Este prisma, entretanto, é formado por três celas unitárias.



Link 4.21 – Cela unitária do empacotamento hexagonal denso.

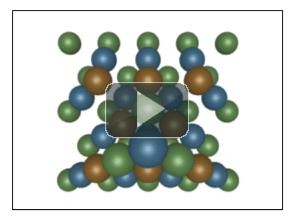
A repetição tridimensional da cela unitária do empacotamento hexagonal denso forma o retículo cristalino mostrado na animação do Link 4.22.



Link 4.22 – Estrutura cristalina do empacotamento hexagonal denso.

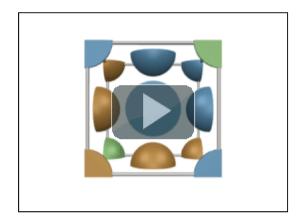
4.5.2 - Empacotamento cúbico denso

O empacotamento cúbico de face-centrada, também conhecido por empacotamento cúbico denso, é formado por camadas sobrepostas de cátions que se repetem na forma ABCABC, como mostra a animação do Link 4.23.



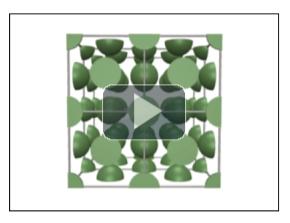
Link 4.23 – Empacotamento cúbico de face-centrada (FCC) ou empacotamento cúbico denso.

A cela unitária do empacotamento cúbico denso é mostrada na animação do Link 4.24.



Link 4.24 – Cela unitária do empacotamento cúbico de face-centrada.

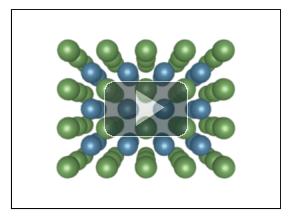
A repetição tridimensional da cela unitária do empacotamento cúbico denso é mostrada na animação do Link 4.25.



Link 4.25 – Estrutura cristalina do empacotamento cúbico de facecentrada.

4.5.3 - Empacotamento cúbico de corpo centrado

O empacotamento cúbico de corpo centrado, mostrado na animação do Link 4.26, é formado por camadas sobrepostas de cátions que se repetem na forma ABAB. É interessante observar que este empacotamento é diferente do empacotamento hexagonal denso porque, apesar das camadas se repetirem da forma ABAB em ambos os empacotamentos, os cátions ocupam posições diferentes no retículo cristalino.



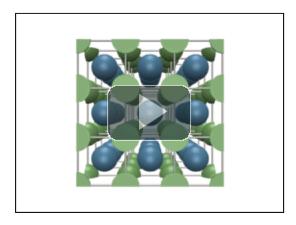
Link 4.26 – Empacotamento cúbico de corpo-centrado (BCC).

A cela unitária do empacotamento cúbico de face centrada é mostrada na animação do Link 4.27.



Link 4.27 – Cela unitária do empacotamento cúbico de corpo-centrado.

A repetição tridimensional da cela unitária, mostrada na animação do Link 4.28, forma o retículo cristalino.



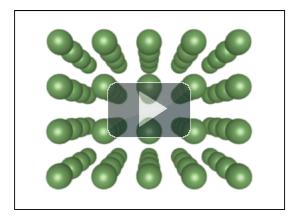
Link 4.28 – Estrutura cristalina do empacotamento cúbico de corpocentrado.

4.5.4 - Exemplo de estrutura não usual: cúbica simples

Os metais são classificados, em sua maior parte, por apenas três retículos: o hexagonal denso, o cúbico denso, e o cúbico de corpo centrado. Os demais, que são classificados como tendo estrutura cristalina não usual,

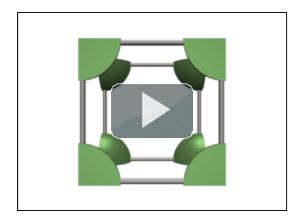
desconhecida ou incerta, devem, necessariamente, ter um dos quatorze retículos definidos por Bravais.

Um exemplo de metal que tem retículo classificado como não usual é o polônio. O empacotamento cúbico simples do polônio, mostrado na animação do Link 4.29, é formado por camadas sobrepostas de cátions que se repetem na forma AAA e é raro, porque a ocupação do volume pelos cátions é baixa.



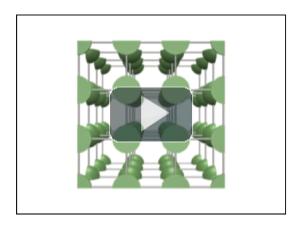
Link 4.29 – Empacotamento cúbico simples (AAA).

A cela unitária do polônio é mostrada na animação do Link 4.30.



Link 4.30 – Cela unitária do empacotamento cúbico simples.

A repetição tridimensinal da cela unitária do polônio forma o retículo cristalino mostrado na animação do Link 4.31.



Link 4.31 – Estrutura do empacotamento cúbico simples.

4.6 - Ocupação do volume nas celas unitárias dos metais

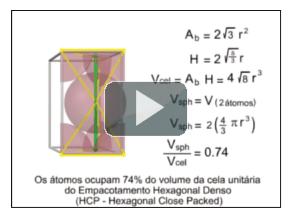
Apesar de existirem quatorze possibilidades de organizar pontos no espaço tridimensional, como demonstrou teoricamente Auguste Bravais em 1848, para a maior parte dos metais, os átomos estão organizados em três estruturas cristalinas. As três estruturas cristalinas mais comuns são: empacotamento hexagonal denso (ABAB), empacotamento cúbico denso (ABC), e empacotamento cúbico simples (AAA).

A pergunta que surge agora é: por quê, entre quatorze possibilidades, estas três estruturas cristalinas são mais comuns para a maior parte dos metais?

A resposta para esta pergunta é direta: naturalmente, estas estruturas são as que maximizam a ocupação do volume da cela unitária, o que pode ser constatado fazendo os cálculos com os parâmetros das celas unitárias e os raios atômicos.

Na animação do Link 4.32, são apresentados os cálculos envolvidos na determinação do volume ocupado pelos átomos nas celas unitárias das três estruturas cristalinas citadas. O empacotamento hexagonal denso tem 74% de ocupação do volume, o empacotamento cúbico denso tem 68% de ocupação do volume, e o empacotamento cúbico simples tem 52%. Como a

maior parte dos compostos tem empacotamento hexagonal denso, significa que esta é a organização espacial em que os átomos ocupam o maior volume possível.



Link 4.32 - Volume ocupado nas celas unitárias dos metais.

As animações em 3D ajudam a evidenciar algumas propriedades dos metais como, por exemplo, a maleabilidade e a ductibilidade, ao mostrar que ainda existe espaço vazio entre os átomos nos seus retículos cristalinos. Isto lhes permite mudar de posição sob ação de uma força externa. As vantagens que as animações em 3D oferecem, entretanto, são mais significativas quando ajudam a entender conceitos abstratos que têm origem em equações matemáticas como, por exemplo, a equação de Schröedinger, que é fundamental para entender a ligação covalente, que abordamos a seguir.

4.7 - Ligação covalente

A primeira tentativa de explicar como os átomos se uniam para formar moléculas foi dada em 1916 por Gilbert Newton Lewis com a publicação do artigo The Atom and the Molecule (Lewis, 1916). Nesse artigo, Lewis propõe que os átomos se unem para adquir a configuração estável dos gases nobres, ou seja, para completar a camada de valência com oito elétrons.

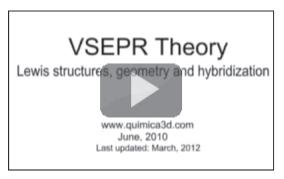
Em 1927, Walter Heitler e Fritz London aplicaram a equação de Schrödinger, publicada em 1926, à molécula de hidrogênio e determinaram que a ligação covalente se formava através das interferências construtivas e destrutivas das funções de onda de cada um dos átomos.

Usando a Teoria de Lewis e os resultados de Heitler e London, Linus Pauling desenvolveu dois conceitos que foram a chave para criar a Teoria da Ligação de Valência (TLV): ressonância (1928) e hibridização (1931).

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) foi desenvolvida poucos anos depois da Teoria da Ligação de Valência e a diferença básica entre as duas teorias é que a TLV considera que os pares de elétrons estão localizados na molécula e a TOM considera que os elétrons estão distribuidos em conjuntos de orbitais moleculares que se espalham por toda a molécula. O primeiro cálculo preciso de uma função de onda de orbital molecular foi feita por Charles Coulson em 1938 para o íon molecular de hidrogênio, H₂⁺ (Coulson, 1938).

Na TLV, a combinação linear é aplicada aos orbitais atômicos de um mesmo átomo, dando como resultado os orbitais hibridizados. Na TOM, a combinação linear é aplicada aos orbitais atômicos de todos os átomos da molécula, dando como resultado os orbitais moleculares.

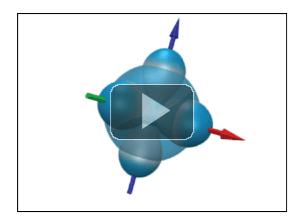
Para entender as formas geométricas das moléculas foi criada a Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons da Camada de Valência, também conhecida por VSEPR – Valence Shell Electron Pair Repulsion. A teoria da VSEPR (Sidgwick e Powell, 1940) e da hibridização (Pauling, 1931), apesar de terem sido desenvolvidas independentemente e serem consideradas teorias distintas (Gillespie, 2004), como são usadas em conjunto pelos professores, não se costuma fazer distinção entre elas. Este é o motivo pelo qual a VSEPR e a hibridização foram incluidas na mesma animação, como mostra a animação do Link 4.33.



Link 4.33 – Estruturas de Lewis, geometrias e hibridizações.

4.7.1 - Orbitais atômicos

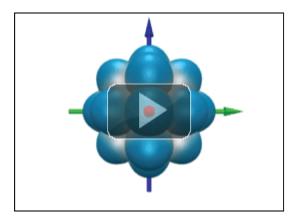
A TLV, a TOM e a VSEPR, foram desenvolvidas a partir dos resultados da teoria quântica e, portanto, os orbitais atômicos são a base para entender a formação das moléculas, sua forma geométrica, reatividade, e propriedades físicas. As animações em 3D permitem representar os orbitais atômicos, como mostra a animação do Link 4.34 onde são mostrados os orbitais **s** e **p**.



Link 4.34 – Orbitais **s** e **p**.

A representação dos cinco orbitais d de um átomo, tradicionalmente encontrada nos livros didáticos, exige que sejam visualizados mentalmente, isoladamente, os orbitais d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$ e d_z^2 , o que causa grande dificuldade.

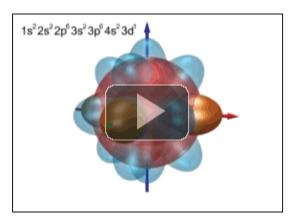
Essa dificuldade é eliminada através da animação do Link 4.35 onde os orbitais \mathbf{d} são mostrados separadamente, um a um, num sistema cartesiano, antes de formarem o conjunto. A animação também mostra que o orbital \mathbf{d}_z^2 é formado a partir dos orbitais $\mathbf{d}_x^2 - \mathbf{d}_z^2$ e $\mathbf{d}_{y^2 - z}^2$.



Link 4.35 – Orbitais d.

4.7.2 – Teoria do Orbital Atômico e configuração eletrônica

A teoria quântica fornece, matematicamente, a densidade de probabilidade de encontrar espacialmente os elétrons em um átomo, que é definida pelos orbitais. Uma vez conhecido o número atômico e a sequência de orbitais, a configuração eletrônica vira um simples exercício matemático com letras e números, como é tradicionalmente ensinada. Sem desmerecer o modo como é feita a distribuição eletrônica, podemos dizer que, apesar de também ser um "exercício matemático", a animação pode dar a este exercíco um significado físico melhor que uma simples sequência de símbolos, como mostra a animação do Link 4.36. Nesta animação deve ser observado que a cor azul indica que o orbital está desocupado, a cor laranja indica que o orbital está ocupado com um elétron, e a cor vermelha indica que o orbital está ocupado com dois elétrons.



Link 4.36 – Configuração eletrônica do escândio.

Ao fazer a configuração eletrônica utilizando letras e números, não é necessário questionar em qual dos cinco orbitais ficará o elétron mais externo. As animações em 3D, por outro lado, criam naturalmente essa dúvida. Como os cinco orbitais têm a mesma energia, significa que o elétron tem, estatisticamente, a mesma probabilidade de ocupar qualquer um deles. Entretanto, como esses orbitais ocupam regiões espaciais diferentes, a pergunta que surge naturalmente é: qual dos orbitais o elétron ocupará?

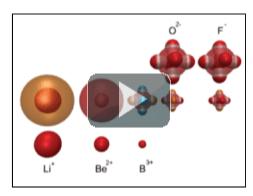
Essa situação é representada pelo preenchimento parcial do orbital com cor laranja. Alguém poderia ter a impressão de que o elétron salta de um orbital para outro e que, dessa forma, poderia ocupar todos os orbitais ao longo do tempo. Sabe-se que isso não acontece porque a região espacial entre os orbitais não é solução da equação de Schrödinger e, portanto, não pode ser ocupada pelo elétron, o que significa que ele não pode saltar de um orbital para outro porque teria que atravessar a região proibida. Ao não fixar o elétron em nenhum dos orbitais, a animação enfatiza que o elétron pode estar localizado em qualquer um deles.

4.7.3 – Uma comparação entre átomos e seus respectivos íons

A animação do Link 4.36 mostrou a configuração eletrônica considerando a energia final dos orbitais. O conceito está correto, mas devese levar em conta que, de acordo com a teoria do orbital atômico, um mesmo orbital tem energia diferente para cada átomo da tabela periódica, como mostra a animação do Link 4.37, desenvolvida a partir do livro do autor Santos Filho (2000).

O mesmo raciocínio pode ser aplicado a seguir, em ordem crescente de número atômico, para a ocupação do orbital 2s. Após o preenchimento deste iniciamos a ocupação do orbital. orbital qualitativamente, teremos o mesmo efeito de diminuição da energia destes orbitais, só que de uma maneira mais drástica uma vez que o número de elétrons possível neste nível de energia agora é seis. Isto significa que a cada incremento de carga nuclear, as energias de todos os orbitais vão gradativamente diminuindo. O mesmo acontece após o preenchimento dos orbitais 3s. 3p e 4s, quer dizer, após o preenchimento de todos estes orbitais, as energias de todos eles diminuiram em relação à situação na qual todos eles se encontravam vazios.

É extremamente importante observar que as energias de todos estes orbitais foram alteradas após o preenchimento, ou seja, todos estes orbitais se encontram agora mais próximos do núcleo, ao mesmo tempo em que as diferenças de energia que existiam entre estes orbitais também foram profundamente alteradas.



Link 4.37 – Animação mostrando a relação de tamanhos entre átomos e ions.

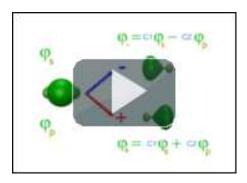
No final da animação são mostrados os íons de seus respectivos átomos neutros usando orbitais atômicos. A representação destes orbitais, necessária para entender a ligação covalente, também complementa o entendimento dos compostos iônicos, na medida em que ajuda a entender como o pequeno tamanho dos cátions lhes permite ocupar os interstícios formados pelos ânions.

Os símbolos dos orbitais atômicos, da configuração eletrônica, e da teoria do orbital atômico, modelados e animados em 3D usando o Blender[®], permitem-nos representar a teoria da ligação de valência e a teoria do orbital molecular, o que nos ajudará a entender como se formam as ligações químicas entre os átomos, e como estes se organizam para formar os compostos químicos.

4.7.4 - Teoria da Ligação de Valência (TLV)

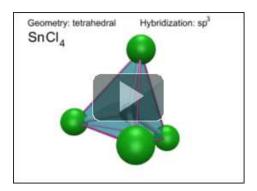
De acordo com a Teoria de Ligação de Valência, a ligação covalente é formada pela sobreposição dos orbitais atômicos mais externos dos átomos envolvidos. Neste modelo os elétrons ficam localizados entre pares de átomos, ou seja, a densidade de carga dos elétrons de valência fica concentrada na região de sobreposição dos orbitais que participam da ligação.

Matematicamente, um orbital atômico hibridizado é o resultado da combinação linear das funções de onda que descrevem dois ou mais orbitais do mesmo átomo, como mostra a animação do Link 4.38.



Link 4.38 – Combinação linear de orbitais do mesmo átomo.

Na animação do Link 4.39 são mostradas as principais hibridizações.



Link 4.39 – Principais hibridizações.

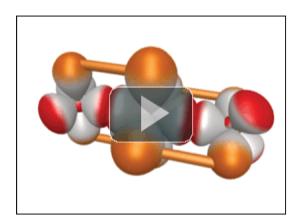
Vejamos agora, através do exemplo do dióxido de carbono e do monóxido de carbono, como é introduzida a sobreposição dos orbitais hibridizados na TLV.

A animação do Link 4.40 mostra a interferência construtiva das funções de onda na molécula de dióxido de carbono. Devemos observar que a interferência construtiva ocorreu porque os orbitais \boldsymbol{p} dos dois átomos de oxigênio estão em planos ortogonais. O átomo de carbono sofreu hibridização \boldsymbol{sp} e os dois átomos de oxigênio sofreram hibridização \boldsymbol{sp}^2 .



Link 4.40 – Interferência construtiva das funções de onda na molécula de dióxido de carbono.

A animação do Link 4.41 procura enfatizar o aumento da densidade de carga entre os núcleos, causada pela sobreposição dos orbitais hibridizados sp do átomo de carbono com os orbitais hibridizados sp^2 dos dois átomos de oxigênio. Essa sobreposição corresponde à ligação σ .



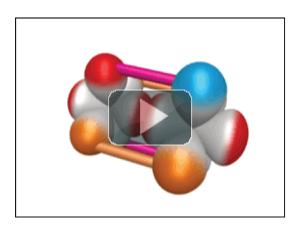
Link 4.41 – Sobreposição dos orbitais na molécula dióxido de carbono.

A animação do Link 4.42 mostra a interferência construtiva das funções de onda na molécula de monóxido de carbono. Devemos observar que tanto o átomo de carbono quanto o átomo de oxigênio sofreram hibridização *sp* e que os orbitais *p* dos dois átomos são coplanares.



Link 4.42 – Interferência construtiva da funções de onda na molécula de monóxido de carbono.

A animação do Link 4.43 procura enfatizar o aumento da densidade de carga entre os núcleos, causada pela sobreposição dos orbitais hibridizados **sp** dos dois átomos.



Link 4.43 – Sobreposição dos orbitais na molécula de monóxido de carbono.

A sobreposição dos orbitais e a hibridização são as bases da TLV, ou seja, são as bases para o entendimento da ligação covalente. As animações do dióxido de carbono e do monóxido de carbono mostram, claramente, a formação da ligação σ, através da sobreposição dos orbitais.

As estruturas de Lewis, a VSEPR e a TLV são uma combinação importante para descrever a ligação covalente e grande parte das estruturas

moleculares; entretanto, existe também a Teoria do Orbital Molecular, que é um recurso poderoso para interpretar a reatividade e as propriedades dos compostos moleculares. Por tudo isso, esta teoria também mereceu a nossa atenção.

4.7.5 - Teoria do Orbital Molecular (TOM)

Além de facilitar a visualização tridimensional, as animações em 3D tornam-se ainda mais úteis quando ajudam a "enxergar" o invisível, o abstrato – ou seja, quando estimulam o desenvolvimento da capacidade de abstração. Isto acontece toda vez que se faz necessário interpretar o significado físico de equações matemáticas.

Essa é, sem dúvida, uma das tarefas mais complexas e desafiadoras com que se deparam os cientistas. Como apenas um número muito restrito de pessoas tem o mesmo nível de conhecimento matemático dos cientistas, estes precisam criar uma linguagem que seja acessível à maioria das pessoas, para que estas possam entender suas descobertas. Entre os recursos mais utilizados para criar essa linguagem, estão as imagens.

A Teoria do Orbital Molecular é um exemplo dessa dificuldade. Se ela fosse ensinada a partir dos resultados da mecânica quântica, isso certamente exigiria um nível de conhecimento matemático que não é acessível aos alunos ingressantes na universidade. Para contornar esse problema, são usadas analogias, modelos físicos, figuras e gráficos, dentre outros tipos de recursos. Na Figura 4.2 podemos ver um exemplo de representação gráfica dos níveis de energia na molécula de monóxido de carbono, segundo a Teoria do Orbital Molecular, que é largamente utilizada no meio acadêmico para ensinar a ligação covalente.

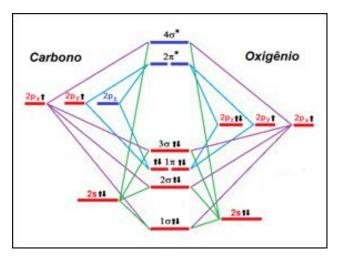


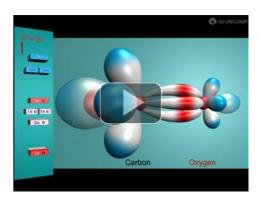
Figura 4.2 – Representação gráfica dos níveis de energia dos orbitais moleculares na molécula de monóxido de carbono.

A Teoria do Orbital Molecular associa os elétrons a um conjunto de orbitais que pertencem a toda a molécula, chamados de orbitais moleculares. Assim como os orbitais atômicos, os orbitais moleculares são funções matemáticas que podem ser relacionados com a probabilidade dos elétrons estarem localizados em uma certa região da molécula. De forma análoga aos orbitais atômicos, um orbital molecular pode acomodar apenas dois elétrons, que devem ter spins opostos.

Vimos que, para explicar a ligação covalente em algumas moléculas, a TLV utilizou um artifício matemático, a combinação linear. O resultado da combinação linear de dois orbitais atômicos de um mesmo átomo são dois orbitais hibridizados. Assim como a TLV, a TOM também usa o artifício matemático da combinação linear, com uma sutil diferença: a combinação linear é feita entre orbitais atômicos de átomos diferentes, cujo resultado é a formação dos orbitais moleculares.

A combinação linear dos orbitais atômicos do carbono com os orbitais atômicos do oxigênio, que leva à formação dos orbitais moleculares, está indicada na animação do Link 4.44. Nesta animação também está representado o diagrama que é geralmente encontrado nos livros didáticos e

que é de difícil entendimento. Por este motivo, além de mostrar a combinação linear através dos símbolos dos orbitais atômicos e moleculares modelados em 3D, procurou-se dar um significado físico ao diagrama tradicional.



Link 4.44 – Animação mostrando todos os orbitais moleculares existentes ao redor dos dois núcleos na molécula de monóxido de carbono.

Na Figura 4.3, é possível observar que a molécula de monóxido de carbono pode ser interpretada tanto pela TLV quanto pela TOM e, além disso, as duas interpretações são coerentes com a estrutura de Lewis, ∗C≡O∗, e com a VSEPR. Isto significa que não devemos ficar preocupados em eleger um modelo em particular para aprender/ensinar a ligação covalente, muito pelo contrário, podemos usar todos os modelos para se alcançar um entendimento completo da ligação covalente.

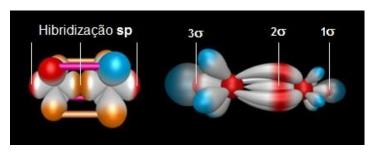


Figura 4.3 - Molécula de monóxido de carbono representado pela TLV e pela TOM.

A quantidade de informação contida nos diagramas usados para ensinar a TOM, associada à necessidade de visualização tridimensional, torna o

monóxido de carbono um dos exemplos mais utilizados para ilustrar este modelo. A maioria dos alunos tem grande dificuldade de criar as imagens tridimensionais que o professor esperaria que fossem criadas mas, felizmente, esta dificuldade pode ser superada com o auxílio das animações em 3D.

Todas as informações apresentadas até este ponto para a molécula de CO, interpretada segundo a TOM, estão na animação do Link 4.44 que, além de tratar a ligação covalente, também aborda a reatividade desta molécula, mostrando os orbitais moleculares HOMO e LUMO envolvidos numa transformação química.

4.8 - Transformações químicas

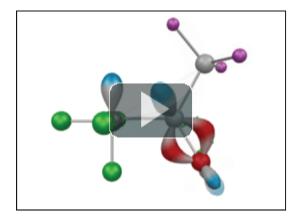
Como já existem informações suficientes sobre a molécula de monóxido de carbono, usada como exemplo para abordar a Teoria de Lewis, a VSEPR, a TLV, e a TOM, é possível usá-la também para exemplificar algumas transformações químicas.

Antes de mostrar uma animação completa de uma transformação química, é importante relembrar o que Jane Richardson afirmou sobre a importância didática e científica das animações em 3D:

Kinemages são criados para ilustrar uma idéia particular sobre um objeto tridimensional, ao invés de exibir o objeto de maneira neutra. Eles incorporam a seleção do autor, sua ênfase e seu ponto de vista.

Na animação do Link 4.45, ao invés de mostrar uma transformação catalítica completa, onde o monóxido de carbono é um dos reagentes, selecionou-se a inserção do monóxido de carbono na ligação metal-carbono, onde pode-se observar:

- HOMO do monóxido de carbono interage com um orbital vazio do paládio;
- Um orbital π^* vazio na região do monóxido de carbono interage com um orbital preenchido na região da metila coordenada;
- A metila muda de posição para formar uma espécie intermediária envolvendo o carbono do monóxido de carbono, o paládio e o carbono da metila;
- Desfaz-se a ligação entre o paládio e o carbono da metila;
- A ligação parcial entre o carbono do monóxido de carbono e o carbono da metila passa para definitiva;
- O orbital d vazio do paládio muda de posição para receber uma próxima inserção;
- Desaparece uma das ligações 1π e desaparece um dos orbitais $2\pi^*$;
- Aumenta o comprimento da ligação entre carbono e oxigênio;
- A ligação entre carbono e oxigênio torna-se dupla e o ângulo ao redor do carbono passa a ser de 120°.



Link 4.45 – Animação mostrando a inserção de monóxido de carbono em uma ligação metal-carbono.

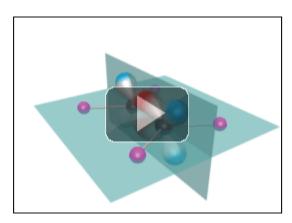
Podemos observar que, pelo menos, nove eventos aconteceram simultaneamente e, para acompanhar todos ao mesmo tempo, o movimento da ação precisa ser lento. Isto justifica a velocidade adotada nesta animação.

A quantidade enorme de mudanças acontecendo ao mesmo tempo, mostra que as animações são um poderoso recurso didático porque interligam vários conceitos simultaneamente, facilitando o discurso do professor. Também eliminam um grande problema para o aluno, que é o aprendizado fragmentado de conceitos.

Para enfatizar o número expressivo de conceitos presentes em uma única animação, que podem ser explorados pelo professor em sala de aula, mostraremos passo a passo, todos os detalhes de uma transformação química mais complexa, a polimerização do etileno.

A animação do Link 4.46 mostra a visualização do HOMO e LUMO do etileno; os outros orbitais moleculares não estão representados porque não participam da transformação.

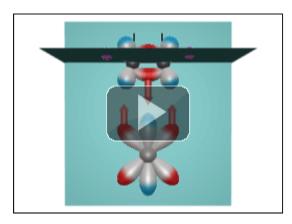
Apesar de sabermos que existem ligações químicas onde estão os traços, eles não devem ser entendidos como um símbolo para representar uma ligação química nesta animação. Os traços, apesar de poderem ser usados para representar um par de elétrons na teoria de Lewis, não fazem parte do conjunto de símbolos da TOM e foram incluídos apenas para melhorar a visualização tridimensional. Esta ênfase é necessária, para se entender que não estão sendo usados dois modelos diferentes na mesma animação.



Link 4.46 – Animação mostrando o HOMO e LUMO na molécula de etileno.

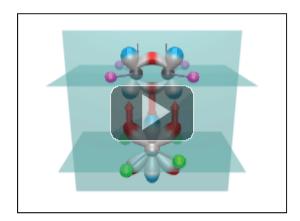
A animação do Link 4.47 mostra a visualização do HOMO e LUMO do etileno e os orbitais **d** da platina. É fundamental observar que a interação só é possível porque o HOMO do etileno pode interagir com um orbital **d** vazio, enquanto que o LUMO do etileno pode interagir com um orbital **d** preenchido do metal. Na interação do HOMO e LUMO do etileno com os orbitais **d** da platina, acontecem simultaneamente:

- Sobreposição do HOMO com o orbital d vazio e do LUMO com o orbital d preenchido;
- Aumento do comprimento da ligação entre os átomos de carbono;
- Mudança de posição dos átomos de hidrogênio;
- Formação de ligações parciais entre cada um dos átomos de carbono e a platina.



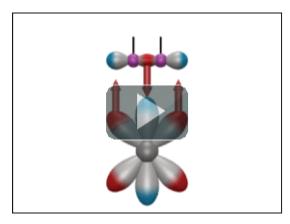
Link 4.47 – Interação entre o HOMO e LUMO do etileno e os orbitais **d** da platina.

A mesma sequência de transformações mostradas na animação do Link 4.47 pode ser utilizada para ilustrar uma reação de substituição de um ligante em um íon complexo quadrado planar, em um mecanismo do tipo SN_2 , como mostrado na animação do Link 4.48.



Link 4.48 – Reação de substituição de um ligante em um íon complexo quadrado planar.

Outra interação importante envolvida em processos catalíticos é aquele entre a platina e a molécula de hidrogênio, como é mostrado na animação do Link 4.49.



Link 4.49 – Interação entre o HOMO e LUMO do hidrogênio e os orbitais **d** da platina.

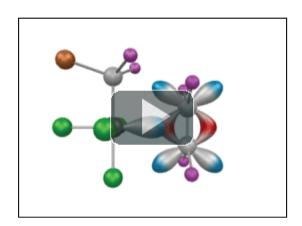
Finalmente, a animação do Link 4.50 mostra a sequência de transformações envolvidas na polimerização do etileno. Nesta animação também podemos perceber que em algumas ações chegam a acontecer várias mudanças ao mesmo tempo.

A animação começa com a visualização de um átomo de metal de transição (Pt) com um orbital **d** vazio, ligado a quatro cloretos e a uma metila. Em seguida, as letras são substituídas por esferas e o etileno entra em cena iniciando-se as transformações:

- São incluídos dois traços verdes para mostrar a variação do comprimento da ligação entre os átomos de carbono do etileno;
- A interação começa com a sobreposição do orbital *d* vazio da platina com o orbital π do etileno (HOMO). O comprimento da ligação entre os átomos de carbono do etileno aumenta, o que significa que já não existe uma ligação π formal, devido à alteração da densidade eletrônica:
- A interação continua, leva a um estado intermediário e nove eventos acontecem simultaneamente:
- O etileno se aproxima da metila;

- Aumenta o comprimento da ligação entre o átomo de carbono da metila e o átomo de platina;
- Aumenta o comprimento da ligação entre os átomos de carbono do etileno;
- O traço entre o átomo de carbono da metila e o átomo de platina muda da cor branca para a cor amarela para indicar que a ligação é parcial:
- Aparece um traço amarelo entre o átomo de platina e o carbono do etileno para indicar a formação de uma ligação parcial;
- Aparece um traço amarelo entre o átomo de carbono da metila e o átomo de carbono do etileno para indicar a formação de uma ligação parcial;
- O orbital π e o orbital **d** vazio ficam translucidos para indicar que agora são parciais;
- Aparece o HOMO e o LUMO na metila e no etileno, para indicar que a transformação química acontece devido à interação entre o HOMO na metila e o LUMO no etileno;
- Os átomos de hidrogênio do etileno mudam de posição;
- O etileno continua se aproximando da metila;
- Desaparecem o orbital π do etileno o orbital **d** vazio da platina;
- Desaparece a ligação parcial entre a platina e a metila;
- A metila gira e muda de posição;
- O etileno gira;
- O orbital d vazio aparece numa nova posição para receber a próxima adição de etileno;
- Adição de mais uma molécula de etileno: o polímero gira para eliminar o impedimento estérico;
- Tudo o que aconteceu simultaneamente na primeira adição, também acontece na segunda adição;

- Aparece o símbolo -(n)- para indicar que as demais adições, que não são mostradas, seguem este padrão de comportamento;
- Aparece o orbital d na nova posição;
- O polímero gira até o hidrogênio do carbono β se aproximar do orbital
 d vazio, criando um estado intermediário que permite a terminação do polímero;
- O comprimento da ligação entre o carbono terminal e o carbono β
 diminui e a ligação entre os carbonos passa a adquirir caráter de
 dupla;
- Desaparece a ligação de um dos hidrogênios do carbono β;
- Este hidrogênio liga-se ao átomo de platina;
- Desaparece a ligação entre o carbono terminal e o átomo de platina;
- Desaparece a ligação entre catalizador e o polímero.



Link 4.50 – Polimerização do etileno.

As animações em 3D são um poderoso recurso pedagógico para facilitar a visualização tridimensional e estimular o desenvolvimento da capacidade de abstração, duas das maiores dificuldades encontradas no ensino-aprendizado de Química. Modelar celas unitárias, empacotamentos de íons, retículos cristalinos, orbitais, moléculas, e representar modelos químicos tais como, Teoria do Orbital Atômico, Teoria da Ligação de Valência, Teoria do Orbital Molecular, Teoria da Repulsão dos Pares de

Elétrons da Camada de Valência (VSEPR), é apenas uma parte do que é possível fazer usando as animações em 3D. A aplicação mais nobre das animações em 3D é a representação do movimento, tão necessário para entender, por exemplo, a reatividade. As equações das reações químicas, que na verdade são algébricas, podem ser representadas com movimento através das animações em 3D, o que as transforma em um importante recurso pedagógico para entender o verdadeiro significado das transformações químicas.

5 - RESULTADOS DA AVALIAÇÃO DO USO DAS ANIMAÇÕES

As animações foram avaliadas, após terem sido utilizadas em sala de aula, através de questionários respondidos pelos alunos da disciplina de pósgraduação QP443, oferecida no segundo semestre de 2010 no IQ/UNICAMP através de questionários respondidos pelos alunos da disciplina de graduação QG101, do curso de Engenharia de Alimentos, oferecida no primeiro semestre de 2011 no IQ/UNICAMP. Na elaboração do questionário da disciplina QP443, procurou-se descobrir o planejamento que o professor deve fazer para inserir as animações em uma aula. Na elaboração do questionário da disciplina QG101, procurou-se avaliar a contribuição das animações para o ensino-aprendizado de Química em aulas presenciais. As respostas dos dois questionários complementaram-se ao mostrar a visão dos professores, que utilizaram as animações para ensinar, e a visão dos alunos que as usaram para estudar. Além da avaliação através dos questionários, as animações também foram avaliadas através das informações fornecidas estatísticas websites pelas dos www.quimica3d.com е www.youtube.com/user/m770596.

5.1 - Avaliação das animações na disciplina QP443

As animações foram avaliadas por dezoito alunos que eram, em sua quase totalidade, professores de Química que atuam no ensino médio ou superior e, por esse motivo, são chamados de alunos-professores.

A experiência profissional desses alunos-professores, associada à forma como a disciplina foi organizada, permitiu avaliar a contribuição das animações para o ensino de Química.

A disciplina foi organizada da seguinte forma: primeiro havia uma aula sobre um tema pré-determinado, utilizando recursos audio-visuais

disponíveis na internet (animações, trechos de filmes e vídeos didáticos). Nesta aula destacavam-se todos os aspectos importantes inerentes ao assunto e era analisada a pertinência e a qualidade dos recursos disponíveis na internet. Ao final da aula, um aluno-professor ficava encarregado de preparar uma aula de 50 minutos, priorizando a utilização de recursos audiovisuais. Essa aula era apresentada sete dias depois e, após a apresentação, era avaliada críticamente por todos os participantes da disciplina.

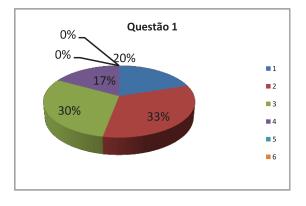
5.1.1 - Gráficos com a média aritmética das respostas da disciplina QP443 e análise das respostas

Considerando que exista a possibilidade de se utilizar animações em qualquer instituição de ensino, responda as questões a seguir. Você pode assinalar mais de uma alternativa em cada questão, sempre que julgar conveniente.

Questão 1

Você já utilizou animações em suas aulas de Química?

- 1-() sim
- 2-() não
- 3-() porque não conhecia este recurso
- 4-() porque não tenho acesso a este tipo de recurso
- 5-() porque não gosto deste tipo de recurso
- 6-() porque não gosto das animações disponíveis

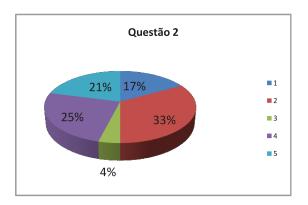


O questionário, aplicado no final do semestre, reflete as discussões feitas na disciplina QP443 e permite avaliar os benefícios, as dificuldades e também os problemas envolvidos na inserção de animações no ensino de Química. As respostas da questão 1, por exemplo, sugerem que: as animações são um recurso didático importante, porque 20% dos alunosprofessores já as utilizam em suas aulas; é necessário incrementar sua produção e divulgação, porque 80% dos alunos-professores responderam que não utilizaram animações em suas aulas, ou porque desconheciam este tipo de recurso didático (30%) ou porque não tinham acesso a ele (17%).

Questão 2

Dentre as vantagens relacionadas abaixo, quais aquelas que você considera mais importantes, decorrentes da utilização de animações no ensino de Química?

- 1-() estimular a capacidade de abstração
- 2-() facilitar a representação do pensamento
- 3-() permitir que todos os alunos imaginem a mesma coisa da mesma maneira
- 4-() facilitar o aprendizado
- 5-() evitar distorções de entendimento das coisas abstratas



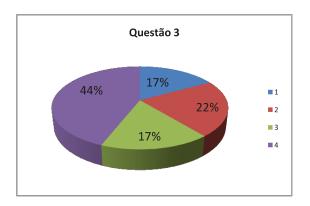
Por se tratar de um recurso didático relativamente recente, é fundamental que o professor conheça as vantagens que as animações podem oferecer para poder utilizá-las de forma eficiente. Algumas vantagens

da utilização das animações, na opinião dos professores, podem ser constatadas nas respostas da questão 2, entre elas, as aulas preparadas com animações facilitam o aprendizado, a capacidade de abstração dos alunos não é mais um requisito essencial, as distorções de entendimento dos conceitos químicos são evitados, a representação do pensamento é facilitado e todos os alunos imaginam a mesma coisa da mesma maneira.

Questão 3

Dentre as desvantagens abaixo, destadas por professores de ensino médio, quais aquelas que você considera mais importantes, decorrentes da utilização de animações no ensino de Química?

- 1-() induz o aluno a materializar o abstrato
- 2-() não desenvolve a capacidade de abstração do aluno
- 3-() não desenvolve a capacidade de expressão, falada e escrita do aluno
- 4-() traz muitas dúvidas "novas" para o professor



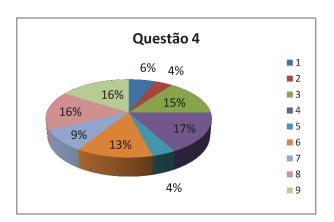
As animações, como qualquer outro recurso didático, trazem vantagens para o ensino de Química, mas também trazem desvantagens. A maior desvantagem, apontada nas respostas da questão 3, é que as animações trazem dúvidas "novas" para os professores (44%). É importante observar que a desvantagem para o professor, de não se sentir preparado para responder as dúvidas dos alunos decorrentes das animações, está relacionada com uma vantagem para o aluno, que passa a ter dúvidas "novas" em relação à forma tradicional de aprender. As animações levam os

alunos a fazer perguntas diferentes das tradicionais e isso cria um desafio para os professores, porque exige que estes tenham "novas" respostas. Na opinião dos professores, entre as desvantagens, que podem ser observadas nas respostas da questão 3, as animações induzem o aluno a materializar o abstrato (17%), não desenvolvem a capacidade de abstração (22%) e não desenvolvem a capacidade de expressão, falada e escrita (17%).

Questão 4

Em quais dos assuntos abordados nesta disciplina você sentiu que a utilização de animações trouxe maior contribuição?

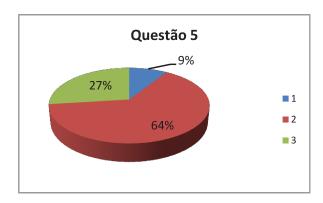
- 1-() configuração eletrônica
- 2-() fórmula estrutural
- 3-() hibridização
- 4-() orbitais atômicos
- 5-() raio atômico e iônico
- 6-() retículos cristalinos
- 7-() teoria da ligação de valência
- 8-() teoria do orbital molecular
- 9-() ativação do etileno e polimerização



As respostas da questão 4 permitem-nos inferir que as animações deram contribuição praticamente equivalente para todos os assuntos abordados na disciplina, o que significa que poderiam ser utilizadas para ensinar estrutura atômica, molecular e cristalina.

Qual a maneira mais adequada de se utilizar as animações?

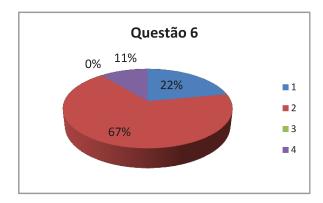
- 1-() mostrando-a integralmente e depois voltando e explicando tudo o que ocorre
- 2-() descrevendo e comentando, ao mesmo tempo em que é mostrada
- 3-() interrompendo a animação e perguntando aos alunos o que estão entendendo



Além das dúvidas "novas" dos alunos que as animações trazem para o professor, que se elevam em função da grande quantidade de assuntos que permitem tratar, outra dificuldade é descobrir a maneira mais adequada de utilizá-las. Uma das formas de utilizar as animações é mostrando-as integralmente e depois voltando e explicando tudo o que ocorreu. Como essa forma de utilização foi apontada por apenas 9% dos alunos-professores, na questão 5, como a mais adequada, conclui-se que foi considerada pouco eficiente didaticamente. Outra possibilidade de utilizar as animações, apontada por 27% dos alunos-professores, como a mais adequada, interrompendo a animação e perguntando aos alunos o que estão entendendo. A forma apontada como a mais eficiente didáticamente por 64% dos alunos-professores, é a que descreve e comenta as imagens ao mesmo tempo em que são mostradas. Apesar de ter sido considerada a melhor forma de utilização das animações, é a forma que poderia trazer maior dificuldade para o professor, por não estar acostumado, exigiria a criação de um discurso para cada ponto de parada da animação.

Você acha que as animações podem refletir o pensamento e traduzir o diálogo do professor em sala de aula?

- 1-() sim, para qualquer assunto
- 2-() sim, não para qualquer assunto
- 3-() não, porque tem coisas que não dá para representar
- 4-() não, porque o pensamento é abstrato e não pode ser representado

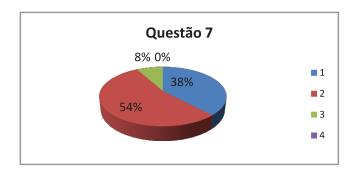


Ao serem perguntados na questão 6 se as animações podem refletir o pensamento e traduzir o diálogo do professor em sala de aula, 67% dos alunos-professores responderam que sim, mas não para qualquer assunto. Podemos entender que na opinião da maioria dos alunos-professores que responderam o questionário, na maior parte dos assuntos de Química ensinados, as animações não se sustentam por si só e exigem a participação do professor no processo ensino-aprendizagem. É interessante observar que as questões 5 e 6, apesar de serem diferentes, tiveram respostas com porcentagens altas e praticamente iguais. Isto sugere que, apesar das animações tornarem mais fácil o discurso do professor em sala de aula, a participação do professor continua sendo indispensável.

Questão 7

O uso de animações pode tornar a aula de Química mais ou menos dinâmica?

- 1-() mais dinâmica porque foge aos padrões normais de giz e lousa
- 2-() mais dinâmica porque prende a atenção do aluno nas imagens
- 3-() menos dinâmica porque a aula é interrompida para a apreciação da imagem
- 4-() menos dinâmica porque a apresentação da imagem quebra o ritmo da aula

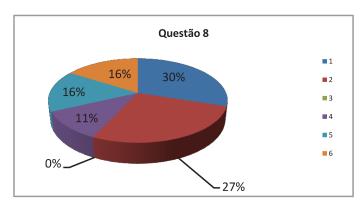


As animações, além de poderem facilitar o discurso do professor, tornaria a aula mais dinâmica porque prenderiam a atenção do aluno nas imagens, como sugerem as respostas da questão 7 dadas por 57% dos alunos-professores. Além disso, 38% responderam que as animações tornam a aula mais dinâmica porque foge ao padrão tradicional de giz e lousa. Estas respostas indicam que na opinião da maioria dos alunos-professores, as animações seriam um recurso didático que complementa os recursos tradicionais como giz e lousa e que facilitariam o aprendizado de Química ao prender a atenção dos alunos e tornar a aula mais dinâmica.

Questão 8

Quais seriam as características da animação para que a aula não se torne monótona?

- 1-() não pode ser muito lenta porque a demora dispersa a atenção dos alunos
- 2-() não pode ser muito rápida porque dificulta a observação
- 3-() deve apresentar som (música) para atrair a atenção do aluno
- 4-() deve ser bem colorida e chamativa
- 5-() deve ser de curta duração
- 6-() não deve ter narração, sendo que esta deve ser feita pelo professor

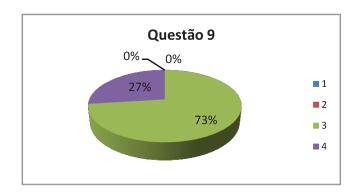


Para que as animações tornem o processo ensino-aprendizagem mais fácil e rápido, devem ser planejadas de modo a não impor ao professor um discurso que torne sua aula monótona. Se uma animação fosse muito lenta, na questão 8, 30% dos alunos-professores responderam que a aula se tornaria monótona porque dispersaria a atenção dos alunos. Por outro lado, se a animação fosse muito rápida, 27% consideram que a aula se tornaria monótona porque dificultaria a observação dos alunos. Além da velocidade da ação da animação, as respostas da questão 8 sinalizam que, para evitar que a aula se torne monótona, a animação deve ser bem colorida e chamativa (11%), deve ter curta duração (16%) e não deve ter narração, sendo que esta deve ser feita pelo professor (16%).

Questão 9

Você se sente preparado para utilizar animações em sua atividade docente?

- 1-() sim, porque esta utilização não requer treinamento
- 2-() sim, porque é como utilizar qualquer outro recurso visual
- 3-() ainda não, mas se treinar posso fazê-lo sem problemas
- 4-() ainda não, porque nunca narrei uma imagem para os alunos

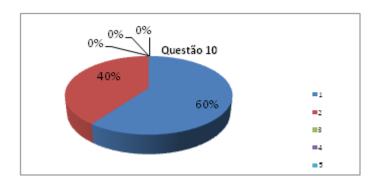


Por se tratar de um recurso didático recente, é provável que os professores não se sintam preparados para utilizá-lo em suas aulas. As respostas da questão 9 mostram que 73% dos alunos-professores não se consideram preparados para utilizar animações mas que poderiam fazê-lo sem problemas com algum tipo de treinamento. Por outro lado, 27% declararam que nunca narraram uma animação para os alunos. Nenhum aluno-professor se considerou preparado para utilizar animações em sua atividade docente e todos responderam que este tipo de recurso didático requer treinamento.

Questão 10

Como você classifica as animações do website www.quimica3d.com apresentadas nesta disciplina?

- 1-() adequadas
- 2-() adequadas, mas podem ser melhoradas
- 3-() adequadas, mas precisam ser melhoradas
- 4-() inadequadas
- 5-() confusas

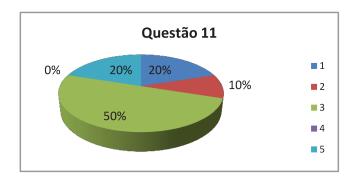


A utilização de animações na preparação da aula de cada alunoprofessor na disciplina QP443, tanto as disponíveis na internet quanto as
deste trabalho, permitiu fazer uma avaliação das animações deste trabalho.
As respostas da questão 10 mostram que 60% dos alunos-professores
consideraram as animações adequadas, mas 40% responderam que
poderiam ser melhoradas. A interação com esses alunos-professores durante
o semestre, permitiu avaliar o que poderia ser melhorado nas animações. A
partir das sugestões, alguns trechos foram suprimidos, outros refeitos, o
tempo da ação de alguns trechos foram alterados. Todas as animações
passaram por uma revisão no período de novembro de 2010 a março de
2011.

Questão 11

Como você classifica as animações disponíveis na internet, apresentadas nesta disciplina?

- 1-() adequadas
- 2-() adequadas, mas podem ser melhoradas
- 3-() adequadas, mas precisam ser melhoradas
- 4-() inadequadas
- 5-() confusas



Quanto às animações disponíveis na internet (de outros autores) utilizadas para preparar as aulas, as respostas da questão 11 mostram que 20% dos alunos-professores as consideram adequadas e que 10% acham que são adequadas, mas que podem ser melhoradas. Uma parcela considerável de alunos-professores (20%) consideraram que essas animações são confusas e 50% responderam que apesar de poderem ser usadas, precisariam ser melhoradas. Os motivos apontados pela parcela de alunos-professores que consideram confusas as animações foram: mau planejamento visual da animação, o tempo da ação muito rápido e presença de algum tipo de erro conceitual.

5.2 - Avaliação das animações na disciplina Química Geral-QG101

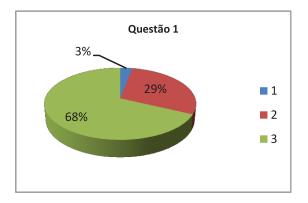
As animações foram avaliadas por setenta e cinco alunos do curso de Engenharia de Alimentosna disciplina Química Geral. Como ficaria inviável fazer um questionário para avaliar todas as animações usadas no curso, optou-se por selecionar as mais representativas de cada assunto.

5.2.1 - Gráficos com a média aritmética das respostas na disciplina QG101 e análise das respostas

Questão 1

A representação "tradicional" da configuração eletrônica do átomo de escândio é: 1s² 2s² 2p6 3s² 3p6 4s² 3d¹. Antes de conhecer as animações nesta disciplina você conseguia imaginar, simultaneamente, todos estes orbitais no espaço tridimensional?

- 1-() conseguia imaginar todos os orbitais
- 2-() conseguia imaginar alguns orbitais
- 3-() não me preocupava em imaginar os orbitais no espaço tridimensional, porque aprendi a fazer configuração eletrônica apenas como um exercício matemático



As respostas dadas para esta questão mostram que a associação entre a representação "tradicional" da configuração eletrônica e seus respectivos orbitais é feita parcialmente por 29% dos alunos e completamente por apenas 3% dos alunos. A grande maioria dos alunos (68%) que ingressaram no curso de Engenharia de Alimentos na Unicamp em 2011 aprenderam configuração eletrônica apenas como um exercício matemático. Estes números indicam que as animações contribuem de forma significativa para relacionar a configuração eletrônica "tradicional" com a disposição tridimensional dos orbitais, além de mostrar espacialmente a densidade de probabilidade de encontrar os elétrons.

O átomo de escândio pode ser representado pela sua configuração eletrônica, que é dada por: 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s² 3d¹. Por outro lado, o átomo de escândio pode ser representado da maneira mostrada na Figura 5.1. Considerando que, com o recurso das animações é possível fazer a transposição de uma representação para outra, em sua opinião:

- 1-() a transposição foi feita com facilidade
- 2-() a transposição foi feita com dificuldade
- 3-() não conseguiu fazer a transposição

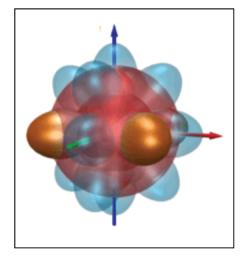
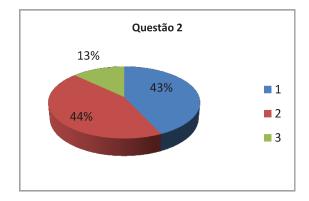


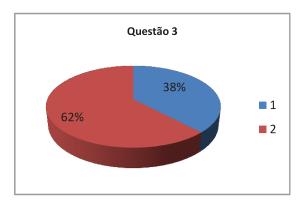
Figura 5.1



Como 87% dos alunos conseguiu fazer a transposição de uma representação para outra, podemos inferir que as animações são um recurso didático que contribui para entender conceitos químicos que exigem abstração e visualização tridimensional.

Para representar o elétron no conjunto de orbitais degenerados (de mesma energia) nas animações em 3D, foi usado o artifício em que o elétron fica mudando de um orbital para outro. Podemos dizer que este recurso:

- 1-() induz o aluno a pensar que o elétron fica trocando de orbital com o tempo
- 2-() induz o aluno a pensar que o elétron não pode ser localizado em qualquer um dos orbitais degenerados, mas é definido em todos eles



A maior parte dos alunos entendeu corretamente o artifício em que o elétron fica mudando de um orbital para outro para indicar que o elétron não pode ser localizado em qualquer um dos orbitais degenerados, mas é definido em todos eles. Uma parcela considerável (38%), entretanto, não compreendeu o artifício e isso mostra que, apesar das animações serem um recurso didático poderoso, existem dificuldades para se criar um código para representar conceitos químicos. Daí a necessidade de uma complementação da informação que seria feita pelo professor, ou seja, as animações desenvolvidas para serem usadas em aulas presenciais não são autoexplicativas. Animações auto-explicativas, aquelas com narração, competiriam com o discurso do professor e, portanto, não são apropriadas para uso em sala de aula.

Considere um orbital **p** com 1 elétron como representado na Figura 5.2. Você entendeu, nesta representação, que o gradiente da cor laranja indica a região espacial de maior probabilidade de encontrar o elétron neste orbital e que a cor branca indica uma região espacial de baixa probabilidade de encontrar o elétron:

- 1-() sim
- 2-() não

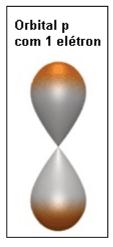
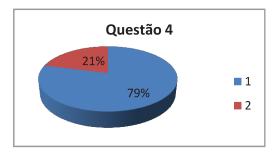


Figura 5.2



Esta questão teve como objetivo verificar o grau de associação do conjunto de símbolos criados para as animações com o conceito químico. Como esta animação foi apresentada no início do semestre e o questionário foi aplicado no final do semestre, verifica-se que a maioria dos alunos depois de alguns meses ainda conseguiu estabelecer a correta relação entre o símbolo criado e o conceito químico, o que significa que a associação entre imagem e conceito foi muito forte.

Na animação da Teoria do Orbital Atômico foram mostrados os raios atômicos e os iônicos de oito espécies. Antes de observar as representações destes átomos e íons na Figura 5.3, com seus respectivos orbitais atômicos, você imaginava que a diferença de tamanho entre os átomos neutros e os correspondentes íons fosse tão acentuada?

- 1-() sim
- 2-() não

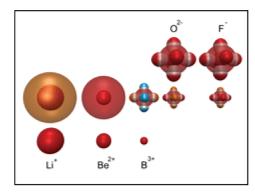
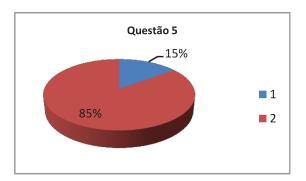


Figura 5.3



Esta questão mostra que a quase totalidade dos alunos não tinha percepção da acentuada diferença de tamanho entre cátions e ânions. A animação contribuiu de forma significativa para estabelecer a relação entre os raios iônicos e os orbitais atômicos utilizando a configuração eletrônica.

No modelo usado para representar os compostos iônicos na Figura 5.4, os íons são representados por esferas rígidas, que são uma simplificação dos íons com seus respectivos orbitais atômicos, mostrados anteriormente. Que relação você estabeleceu entre o modelo de íons representados por esferas e por orbitais?

- 1-() percebi imediatamente que as esferas rígidas eram uma simplificação dos íons representados por orbitais
- 2-() percebi que as esferas rígidas eram uma simplificação dos íons representados por orbitais com alguma dificuldade, mas sem ajuda
- 3-() só consegui perceber que as esferas rígidas eram uma simplificação dos íons representados por orbitais com ajuda do professor ou de outros alunos

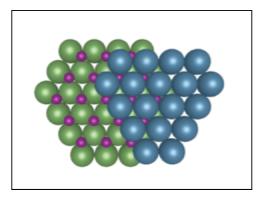
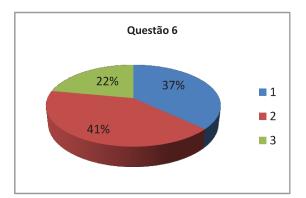


Figura 5.4



A maioria dos alunos (78%) compreendeu com facilidade as duas formas diferentes de representação de íons, pelo que podemos inferir que as

animações são intuitivas. Como uma parcela de alunos (22%) ainda precisou de ajuda do professor para entender as duas representações, podemos inferir que a intervenção do professor continua sendo necessária.

Questão 7

A Figura 5.5, à esquerda, representa uma versão da interpretação da formação da ligação iônica, muito comum em livros do ensino médio. Nesta interpretação considera-se que exista uma transferência de elétrons de um átomo para outro formando um cátion e um ânion, que passam a se atrair porque apresentam cargas opostas. Por outro lado, a Figura 5.5, à direita, representa o retículo cristalino de um composto iônico. Qual destas representações você acha que melhor representa um composto iônico?

- 1-() aquela da esquerda, onde ocorre a transferência de elétrons entre dois átomos para completar o octeto formando os íons de cargas opostas
- 2-() a da direita, pois sabia que os compostos iônicos possuem uma organização tridimensional
- 3-() a da esquerda, mas com a ressalva de que a organização era aquela mostrada à direita

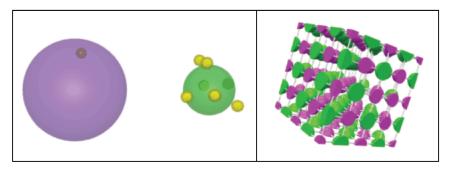
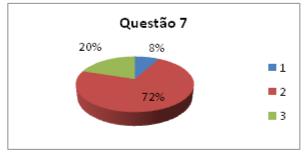


Figura 5.5



Uma pequena parcela de alunos (8%) ainda continua, no final do semestre, adotando como modelo de ligação iônica a atração eletrostática entre dois íons formados pela simples transferência de elétrons, entre átomos neutros, para formar o octeto. Uma parcela significativa (20%) ainda adota este modelo mas já consegue estabelecer uma relação com a organização tridimensional dos íons no retículo cristalino. A grande maioria dos alunos (72%) refez o conceito de ligação iônica aprendido no ensino médio e entendeu que não é necessário saber como os íons se formaram; eles já estão disponíveis na natureza e se organizaram para formar o retículo cristalino.

Questão 8

Você poderia imaginar a união de quatro celas unitárias para formar um retículo cristalino sem a utilização de nenhum outro tipo de recurso, como mostra a Figura 5.6?

- 1-() não poderia imaginar e as animações em 3D permitiram essa visualização
- 2-() sim, já conhecia um tipo de recurso semelhante ou igual a este
- 3-() sim, tenho uma excelente capacidade de visualização em 3D e não precisaria de nenhum tipo de recurso

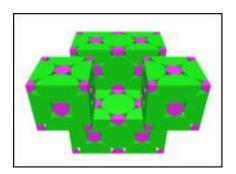
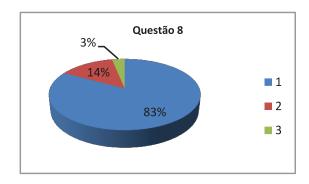


Figura 5.6



Esta questão mostra que a quase totalidade dos alunos (83%) chega à universidade sem saber que um composto iônico tem uma estrutura mínima, a cela unitária, e que esta se repete tridimensionalmente para formar o retículo cristalino.

Questão 9

A ligação covalente é explicada pela Teoria do Orbital Molecular, que estabelece que os orbitais moleculares são formados através da combinação linear dos orbitais atômicos, como é mostrado no diagrama da Figura 5.7, para o monóxido de carbono. Este diagrama exige grande capacidade de abstração para visualizar a molécula de monóxido de carbono em 3D, ou seja, onde estão presentes na molécula os orbitais ligantes, antiligantes, nãoligantes, as ligações σ e π e os orbitais HOMO e LUMO. Como você considera a contribuição que a animação em 3D, para a molécula de monóxido de carbono da Figura 5.8, deu para o seu entendimento sobre ligação covalente e para a visualização dos orbitais?

- 1-() excelente
- 2-() muito boa
- 3-() boa
- 4-() ruim

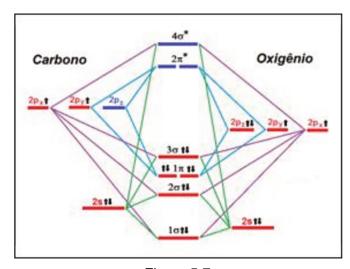


Figura 5.7

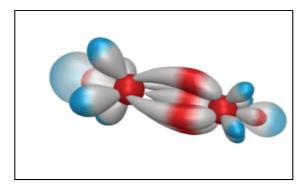
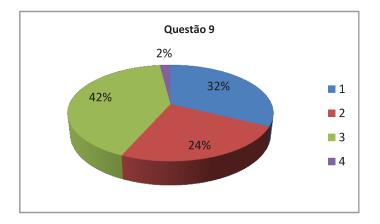


Figura 5.8



As respostas dadas para esta questão mostram que os alunos concordam, na sua quase totalidade (98%), que a animação contribuiu para o entendimento de ligação covalente. Uma possível explicação é o fato dos diagramas utilizados nos livros didáticos, como o da Figura 5.7, conterem

uma grande quantidade de informações que exigem do aluno uma enorme capacidade de abstração. A visualização tridimensional dos orbitais moleculares formados através da combinação linear dos orbitais atômicos auxilia a abstração dos alunos. Outra avaliação, que concorda com as respostas dadas pelos alunos, é o número de visualizações desta animação, que está disponível no www.youtube.com/user/m770596 e no www.quimica3d.com; de um conjunto de mais de 60 animações, mais de 40% das visitas (em fevereiro de 2013) são para ela.

Questão 10

A ligação covalente também é explicada pela Teoria de Ligação de Valência, como ilustrado na Figura 5.9 para a molécula de CO₂, que usa a hibridização como um de seus argumentos. A TOM e a TLV foram desenvolvidas em épocas diferentes e podem ser consideradas complementares. Para você, as animações das duas teorias:

- 1-() tornaram o aprendizado da ligação covalente mais rápido
- 2-() tornaram o aprendizado da ligação covalente mais lento
- 3-() não são necessárias para entender a ligação covalente

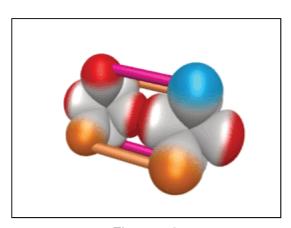
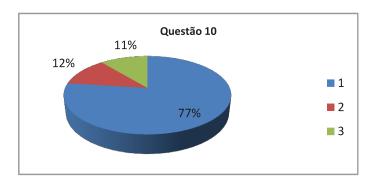


Figura 5.9



A maioria dos alunos (77%) afirma que as animações da TOM e da TLV tornaram o aprendizado da ligação covalente mais rápido. Esta análise foi feita a partir da percepção subjetiva do aluno porque não existem métodos para se medir a velocidade da aprendizagem. Apesar de subjetiva, a análise deve ser aceita como correta devido à estratégia usada para ensinar os conceitos da TOM e da TLV. Estes conceitos foram ensinados utilizando-se os métodos tradicionais, ou seja, as aulas se desenvolveram com um discurso em que foi exigido do aluno criar imagens mentalmente. Surgiram, como é natural em todo processo de aprendizagem, dúvidas geradas pela dificuldade de abstração dos alunos, ou seja, dúvidas geradas pela dificuldade de transformar o discurso do professor em imagens. As animações foram utilizadas no final das aulas para tirar as dúvidas residuais, depois que os conceitos já havidam sido longamente explicados. Observouse que as dúvidas residuais foram esclarecidas.

Uma provável explicação para esse resultado pode ser a de que os alunos que formaram imagens mentalmente semelhantes àquelas das animações responderam que as animações não são necessárias para entender a ligação covalente (11%) ou que tornaram o aprendizado mais lento (12%). Os alunos para os quais as animações ampliaram ou corrigiram as imagens formadas mentalmente responderam que o aprendizado da ligação covalente foi mais rápido (77%). Apesar de não ser possível medir a velocidade de aprendizado, as animações produziram, na opinião dos alunos,

aprendizado mais rápido, porque sem utilizá-las eles levariam mais tempo para chegar no mesmo nível de entendimento dos conceitos da TOM e da TLV.

Questão 11

A hibridização na Figura 5.10 é o argumento para entender a ligação covalente segundo a Teoria da Ligação de Valência. Como você considera a contribuição que as animações dão para facilitar o aprendizado da hibridização:

- 1-() as animações, por permitirem uma visualização tridimensional dos orbitais híbridos, facilitam o aprendizado da hibridização
- 2-() as animações confundem o aprendizado porque mudam os orbitais atômicos antes deles formarem uma ligação covalente

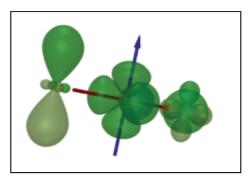
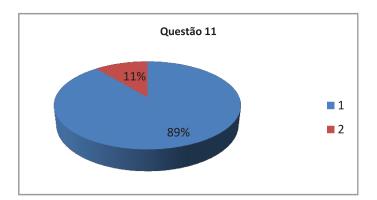


Figura 5.10



A resposta dada pelos alunos para esta questão mostra eles consideram que as animações contribuem para facilitar o aprendizado da hibridização.

As estruturas de Lewis foram apresentadas através de exemplos de algumas moléculas e estão relacionadas com a hibridização. Cada molécula contém um texto descrevendo a sua geometria e a sua hibridização como é mostrado na Figura 5.11. Comparando esta animação com aquelas sem texto, você considera:

- 1-() as animações com texto facilitam o aprendizado
- 2-() não haveria necessidade do texto para entender as estruturas de Lewis porque os símbolos usados para representar as moléculas são suficientes
- 3-() Os textos dificultam o aprendizado porque desviam a atenção das animações

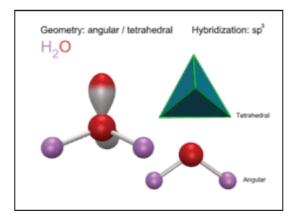
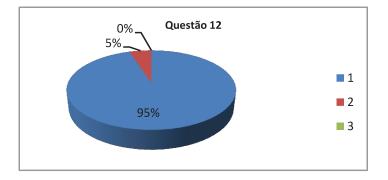


Figura 5.11



A quase totalidade dos alunos (95%) concorda que as animações com legendas facilitam o aprendizado. Além das legendas, a narração é outro elemento que permite que as animações facilitem o aprendizado. Quando utilizadas em sala de aula, não necessitam de narração porque esta é feita

pelo professor. Quando utilizadas em outros ambientes, como websites e livros eletrônicos, a narração e as legendas são necessárias.

Questão 13

Como você afirmaria que foi a sua compreensão sobre os orbitais *d* na Figura 5.12?

- 1-() a visualização tridimensional dos orbitais **d** seria muito dificultada sem a separação dos orbitais
- 2-() a visualização tridimensional dos orbitais **d** não necessitaria da separação dos orbitais
- 3-() a visualização tridimensional dos orbitais d pode ser feita sem as animações porque as figuras encontradas nos livros didáticos são suficientemente claras

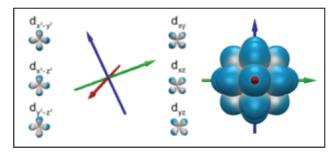
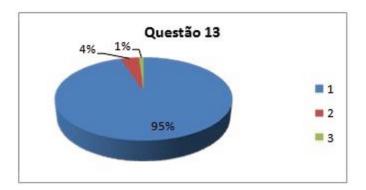


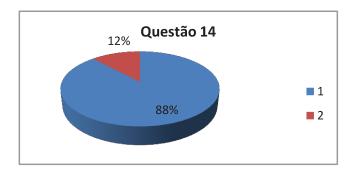
Figura 5.12



A grande quantidade de orbitais **d** dificulta a sua visualização tridimensional quando são desenhados juntos, como geralmente são encontrados nos livros didáticos. A separação dos orbitais facilita a sua visualização tridimensional.

Você utilizou as animações para estudar?

- 1-() sim
- 2-() não



Verifica-se, através desta questão, que a maioria dos alunos (88%), além do livro texto e das anotações de aula, utilizaram as animações para estudar. Podemos concluir que houve grande aceitação por este recurso didático.

As animações foram utilizadas na maioria das aulas em uma disciplina de graduação e em todas as aulas na disciplina de pós-graduação, durante um semestre. Esse uso contínuo favoreceu tanto a aplicação quanto a avaliação.

Na disciplina de graduação, as animações foram usadas para tirar as dúvidas residuais dos alunos. Depois de usar os recursos pedagógicos que normalmente usa em suas aulas é que o professor usou as animações. Essa estratégia permitiu que os alunos pudessem perceber o seu ganho de aprendizado depois da aplicação das animações, ao terem suas dúvidas respondidas. Para avaliar esse ganho de aprendizado, foi feito um questionário sobre os assuntos onde os alunos tiveram maior dificuldade de entendimento. As respostas dos questionários mostram que as animações são um recurso pedagógico importante para o ensino-aprendizado de Química.

Na disciplina de pós-graduação, o foco da avaliação foi a utilização das animações em sala de aula. Essa avaliação foi favorecida pelo fato de, na sua quase totalidade, os alunos serem professores de Química. A experiência profissional desses professores, associada à forma como a disciplina foi organizada, permitiu avaliar diferentes estratégias para inserir animações numa aula convencional.

As duas avaliações complementam-se, no sentido em que permitem conhecer as dificuldades relacionadas com o aprendizado e também com o ensino de Química. Essa experiência servirá para direcionar o desenvolvimento de novas animações.

A avaliação das animações através da sua disponibilização na internet se, por um lado, não permite avaliar a contribuição que podem dar para o ensino-aprendizado de Química, por outro lado permite avaliar o interesse pelas animações. Esse interesse foi avaliado através das informações fornecidas pela estatística do canal do YouTube www.youtube.com/user/m770596 e do website www.quimica3d.com, como veremos a seguir.

5.3 - Avaliação das animações através da estatística do website www.youtube.com/user/m770596

A Figura 5.13 mostra o número de visualizações das animações no período que compreende este trabalho (Outubro de 2008 a Outubro de 2013). Podemos considerar que este número é elevado porque as animações são destinadas a um público restrito, formado por professores e alunos de Química de nível superior.



Figura 5.13 – Imagem obtida a partir do canal youtube mostrando o número de visualizações na data indicada.

A Figura 5.14 mostra os dez países onde as animações foram mais visualizadas.

LOCAIS PRINCIPAIS POR VISUALIZAÇÕES	VISUALIZAÇÕES			
Estados Unidos	166.773			
Índia	161.860			
Brasil	63.457			
Paquistão	31.770			
Canadá	31. <mark>4</mark> 96			
Reino Unido	26.025			
Alemanha	25.428			
México	24.398			
Tailândia	17.563			
Itália	16.093			

Figura 5.14 – Países que mais visualizaram as animações.

A figura 5.15 mostra os quatorze países de maior PIB do mundo. Se compararmos os países listados na Figura 5.14 com aqueles da Figura 5.15, podemos observar que entre os dez países que mais visualizaram as animações, oito estão na lista dos países de maior PIB. Isto pode ser um

indicativo de que nesses países há maior inclusão digital e uma maior busca por novos recursos pedagógicos.

Lugar ♦	País	PIB (milhões de USD)		
_	Mundo	69 659 626 ⁵		
- 1	União Europeia	17 577 691 ⁵		
1	Estados Unidos	15 094 025		
2	China	7 298 147		
3	Japão	4 992 908		
4	Alemanha	3 577 031		
5	França	2 776 324		
6	Srasil	2 569 471		
7	Reino Unido	2 417 570		
3	Itália Itália	2 198 730		
9	Rússia	1 850 401		
10	♦ Canadá	1 736 869		
11	india Índia	1 676 143		
12	Espanha	1 493 513		
3	🏥 Austrália	1 488 221		
14	● México	1 154 784		

Figura 5.15 – Os quatorze países de maior PIB em 2011.

Analisando os dados da Figura 5.16, vemos que a maior parte das visualizações foi feita por usuários com idade acima de vinte e seis anos, o que nos permite concluir que as animações estão sendo usadas preferencialmente por professores. Também podemos observar que a visualização das animações está concentrada nas faixas etárias acima de trinta e seis anos, o que é coerente porque a maior parte dos professores universitários tem idade superior a trinta e seis anos.

Apesar de ser esperado um número de visualizações significativo na faixa etária de alunos de ensino médio, pelo fato de algumas animações tratarem de conceitos de ensino médio, o Paquistão e a Índia chamam a

atenção pelo número elevado. Isto nos permite imaginar que os professores desses países, além das animações de nível médio, também estão usando as animações de nível superior.

LOCAI 8 PRINCIPAI 8 POR VI SUALIZAÇÕE 8	VI 8UALIZAÇÕE 8	13 A 17 ANO 8	18 A 24 ANO 8	26 A 34 ANO 8	35 A 44 ANO 8	46 A 64 ANO 8	66 A 84 ANO 8	A PARTIR DE 86 ANO 8	8EXO
Estados U	166.773	6,6%	10,0%	11,5%	20,1%	33,1%	16,0%	2,7%	
Îndia	161.860	22,5%	10,2%	12,3%	21,2%	23,6%	9,1%	1,0%	
Brasil	63.457	6,2%	8,4%	9,9%	13,5%	16,6%	43,0%	2,3%	
Paquistão	31.770	20,3%	17,0%	18,3%	14,8%	24,9%	4,6%	0,0%	
Canadá	31.496	12,9%	16,4%	15,9%	17,2%	23,5%	10,8%	3,3%	
Reino Unido	26.025	12,7%	12,1%	11,5%	18,7%	28,6%	12,6%	3,9%	
Alemanha	25.428	12,6%	16,4%	18,1%	16,2%	23,8%	10,1%	2,9%	
México	24.398	15,1%	14,7%	11,9%	18,5%	27,8%	11,1%	0,8%	
Tailândia	17.563	14,3%	13,7%	8,8%	14,6%	23,2%	24,4%	1,1%	
Itália	16.093	6,1%	6,6%	6,7%	13,8%	44,9%	20,8%	1,2%	
Apenas 10 locals di	isponiveis.						c + 1	- 10 de 10)-)-(

Figura 5.16 – Informações demográficas sobre a visualização das animações.

Entre os dez países que mais visualizaram as animações, estão representantes de quase todos os continentes do planeta. Como todas as animações envolvem uma simbologia que foi adotada especificamente para elas, podemos inferir que a linguagem criada ao longo deste trabalho vem sendo bem aceita em todo o mundo, uma vez que não recebemos qualquer tipo de crítica relacionada à mesma.

Para nos certificarmos de que nosso objetivo foi atingido, precisamos ter certeza de que o público que visualizou as animações é formado por alunos e professores. Vejamos como a estatística do YouTube pode dar essa convicção.

Se observarmos que o maior número de visualizações está concentrado nos países do hemisfério norte e que o calendário escolar nesses países vai de setembro a junho, devemos esperar um maior número de visualizações nesse período se o público for formado por alunos e professores - essa expectativa é confirmada através do gráfico da Figura 5.17.

Outra informação que mostra que as visualizações são feitas por alunos e professores é a queda significativa no período que corresponde às férias de fim de ano no hemisfério, que também coincide com as férias escolares no hemisfério sul. Se as animações fossem visualizadas para lazer, o maior número de visualizações deveria estar concentrado nesse período.

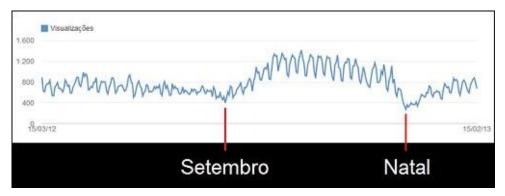


Figura 5.17 – Visualizações em períodos escolares.

Se observarmos a estatística do YouTube em um período de trinta dias, ficaremos ainda mais convencidos de que as visualizações são feitas preferencialmente por alunos e professores. Baseados no gráfico da Figura 5.18, podemos observar que o menor número de visualizações corresponde ao domingo e que o maior número de visualizações acontece no meio da semana. Esta informação permite-nos inferir que a visualização das animações é feita, preferencialmente, por alunos e professores porque se as visualizações não estivessem sendo feitas por alunos e professores, o maior número de visualizações aconteceria no final de semana, quando as pessoas têm mais tempo para lazer.

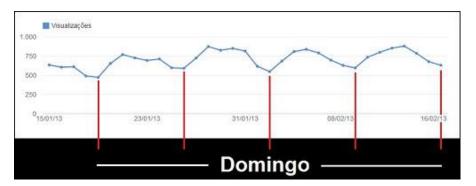


Figura 5.18 – Visualizações das animações num período de trinta dias.

Também mencionamos na introdução deste trabalho que nosso objetivo era desenvolver animações para os assuntos em que os alunos têm maior dificuldade de abstração.

A ligação covalente é a ligação química em que os alunos apresentam maior dificuldade de abstração, porque é ensinada a partir dos resultados da teoria quântica. A interpretação da densidade de probabilidade radial e angular, resultantes da solução da equação de Schroedinger, está entre os conceitos mais difíceis de serem ensinados e aprendidos. Esta dificuldade é confirmada pela análise das informações da Figura 5.19, obtida no canal YouTube, que mostra que as cinco animações mais visualizadas estão relacionadas com a teoria quântica.

VÍDEO	VISUALIZAÇÕES ↓		
Orbital Molecular Theory	225.961		
s and p orbitals, orbitais s e p	173.593		
Atomic orbitals - electron configuration of Sca	81.716		
atomic d orbitals	49.205		

Figura 5.19 – As cinco animações mais visualizadas.

Uma pergunta que precisamos responder, para avaliar este trabalho, é se os alunos e professores estão realmente interessados nas animações. Poderíamos comparar o YouTube com uma sala de aula onde tanto professores, quanto alunos, têm a liberdade de entrar e sair quando desejarem. Se descobrirmos como estes se comportam, conheceremos o seu interesse pelas animações.

Para investigar esse interesse, usaremos como exemplo a segunda animação mais visualizada (orbitais **s** e p), por representar o comportamento das demais animações. A retenção de público para esta animação, mostrada na Figura 5.20, mostra que 45% dos professores e alunos que entraram na "sala" permaneceram até o final. Também podemos observar, na Figura 5.20, que a duração média da visualização foi de 68%, o que significa que as pessoas assistiram em média 54 segundos dos 76 segundos de duração da animação. Estas informações são um indicativo do elevado interesse de alunos e professores por este tipo de recurso pedagógico.

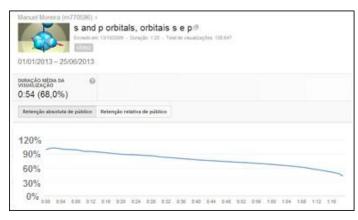


Figura 5.20 – Retenção de público.

A estatística do YouTube para esta animação, mostra que o maior número de visualizações ocorreu nos países de maior PIB, com excessão apenas da Colômbia e da Argentina, como mostrado na Figura 5.21. Este comportamento, que já foi mencionado anteriormente, também é observado para as demais animações.

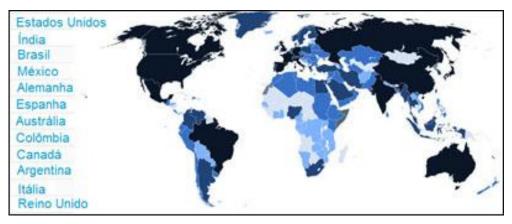


Figura 5.21 – Os países indicados na cor mais escura são os que mais visualizaram a animação dos orbitais **s** e **p**.

5.4 - Avaliação das animações através da estatística do website www.quimica3d.com

As animações foram disponibilizadas para download no website www.quimica3d.com com o objetivo de poderem ser incluídas em apresentações de PowerPoint[®] (ou reproduzidas diretamente) para serem usadas em sala de aula. Para avaliar a utilização das animações, tanto por professores quanto por alunos, foi criado um formulário que precisa, obrigatoriamente, ser preenchido para poder fazer o download das animações. Nesse formulário são solicitadas as seguintes informações: email, nome, sexo, ocupação, companhia/escola e país. Através destas informações foi possível saber que 12764 usuários fizeram download de 364768 animações em 104 países entre Dezembro de 2010 e Fevereiro de 2013, o que significa que cada usuário fez em média, download de 30 animações. Também foi possível saber que esses usuários são formados por 54% de professores, 46% de estudantes, sendo 94% dos professores e estudantes ligados ao ensino superior ou instituições de pesquisa e que 6% dos professores ligados ao ensino médio.

Os países de onde se originaram os downloads foram: Argentina, Bolívia, Canadá, Chile, Colômbia, Costa Rica, Equador, Estados Unidos,

Guatemala, Haiti, Jamaica, México, Nicarágua, Panamá, Paraguai, Peru, Porto Rico, República Dominicana, Uruguai, Venezuela, Albânia, Alemanha, Áustria, Bélgica, Bulgária, Dinamarca, Escócia, Eslováquia, Eslovênia, Espanha, Estônia, Finlândia, França, Grécia, Holanda, Hungria, Inglaterra, Irlanda, Itália, Letônia, Lituania, Macedônia, Noruega, Polônia, Portugal, República Sérvia, República Tcheca, Romênia, Russia, Suécia, Suiça, Ucrânia, Arábia Saudita, Armênia, Azerbanistão, Emirados Árabes, Gaza, Geórgia, Iêmen, Iraque, Israel, Jordânia, Kwait, Líbano, Omã, Qatar, Síria, Turquia, Afeganistão, Austrália, Bangladesh, Cazaquistão, Coréia, Curdistão, Filipinas, Hong Kong, Índia, Indonésia, Irã, Japão, Malásia, Austrália, Nova Zelândia, Paquistão, Singapura, Sri Lanka, Tailândia, Taiwan, Vietnã, África do Sul, Argélia, Egito, Etiópia, Gana, Líbia, Marrocos, Moçambique, Nigéria, Quênia, Ruanda, Somália, Sudão, Tunísia.

Estes dados estatísticos mostram que tanto os países mais desenvolvidos do planeta, quanto os menos desenvolvidos e aqueles em desenvolvimento, fizeram download das animações. Podemos inferir que as animações, além de contribuirem para o ensino e aprendizado de Química, também contribuem para a inclusão digital na medida em que, tanto países ricos, quanto pobres, têm o mesmo acesso às animações.

Outra forma de avaliar as animações foi através da realimentação que recebemos através dos nossos endereços eletrônicos, disponibilizados no website www.quimica3d.com. Recebemos emails de professores das mais reputadas universidades no mundo, algumas honradas com o prêmio Nobel. O conteúdo da maior parte desses emails é parecido com os dois que são mostrados a seguir.

```
> Ludwig A. Mayer
> Chemistry Department
> San Jose State University
> San Jose, CA 95192-0101
> vc 408.924.4952
> fx 408.924.4945
> Ludwig.Mayer@sjsu.edu
> Date: Tue, 26 Oct 2010 11:18:56 -0700
> To: m770596@hotmail.com
> From: lamayer@email.sjsu.edu
> Subject: Updating YouTube BCC Structures?
> Dear Manuel Moreira Baptista,
> I wish to commend as well as thank you for making available the
> results of your efforts to provide visually stunning animation useful
> for teaching and learning many principles of the chemical and
> material sciences. When lecturing, being able to communicate events
> in time and directionality in space in the nanoscale domain, is, as
> you seem to realize instinctively, equivalent to the Holy Grail of
> chemistry teaching and learning.
> I am finding many of your videos at your web site and your YouTube
> channel to be a great asset in my lectures. I find them equally
> useful as embedded links in the digital lecture notes that I produce
> for my general chemistry class.
> I am currently discussing extended structure solids in my course and
```

> Please accept my sincerest thanks for sharing it with the teaching community.

> will use many of your videos.

> Regards.

> I am tremendously impressed by your work.

Dear Pedro Faria and Manuel Moreira.

I came across a video of yours on youtube, showing a 3D animation of the Bravais lattices. I also had a look at your http://quimica3d.com/ website. I would like to congratulate you for the excellent work with 3D modeling. The 3D constructions and animations are very useful for university teaching. I would like to ask for your permission to use the youtube video in my undergraduate teaching course:

Materials Course Electrical and Computer Engineering Democritus University of Thrace Greece

Again, congratulations for the work,

Yours Sincerely,

Michail Kiziroglou

Dr. Michail Kiziroglou
Research Associate
Optical & Semiconductor Devices
Electrical and Electronic Engineering
Imperial College London
London SW7 2AZ
United Kingdom
Mob: +30 6972 930359

Tel: +44 (0)20 7594 6216 Fax: +44 (0)20 7594 6308

e-mail: m.kiziroqlou@imperial.ac.uk

É importante deixar registrado que a maior parte dos emails foram enviados por professores de Química, como é o caso do email do professor Ludwig A. Mayer, mas uma grande parte, para nossa surpresa, foram enviados por professores de geologia e de engenharia (materiais, metalurgia, eletrônica), como é o caso do email do professor Michail Kiziroglou. Foi então que percebemos que as animações sobre retículos cristalinos, desenvolvidas para serem usadas nas disciplinas de Química Geral e Química do Estado Sólido, também estavam sendo usadas por professores de outras áreas.

6 - COMENTÁRIOS FINAIS

A avaliação feita através das respostas dos questionários aplicados no IQ/UNICAMP nas disciplinas QG101 e QP443, e através das informações obtidas através da estatística do YouTube e do website www.quimica3d.com mostrou que o objetivo deste trabalho foi plenamente alcançado. Essa avaliação permitiu-nos concluir que as animações em 3D desenvolvidas neste trabalho podem contribuir significativamente para o ensino e para o aprendizado de Química.

Através dos vários comentários recebidos, semelhantes ao do professor Ludwig A. Mayer, da San Jose State University, California, dizendo: "I am tremendously impressed by your work. Please accept my sincerest thanks for sharing it with with the teaching community" e do professor Michail Kiziroglou, do Imperial College London, dizendo: "I would like to congratulate you for the excellent work with 3D modeling", podemos inferior que as animações estão ajudando os professores em sua atividade docente.

Considerando, também, que em um período de aproximadamente dois anos foram baixadas mais de 360 mil cópias das animações, disponibilizadas através do website www.quimica3d.com, em mais de 100 países, e que 95% dos usuários que fizeram download eram professores e alunos universitários, podemos inferir que as animações estão contribuindo para o ensino de Química no nível superior. Se observarmos que entre os países que fizeram download das animações estão os mais ricos (Estados Unidos, Canada, Alemanha, França, Inglaterra, Itália) e também os mais pobres (Haiti, Nicarágua, Moçambique, Somália, Curdistão, Cazaquistão) podemos inferir que as animações contribuem para a inclusão digital porque, tanto os países ricos, quanto os países pobres, têm o mesmo acesso às animações.

Outra informação importante é a reprodução das animações por dispositivos móveis (10.9%), como pode ser visto na Figura 6.1. Esta

informação confirma um comportamento que já era esperado, ou seja, que os alunos iriam visualizar as animações através de celulares, como foi mencionado na introdução do trabalho (Benedict e Pence, 2012):

A sociedade está se movendo rapidamente dos computadores desktop e laptop para os dispositivos móveis, como por exemplo, os smartphones. De acordo com o "The Pew Internet and American Life Project", mais de 75% dos adolescentes nos Estados Unidos possuem seu próprio celular.



Figura 6.1 – Principais locais de reprodução das animações.

Através das informações da Figura 6.1, podemos inferir que os professores estão usando as animações em suas aulas porque 9.2% das visualizações foram feitas por *players* incorporados a outros sites, o que sugere que os professores estão incluindo as animações em suas aulas através de *embeds* em suas *webpages*.

Como afirmamos anteriormente, as animações foram disponibilizadas para alunos professores. através de download do website YouTube www.quimida3d.com através do canal do е www.youtube.com/user/m770596. Ao disponibilizarmos as animações pretendíamos que fossem usadas no ensino-aprendizado de Química. A análise das informações fornecidas pelos dois websites permitiu-nos concluir que esse objetivo foi atingido, muito além da nossa expectativa inicial.

A análise das respostas dos questionários aplicados no IQ/UNICAMP nas disciplinas QG101 e QP443 também nos permitiram concluir que o

objetivo deste trabalho foi atingido. A justificativa para esta afirmação é que as animações ajudaram a solucionar um dos maiores problemas do ensino de Química, que é a dificuldade de abstração dos alunos, ou seja, a dificuldade de criar mentalmente imagens tridimensionais referentes aos conceitos químicos abstratos.

A análise das respostas dos questionários revelou que em aulas preparadas com animações, a capacidade de abstração dos alunos não é mais um requisito essencial, as distorções de entendimento dos conceitos químicos são evitados, a representação do pensamento é facilitado, e todos os alunos imaginam a mesma coisa da mesma maneira.

Quanto ao formato das animações, percebemos que são possíveis pelo menos dois: um formato sem legendas e sem narração e um formato com legendas e narração.

O formato sem legendas e sem narração é o mais apropriado para ser usado pelo professor em sala de aula, porque lhe dá a liberdade de criar seu próprio discurso. Animações sem legendas e sem narração, entretanto, só são úteis para alunos que já conhecem os conceitos nelas contidos.

O formato com legendas e narração, por outro lado, é inadequado para ser usado em sala de aula porque o discurso da animação iria competir com o discurso do professor e certamente iria roubar a atenção dos alunos. Esse formato, entretanto, é o mais adequado para ser usado em webpaginas, plataformas com o YouTube, além de livros eletrônicos. As legendas e a narração dão ao aluno a liberdade de criar seu próprio ritmo de aprendizado porque dispensam o acompanhamento do professor. Como as animações estão disponíveis para visualização em todo o mundo, seria desejável que tivessem narração na língua nativa de cada país, mas como isso não é possível, a solução mais viável, é que tenham narração e legendas em inglês.

Como pode ser observado, demos grande ênfase à contribuição das animações para o ensino-aprendizado de Química, o que é natural, por acreditarmos que as animações são um dos melhores recursos pedagógicos atualmente. Esta não é, entretanto, apenas a nossa opinião. Como podemos observar na introdução deste trabalho, as conclusões a que chegamos são confirmadas por dezenas de artigos das mais conceituadas revistas científicas. As contribuições das animações para o ensino-aprendizado de Química são inquestionáveis, mas todos nós sabemos que todo recurso pedagógico novo traz vantagens e desvantagens. Para não parecer que as animações só apresentam vantagens, vejamos a opinião do professor P.W. Atkins.

O professor Atkins visitou o IQ/UNICAMP em agosto de 2011, e nessa época foram selecionados 5 alunos de graduação e 5 de pós-graduação para participarem de uma conversa informal, onde cada aluno tinha o direito de fazer uma pergunta. Como tivemos o privilégio de ter este contato com o Prof. Atkins, não poderíamos deixar de perguntar qual era a opinião dele sobre a contribuição que as animações podem dar para o ensino de Química. Os pontos mais importantes de sua resposta foram:

- Animações podem contribuir muito com o ensino de Química:
- O aprendizado está se tornando muito fácil;
- Animações interativas são boas;
- Livros eletrônicos interativos precisam de animações;
- Animações representam a visão do que está acontecendo – mas você não construiu a visão;
- Você não é encorajado a imaginar;
- Animações não encorajam você a construir o modelo;
- É muito perigoso lidar com animações;
- Animações podem destruir o conhecimento.

É importante observar que o professor Atkins, em sua resposta, enumera algumas vantagens das animações, mas não deixa de destacar algumas desvantagens. Entre as desvantagens, a mais polêmica, é a que supõe que as animações podem destruir o conhecimento. O professor Atkins justificou essa afirmação dizendo que, por trás dos conceitos químicos existem modelos matemáticos. O uso de imagens, pela sua clareza e pelo seu poder de comunicação, podem fazer com que o formalismo matemático deixe de ser utilizado pelo professor em suas aulas. Dessa forma, os alunos iriam aprender química com imagens e não fariam a associação com os modelos matemáticos. Se isso se confirmar criaremos uma cultura onde os alunos, que serão os futuros cientistas, se acostumarão a pensar sem os modelos matemáticos. Por esta razão, em sua opinião, a substituição dos modelos matemáticos pelas imagens, podem destruir o processo de criação de conhecimento. Na opinião do professor Atkins, as animações não devem ter a pretensão de substituir os modelos matemáticos, devem ser usadas para aumentar o seu entendimento.

Quem desenvolve animações, além da responsabilidade de ser fiel aos modelos matemáticos, deve lembrar que repousa em suas mãos um dos recursos pedagógicos mais importantes para o ensino de Química. Através das animações podemos comunicar uma idéia em qualquer idioma.

7 - PERSPECTIVAS PARA O FUTURO

- Desenvolvimento de novas animações para serem usadas em sala de aula;
- Escrever os textos das animações. As animações deste trabalho foram desenvolvidas para serem usadas em sala de aula e por este motivo não têm legendas, nem narração, para não competirem com o discurso do professor. É, entretanto, desejável que tenham material escrito disponível na internet, uma espécie de roteiro para orientar os professores a inseri-las em suas aulas;
- Desenvolver animações com legenda e narração em inglês. Estas animações poderiam ser usadas através da internet sem depender de um professor para explicá-las;
- Desenvolver animações interativas baseadas na internet. O Blender[®] permite criar este tipo de animações. A grande aplicação seria criar experimentos virtuais. Como, com raras exceções, não existem laboratórios nas escolas de ensino médio, a criação de laboratórios virtuais daria uma grande contribuição para o ensino-aprendizado de Química;
- Escrever e-books sobre assuntos de Química que exijam visualização tridimensional e que justifiquem, portanto, a utilização de animações em 3D.

8 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Antunes, M., Pacheco, M. A. R., Giovanela, M. Design and Implementation of an Educational Game for Teaching Chemistry in Higher Education, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (1), 517-521.

Barak, M., Ashkar, T., Dori, Y. J. Learning science via animated movies: Its effect on students" thinking and motivation, Computers & Education, 2011, 56, 839–846.

Benedict, L., Pence, H. E. Teaching Chemistry Using Student-Created Videos and Photo Blogs Accessed with Smartphones and Two-Dimensional Barcodes, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (2), 492-496.

Blender, http://www.youtube.com/watch?v=VbLPcE5zQwQ, acessado em 18/02/2013 às 00:09.

Bragg, W.L. The Diffraction Short Electromagnetic Waves by a Crystal, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1913, 17, 43.

Bragg, W.L., James, R.W., Bosanquet, C.H. The intensity of Reflexion of X-Rays by Rock-Salt, Phil. Mag., 1921, 41 (243), 309.

Bragg W.L., James R.W., Bosanquet, C.H. The intensity of Reflexion of X-Rays by Rock-Salt, Part II, Phil. Mag., 1921, 42 (247), 1.

Burke, K. A., J. Greenbowe, T. J., A. Windschitl, M. A. Developing and Using Conceptual Computer Animations for Chemistry Instruction, Journal of Chemistry Education, 1998, 75 (12), 1658-1661.

Cady, S. G. Use of Pom Pons To Illustrate Cubic Crystal Structures, Journal of Chemical Education, 1997, 74 (7), 794-795.

Canto, E.L. do, Peruzzo, F.M. Química: na abordagem do cotidiano, 2. ed., São Paulo: Editora Moderna, 2002.

Carvalho, D.C. Química Moderna, 1. ed., São Paulo: Editora Scipione, 1997.

Cass, M. E. Visualizing Metal Tris Chelates, Journal of Chemical Education, 2008, 85 (5), 750-751.

Cass, M. E., Rzepa, H. S., Rzepa, D. R., Williams, C. K. The Use of the Free, Open-Source Program Jmol To Generate an Interactive Web Site To Teach

Molecular Symmetry, Journal of Chemical Education, 2005, 82 (11), 1736-1740.

Chittaro, L., Ranon, R. Web3D technologies in learning, education and training: Motivations, issues, opportunities, Computers & Education, 2007, 49, 3–18.

Covalent bond animation, http://www.youtube.com/watch?v=fPs1pJSqEBU, acessado em 18/02/2013 às 00:48.

Cody, J. A., Craig, P. A., Loudermilk, A. D., Yacci, P. M., Frisco, S. L., Milillo, J. R. Design and Implementation of a Self-Directed Stereochemistry Lesson Using Embedded Virtual Three-Dimensional Images in a Portable Document Format, 2012, 89 (1), 29-33.

Coulson, C.A. Self-consistent field for molecular hydrogen, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1938, 34 (2), 204-212.

Dalgarno, B., Bishop, A. G., Adlong, W., Bedgood Jr, D. R. Effectiveness of a Virtual Laboratory as a preparatory resource for Distance Education chemistry students, Computers & Education, 2009, 53, 853–865.

Dissociation of salt, http://www.youtube.com/watch?v=AVhE9pcWVmM, acessado em 18/02/2013 às 00:43.

Donaghy, J. K., Saxton, K. J. Connecting Geometry and Chemistry: A Three-Step Approach to Three-Dimensional Thinking, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (7), 917-920.

Fleming, S.A., Savage, P.B., Hart, G.R. Organic Chemistry, W.W.Norton&Company Inc., 1998.

Franz, A. K. Organic Chemistry YouTube Writing Assignment for Large Lecture Classes, Journal of Chemistry Education, 2012, 89 (3), 497-501.

Frey, C. A., Mikasen, M. L., Griep, M. A. Put Some Movie Wow! in Your Chemistry Teaching, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (7), 1138-1143.

Gillespie, R.J. Teaching molecular geometry with the VSEPR model, Journal of Chemical Education, 2004, 81 (3), 298–304.

Greenwood, N.N., Earnshaw, A. Chemistry of the Elements, 2nd edition, Oxford: Butterworth-Heinemann, 1997.

Harle, M., Towns, M. A Review of Spatial Ability Literature, Its Connection to Chemistry, and Implication for Instruction, Journal of Chemical Education, 2011, 88(3), 351-360.

He, Y., Swenson, S., Lents, N. Online Video Tutorials Increase Learning of Difficult Concepts in an Undergraduate Analytical Chemistry Course, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (7), 1128–1132.

Huheey, J.E., Keiter, E.A., Keiter, R.L. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4th ed, New York: Harper-Collins College Publishers, 1993.

lonic bond animation, http://www.youtube.com/watch?v=Rcl6D5K7yfs, acessado em 18/02/2013 às 00:33.

lonic bond example, http://www.youtube.com/watch?v=3r1GGS9RNUQ, acessado em 18/02/2013 às 00:35.

Jagodzinski, P., Wolski, R. Assessing the Educational Effectiveness of Films of Chemical Experiments for Educating Deaf–Mute Junior High and High School Students, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (7), 1122-1127.

Jmol, http://www.youtube.com/watch?v=jGAj2KIItdY, acessado em 18/02/2013 às 00:15.

Jmol Colors, http://jmol.sourceforge.net/jscolors/, acessado em 21/06/2009 às 14:30.

Jones, L.L., Atkins, P.W. Chemistry:molecules, matter, and charge, 4th edition, W.H. Freeman Publishers, USA, 2002.

Kinemage, http://www.youtube.com/watch?v=p_qEYLekpWc, acessado em 18/02/2013 às 00:11.

Kotz, J.C., Treichel, P.M., Weaver, G.C. Chemistry and Chemical Reaction, 6th edition, Thomson Learning Inc., Canada, 2006.

Lewis, G.N. The Atom and the Molecule, Journal of the American Chemical Society, 1916, 38 (4), 762-785.

Limniou M., Roberts, D., Papadopoulos, N. Full imersive virtual environment CAVE™ in chemistry education, Computers & Education, 2008, 51 (2), 584-593.

Korakakis, G., Boudouvis, A., Palyvos, J., Pavlatou, E. A. The impact of 3D visualization types in instructional multimedia applications for teaching science. Procedia - Social and Behavioral Sciences, 2012, 31, 145-149.

Lichter, J. Using YouTube as a Platform for Teaching and Learning Solubility Rules, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (7), 1133-1137.

Marson, G. A., Torres, B. B. Fostering Multirepresentational Levels of Chemical Concepts: A Framework To Develop Educational Software, Journal of Chemical Education, 2011, 88 (10), 1616-1622.

McRae, C., Karuso, P., Liu, F. ChemVoyage: A Web-Based, Simulated Learning Environment with Scaffolding and Linking Visualization to Conceptualization, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (7), 878-883.

Pauling, L. The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journal of the American Chemical Society, 1931,53(4),1367-1400.

http://osulibrary.oregonstate.edu/specialcollections/coll/pauling/bond/papers/1 931p.3.html, acessado em 26/03/2012 às 20:40.

Pinto, G. An Example of Body-Centered Cubic Crystal Structure: The Atomium in Brussels as an Educative Tool for Introductory Materials Chemistry, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (5), 921-924.

Ploetzner, R., Lowe, R. A systematic characterisation of expository animations, Computers in Human Behavior, 2012, 28, 781-794.

Pursell, D. P. Adapting to Student Learning Styles: Engaging Students with Cell Phone Technology in Organic Chemistry Instruction, Journal of Chemical Education, 2009, 86 (10), 1219–1222.

Rasmol, http://www.youtube.com/watch?v=J2W1QvSk1xc, acessado em 18/02/2013 às 00:12.

Reaction of sodium & chlorine, http://www.youtube.com/watch?v=blkA1UWbYWw, acessado em 18/02/2013 às 00:39.

Roosendaal, T., Selleri, S. The official Blender 2.3 Guide – the open 3D creation suite, Blender Foundation, Netherlands, 2004.

Ruddick, K. R., Parrill, A. L., Petersen, R. L. Introductory Molecular Orbital Theory: An Honors General Chemistry Computational Lab As Implemented Using Three-Dimensional Modeling Software, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (9), 1358-1363.

Santos Filho, P.F. Estrutura Atômica e Ligação Química, 1.ed., Campinas: Autor-Editor, 2000.

Schiltz, H. K, Oliver-Hoyo, M. T. Physical Models That Provide Guidance in Visualization Deconstruction in an Inorganic Context, Journal of Chemical Education, 2012, 89 (4), 873-877.

Shriver, D.F., Atkins, P.W. Química Inorgânica, tradução: Maria Aparecida Gomes, 3.ed., Porto Alegre, Bookman, 2003.

Sidgwick, N.V., Powell, H.M. Stereochemical Types and Valency Groups, Proc.Roy.Soc.A 176, 153–180, 1940, Bakerian Lecture, http://www.jstor.org/pss/97507

Sodium and water, http://www.youtube.com/watch?v=7ZWDK8ACckI, acessado em 18/02/2013 às 00:37.

Sodium in chlorine gas, http://www.youtube.com/watch?v=mNNhKJzWTdQ, acessado em 18/02/2013 às 00:36.

Wells, A.F. Structural Inorganic Chemistry, 3d Edition, Oxford University Press, (1962).

Whelan, R. J., Zare, R. N. Teaching Effective Communication in a Writing-Intensive Analytical Chemistry Course, Journal of Chemical Education, 2003, 80 (8), 962-966.