

UNIVERSIDADE LUTERANA DO BRASIL
PRÓ-REITORIA ACADÊMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

PRODUTO EDUCACIONAL

**SEQUÊNCIA DIDÁTICA PARA O ENSINO DE REGIOQUÍMICA DA REAÇÃO DE
SUBSTITUIÇÃO AROMÁTICA ELETROFÍLICA COM USO DE MODELAGEM
MOLECULAR**

Autor: Cleitor Jacob Konrad

Orientador: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto

Canoas, 2023

CLEITOR JACOB KONRAD

**SEQUÊNCIA DIDÁTICA PARA O ENSINO DE REGIOQUÍMICA DA REAÇÃO DE
SUBSTITUIÇÃO AROMÁTICA ELETROFÍLICA COM USO DE MODELAGEM
MOLECULAR**

Produto Educacional vinculado à Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Área de Concentração: Tecnologias de Informação e Comunicação para Ensino de Ciências e Matemática (TIC).

Orientador: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto

Canoas

2023

FICHA TÉCNICA

Título: Sequência Didática para o Ensino de Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica com Uso de Modelagem Molecular

Autor: Cleitor Jacob Konrad

Orientador: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto

Instituição: Universidade Luterana do Brasil (ULBRA)

Programa: Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática

Área de Concentração: Tecnologias de Informação e Comunicação para Ensino de Ciências e Matemática

Ano: 2023

Tipo de Produto Educacional: Sequência Didática

Público-Alvo: Estudantes do 3º ano do Ensino Médio e Curso Técnico em Química

Nível de Ensino: Ensino Médio e Educação Profissional Técnica

Componente Curricular: Química Orgânica

Carga Horária Total: 6 horas (12 encontros de 30 minutos)

Materiais Necessários:

- Computadores com sistema operacional Windows
- Software Arguslab (gratuito)
- Conexão com internet (para download inicial)
- Projetor multimídia (opcional, para demonstrações)

Licença: Creative Commons CC BY-NC-SA 4.0

Disponível em: Repositório Institucional ULBRA e EduCAPES

SUMÁRIO

1. APRESENTAÇÃO	6
1.1 Delimitação do Produto	6
1.2 Público-Alvo	7
1.3 Objetivos do Produto Educacional	7
1.4 Justificativa Pedagógica	8
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	9
2.1 Teoria da Mediação Cognitiva (TMC)	9
2.2 Reação de Substituição Aromática Eletrofílica (SAE)	10
2.3 Modelagem Molecular no Ensino de Química	11
3. SEQUÊNCIA DIDÁTICA	12
3.1 Visão Geral das Atividades	12
3.2 Detalhamento dos Encontros	14
4. ORIENTAÇÕES AO PROFESSOR	20
4.1 Pré-requisitos	20
4.2 Infraestrutura Necessária	20
4.3 Adaptações Possíveis	21
4.4 Potencialidades e Limitações	21
4.5 Sugestões de Avaliação	22

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	23
REFERÊNCIAS	24
APÊNDICES	26
Apêndice A – Pré-teste e Pós-teste (Experimento Piloto)	
Apêndice B – Pré-teste e Pós-teste (Experimento Definitivo)	
Apêndice C – Iniciando o Arguslab	
Apêndice D – Construindo a Molécula da Água e Cálculos de Ligação/Ângulo	
Apêndice F – Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Amônia	
Apêndice G – Otimizando Geometria de uma Molécula	
Apêndice H – Construindo a Molécula do Benzeno	
Apêndice I – Construindo a Molécula do Clorobenzeno	
Apêndice J – Construindo a Molécula do Fenol	
Apêndice K – Construindo a Molécula do Nitrobenzeno	

Nota: O Apêndice E (Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Água) está integrado ao Apêndice D, razão pela qual a numeração passa de D para F.

1. APRESENTAÇÃO

Este Produto Educacional consiste em uma sequência didática desenvolvida para o ensino de Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica (SAE) utilizando o software de modelagem molecular Arguslab. O material foi elaborado a partir de pesquisa realizada no âmbito do Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil.

A presente sequência didática surgiu da necessidade de promover uma abordagem inovadora para o ensino de conceitos abstratos da Química Orgânica, especialmente aqueles relacionados à reatividade de compostos aromáticos. A dificuldade dos estudantes em visualizar estruturas moleculares tridimensionais e compreender a distribuição eletrônica nas moléculas motivou o desenvolvimento desta proposta.

O ensino de Química com foco em pesquisa e desenvolvimento de tecnologia tem sido uma meta perseguida no campo educacional, conforme apontam os Parâmetros Curriculares Nacionais. No entanto, o ensino baseado no modelo de transmissão ainda existe, com forte ênfase na memorização de símbolos, estruturas e fórmulas. Esta sequência didática propõe uma alternativa metodológica que utiliza recursos computacionais para promover a aprendizagem significativa.

1.1 Delimitação do Produto

Este produto educacional é uma sequência didática composta por 12 encontros de aproximadamente 30 minutos cada, totalizando 6 horas de atividades. As atividades envolvem o uso do software Arguslab para modelagem molecular, permitindo aos estudantes visualizar e manipular estruturas moleculares em três dimensões, bem como analisar mapas de potencial eletrostático.

O software Arguslab foi escolhido por ser gratuito, de fácil instalação e possuir funcionalidades adequadas ao nível de ensino proposto, incluindo: construção de moléculas em 3D, otimização de geometria molecular, cálculo de cargas parciais de Mulliken e geração de mapas de potencial eletrostático.

1.2 P blico-Alvo

Este material   destinado a:

- Estudantes do 3º ano do Ensino M dio Regular
- Estudantes do Curso T cnico em Qu mica Integrado ao Ensino M dio
- Estudantes de gradua o em Qu mica (como material introdut rio)

  recomend vel que os estudantes j  possuam conhecimentos b sicos de Qu mica Org nica, incluindo fun es org nicas, nomenclatura de compostos org nicos e conceitos de polaridade molecular.

1.3 Objetivos do Produto Educacional

Objetivo Geral:

Promover a aprendizagem de conceitos relacionados   Regioqu mica da Rea o de Substitui o Arom tica Eletrof lica por meio de atividades de modelagem molecular computacional.

Objetivos Espec ficos:

- Desenvolver habilidades visuoespaciais nos estudantes atrav s da manipula o de modelos moleculares tridimensionais
- Promover a compreens o da distribui o eletr nica em mol culas arom ticas atrav s de mapas de potencial eletrost tico
- Facilitar o entendimento dos conceitos de grupos ativadores e desativadores em rea es de SAE
- Possibilitar a visualiza o das posi es orto, meta e para em an is arom ticos substitu dos
- Estimular o pensamento cient fico atrav s da an lise de dados computacionais
- Desenvolver compet ncias relacionadas ao uso de tecnologias digitais no estudo da Qu mica

1.4 Justificativa Pedagógica

O ensino de Química Orgânica tradicionalmente enfrenta desafios relacionados à abstração dos conceitos, especialmente quando se trata de estruturas moleculares e reatividade química. A utilização de recursos computacionais, como softwares de modelagem molecular, tem se mostrado uma estratégia eficaz para superar essas dificuldades, permitindo que os estudantes visualizem e manipulem estruturas moleculares de forma interativa.

A habilidade visuoespacial é fundamental para a compreensão da Química. Conforme aponta a literatura, esta habilidade envolve pensar em imagens, bem como a capacidade de perceber, transformar e recriar diferentes aspectos do mundo visual e espacial. Os softwares de modelagem molecular permitem o desenvolvimento dessas habilidades através da manipulação de modelos tridimensionais.

A Teoria da Mediação Cognitiva (TMC) fundamenta esta proposta ao reconhecer que o uso de tecnologias digitais pode promover ganhos cognitivos significativos, especialmente quando aliado a estratégias pedagógicas adequadas. O software Arguslab atua como um mecanismo externo de mediação hipercultural, auxiliando os estudantes no processamento de informações complexas relacionadas à estrutura e reatividade molecular.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Teoria da Mediação Cognitiva (TMC)

A Teoria da Mediação Cognitiva (TMC), desenvolvida por Souza (2004), fundamenta teoricamente esta sequência didática. A TMC é uma teoria contextualista e construtivista que estuda o processamento da informação e a inteligência humana, buscando compreender as mudanças cognitivas associadas ao uso de tecnologias de informação e comunicação.

Segundo a TMC, a cognição humana consiste em um fenômeno de processamento de informações que ocorre, em grande parte, fora do cérebro. O processo pelo qual os seres humanos dependem de estruturas externas para complementar o processamento de informações é denominado mediação cognitiva.

A teoria propõe quatro formas de mediação:

- Mediação Psicofísica: relacionada às características sensoriais e fisiológicas
- Mediação Social: interação entre indivíduos
- Mediação Cultural: sistemas simbólicos e artefatos culturais
- Mediação Hipercultural: uso de tecnologias da informação

No contexto desta sequência didática, o software Arguslab atua como mecanismo externo de mediação hipercultural. Os estudantes desenvolvem drivers (mecanismos internos) que permitem a interação eficaz com o software, possibilitando a compreensão de representações moleculares tridimensionais e propriedades eletrônicas.

2.2 Reação de Substituição Aromática Eletrofílica (SAE)

A Reação de Substituição Aromática Eletrofílica é uma das reações mais importantes da Química Orgânica, característica de compostos aromáticos como o benzeno e seus derivados. Nesta reação, um átomo de hidrogênio do anel aromático é substituído por um eletrófilo.

Quando já existe um substituinte no anel benzênico, a orientação do segundo substituinte depende da natureza do grupo já presente. Os substituintes são classificados em:

Grupos Ativadores (orientadores orto/para):

São grupos que doam elétrons ao anel aromático, aumentando a densidade eletrônica nas posições orto e para. Exemplos: -OH, -NH₂, -OCH₃, -CH₃. Estes grupos tornam o anel mais reativo que o benzeno.

Grupos Desativadores (orientadores meta):

São grupos que retiram elétrons do anel aromático, deixando as posições meta com maior densidade eletrônica relativa. Exemplos: -NO₂, -COOH, -CN, -CO. Estes grupos tornam o anel menos reativo que o benzeno.

Tradicionalmente, este conteúdo é ensinado através de tabelas que os alunos devem memorizar, sem uma compreensão efetiva dos princípios subjacentes. A modelagem molecular permite visualizar a distribuição eletrônica real através dos mapas de potencial eletrostático, tornando o aprendizado mais significativo.

2.3 Modelagem Molecular no Ensino de Química

A modelagem molecular computacional é uma ferramenta poderosa para o ensino de Química, permitindo a visualização de estruturas moleculares tridimensionais, cálculos de propriedades moleculares e análise de superfícies de potencial eletrostático.

O Mapa de Potencial Eletrostático (MPE) é uma representação visual da distribuição de carga elétrica sobre a superfície molecular, utilizando cores para indicar regiões de maior ou menor densidade eletrônica. Convencionalmente:

- Cores azuis: indicam regiões com baixa densidade eletrônica ($\delta+$)

- Cores vermelhas: indicam regiões com alta densidade eletrônica ($\delta-$)
- Cores intermediárias (verde, amarelo): indicam regiões de densidade eletrônica intermediária

O software Arguslab é distribuído gratuitamente para plataforma Windows e oferece recursos como: construção de moléculas em 3D, otimização de geometria molecular usando métodos semi-empíricos (AM1), cálculo de cargas parciais de Mulliken e geração de mapas de potencial eletrostático.

3. SEQUÊNCIA DIDÁTICA

3.1 Visão Geral das Atividades

A sequência didática está organizada em 12 encontros, cada um com duração aproximada de 30 minutos, exceto o primeiro e o último encontro que têm duração de 60 minutos para aplicação dos testes diagnósticos.

Encontro	Conteúdo Proposto	Tempo	Apêndice
1	Pré-teste diagnóstico	60 min	A ou B
2	Instalação do software Arguslab	30 min	-
3	Primeiros passos: interface e molécula da água	30 min	C
4	Modelagem da molécula da amônia	30 min	C
5	Otimização de geometria molecular	30 min	G
6	Cálculo de ligação e ângulo - molécula da água	30 min	D
7	Cálculo de ligação e ângulo - molécula da amônia	30 min	F
8	Modelagem do benzeno e MPE	30 min	H
9	Modelagem do clorobenzeno e MPE	30 min	I
10	Modelagem do fenol e MPE	30 min	J
11	Modelagem do nitrobenzeno e MPE	30 min	K
12	Pós-teste e discussão final	60 min	A ou B

MPE = Mapa de Potencial Eletrostático

Nota: O Apêndice E (Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Água) encontra-se integrado ao Apêndice D.

3.2 Detalhamento dos Encontros

ENCONTRO 1: Aplicação do Pré-teste (60 min)

Objetivo: Diagnosticar os conhecimentos prévios dos estudantes sobre geometria molecular, polaridade, aromaticidade e reações de substituição aromática eletrofílica.

Procedimento: Aplicar o questionário diagnóstico (Apêndice A ou B) individualmente. Os estudantes devem responder às questões sem consulta a materiais. O professor deve esclarecer apenas dúvidas sobre o enunciado das questões.

ENCONTRO 2: Instalação do Software Arguslab (30 min)

Objetivo: Instalar o software Arguslab nos computadores dos estudantes.

Procedimento: O Arguslab é gratuito e disponível para Windows. Orientar os estudantes durante o processo de instalação, verificando se todos conseguiram instalar corretamente. Se a instalação for feita previamente, utilizar este encontro para uma introdução teórica sobre modelagem molecular.

ENCONTRO 3: Primeiros Passos no Software (30 min)

Objetivo: Familiarizar os estudantes com a interface do software e realizar a primeira modelagem.

Conteúdos: Interface do Arguslab, criação de arquivos, adição de átomos e ligações, salvamento de arquivos, construção da molécula da água.

Material de apoio: Apêndice C

ENCONTRO 4: Modelagem da Molécula da Amônia (30 min)

Objetivo: Construir a molécula da amônia e observar sua geometria tridimensional.

Conteúdos: Teoria VSEPR, geometria piramidal trigonal, par de elétrons não-ligante, representação 2D versus 3D.

Material de apoio: Apêndice C

ENCONTRO 5: Otimização de Geometria Molecular (30 min)

Objetivo: Compreender o conceito de otimização de geometria e sua importância.

Conteúdos: Otimização de geometria, métodos semi-empíricos (AM1), energia molecular, geometria de mínima energia.

Material de apoio: Apêndice G

ENCONTROS 6 e 7: Cálculos de Ligação e Ângulo (2 x 30 min)

Objetivo: Realizar medidas de comprimento de ligação e ângulos nas moléculas da água e da amônia.

Conteúdos: Comprimento de ligação (Ångströms), ângulo de ligação (graus), comparação com dados experimentais, polaridade molecular.

Encontro 6: Molécula da água (Apêndice D)

Encontro 7: Molécula da amônia (Apêndice F)

Discussão sugerida: Por que o ângulo de ligação na água (~104,5°) é menor que na amônia (~107°)?

ENCONTRO 8: Modelagem da Molécula do Benzeno (30 min)

Objetivo: Construir a molécula do benzeno e gerar seu Mapa de Potencial Eletrostático.

Conteúdos: Estrutura do benzeno, ligações conjugadas e ressonância, aromaticidade, cargas parciais de Mulliken, Mapa de Potencial Eletrostático.

Material de apoio: Apêndice H

Discussão sugerida: Observar a distribuição uniforme de cargas no anel benzênico e a simetria do MPE.

ENCONTROS 9, 10 e 11: Moléculas Aromáticas Substituídas (3 x 30 min)

Objetivo: Construir e analisar os MPEs de moléculas aromáticas com diferentes substituintes, compreendendo a orientação em reações de SAE.

Encontro 9 - Clorobenzeno (Apêndice I):

Observar como o cloro afeta a distribuição eletrônica no anel. O cloro é um caso especial: desativa o anel mas orienta orto/para devido à doação de elétrons por ressonância.

Encontro 10 - Fenol (Apêndice J):

Observar como o grupo hidroxila (-OH) doa elétrons ao anel, aumentando a densidade eletrônica nas posições orto e para. O fenol é um ativador forte.

Encontro 11 - Nitrobenzeno (Apêndice K):

Observar como o grupo nitro (-NO₂) retira elétrons do anel, deixando as posições meta com maior densidade eletrônica relativa. O nitro é um desativador forte.

Discussão Comparativa Sugerida:

- Comparar os MPEs das três moléculas com o do benzeno
- Identificar as regiões de maior densidade eletrônica em cada caso
- Relacionar a distribuição eletrônica com a orientação preferencial
- Discutir por que grupos doadores orientam orto/para e retiradores orientam meta

ENCONTRO 12: Pós-teste e Discussão Final (60 min)

Objetivo: Avaliar o aprendizado e promover discussão sobre os conceitos trabalhados.

Procedimento:

- Aplicar o pós-teste (mesmas questões do pré-teste) - 40 minutos
- Discussão final sobre as principais aprendizagens - 20 minutos

Questões para discussão:

- O que é um Mapa de Potencial Eletrostático e qual sua utilidade?
- Por que o grupo -OH orienta orto/para e o grupo -NO₂ orienta meta?
- Como a modelagem molecular ajudou a compreender a reatividade de compostos aromáticos?
- Quais foram as maiores dificuldades encontradas durante as atividades?

4. ORIENTAÇÕES AO PROFESSOR

4.1 Pré-requisitos

Antes de iniciar esta sequência didática, é recomendável que os estudantes tenham conhecimentos básicos sobre:

- Ligações químicas (covalentes, iônicas)
- Geometria molecular básica (teoria VSEPR)
- Funções orgânicas (hidrocarbonetos aromáticos, álcoois, compostos nitrogenados)
- Conceitos de eletronegatividade e polaridade
- Noções básicas de informática

4.2 Infraestrutura Necessária

- Laboratório de informática com computadores Windows (individual ou em duplas)
- Software Arguslab instalado (gratuito)
- Projetor multimídia para demonstrações do professor
- Conexão com internet para download inicial do software
- Impressão dos roteiros (Apêndices) ou acesso digital aos mesmos

4.3 Adaptações Possíveis

Modalidade remota:

A sequência didática foi originalmente aplicada de forma remota durante a pandemia de Covid-19, demonstrando sua viabilidade em ambientes virtuais. Podem ser utilizadas plataformas como Google Meet, Zoom ou Microsoft Teams para os encontros síncronos.

Tempo:

Os encontros podem ser agrupados em aulas mais longas, caso haja disponibilidade. Por exemplo, dois encontros de 30 minutos podem ser combinados em uma aula de 60 minutos.

Nível de ensino:

A sequência pode ser adaptada para o Ensino Superior, com aprofundamento teórico e inclusão de cálculos mais avançados utilizando métodos ab initio.

4.4 Potencialidades e Limitações

Potencialidades:

- Desenvolvimento de habilidades visuoespaciais
- Aprendizagem ativa e centrada no estudante
- Visualização concreta de conceitos abstratos
- Integração entre teoria e prática computacional
- Promoção da alfabetização digital
- Compreensão da relação entre estrutura e reatividade

Limitações:

- Necessidade de infraestrutura tecnológica adequada
- Curva de aprendizagem inicial do software
- O Arguslab está disponível apenas para Windows
- Necessidade de tempo adicional para estudantes com dificuldades técnicas
- Dependência de computadores funcionando adequadamente

4.5 Sugestões de Avaliação

Além do pré-teste e pós-teste, sugere-se:

- Acompanhamento das atividades de modelagem (observação direta ou captura de tela)
- Relatórios das atividades realizadas, com imagens das moléculas construídas
- Entrevistas individuais para identificar concepções e imagens mentais
- Portfólio digital com as moléculas construídas e análises realizadas
- Apresentação oral dos resultados pelos estudantes

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este Produto Educacional foi desenvolvido com o objetivo de proporcionar uma alternativa metodológica para o ensino da Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica, utilizando recursos de modelagem molecular computacional.

A aplicação desta sequência didática em pesquisa de mestrado demonstrou que o uso do software Arguslab pode promover ganhos significativos na aprendizagem de conceitos químicos abstratos. Os estudantes que participaram demonstraram evolução na compreensão da distribuição eletrônica em moléculas aromáticas e na relação entre estrutura e reatividade.

A fundamentação na Teoria da Mediação Cognitiva (TMC) mostrou-se adequada para compreender os processos cognitivos envolvidos no uso da modelagem molecular como ferramenta de ensino. O software atua como mecanismo externo de mediação hipercultural, permitindo aos estudantes desenvolver drivers para a compreensão de representações moleculares tridimensionais.

Esperamos que este material contribua para a prática docente de professores de Química, oferecendo uma alternativa inovadora e fundamentada teoricamente para o ensino de reações orgânicas. A utilização de tecnologias digitais no ensino de Química pode tornar a aprendizagem mais significativa e preparar os estudantes para um mundo cada vez mais tecnológico.

Este Produto Educacional é replicável, podendo ser utilizado por outros professores em diferentes contextos. Os materiais estão disponíveis gratuitamente e podem ser adaptados às necessidades específicas de cada turma.

Sugerimos que pesquisas futuras investiguem a aplicação desta sequência didática em diferentes contextos educacionais, bem como a utilização de outros softwares gratuitos de modelagem molecular, como o Avogadro, que oferece funcionalidades similares e é multiplataforma.

REFERÊNCIAS

ALLINGER, N. L. et al. Química Orgânica. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1996.

BARDIN, L. Análise de Conteúdo. São Paulo: Edições 70, 2016.

BATISTA, E. A. et al. Softwares de modelagem molecular para o ensino de Química. Revista Virtual de Química, v. 10, n. 4, p. 885-898, 2018.

BRASIL. Ministério da Educação. Parâmetros Curriculares Nacionais: Ensino Médio. Brasília: MEC, 2000.

CHASSOT, A. Para que(m) é útil o ensino? 2. ed. Canoas: ULBRA, 2004.

CLEMENT, J. Use of physical intuition and imagistic simulation in expert problem solving. In: TIROSH, D. (Ed.). Implicit and explicit knowledge. Norwood: Ablex Publishing, 1994. p. 204-244.

FERREIRA, C.; ARROIO, A.; REZENDE, D. B. Uso de modelagem molecular no estudo dos conceitos de nucleofilicidade e basicidade. Química Nova, v. 34, n. 9, p. 1661-1665, 2011.

FONSECA, M. R. M. Química: Ensino Médio. 2. ed. São Paulo: Ática, 2013. v. 3.

McMURRY, J. Química Orgânica. 6. ed. São Paulo: Thomson Learning, 2005.

MONAGHAN, J. M.; CLEMENT, J. J. Use of a computer simulation to develop mental simulations for understanding relative motion concepts. *International Journal of Science Education*, v. 21, n. 9, p. 921-944, 1999.

RAMOS, A. F. Investigação sobre a aprendizagem de conceitos químicos utilizando modelagem molecular. 2015. Tese (Doutorado em Ensino de Ciências e Matemática) - Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2015.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. O uso de software de modelagem molecular no ensino de Química. *Acta Scientiae*, v. 10, n. 2, p. 51-62, 2008.

SOUZA, B. C. A Teoria da Mediação Cognitiva: os impactos cognitivos da hipercultura e da mediação digital. 2004. Tese (Doutorado em Psicologia) - Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2004.

SOUZA, B. C. et al. Putting the Cognitive Mediation Networks Theory to the test. *Computers in Human Behavior*, v. 28, n. 6, p. 2320-2330, 2012.

STEPHENS, A. L.; CLEMENT, J. J. Documenting the use of expert scientific reasoning processes by high school physics students. *Physical Review Special Topics - Physics Education Research*, v. 6, n. 2, p. 020122, 2010.

TREVISAN, G. L.; SERRANO, A. Report Aloud: uma metodologia para coleta de dados em pesquisas com simulações computacionais. *Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências*, v. 19, p. 599-626, 2019.

APÊNDICES

Os apêndices a seguir contêm os materiais de apoio para aplicação da sequência didática, incluindo os instrumentos de avaliação (pré-teste e pós-teste) e os roteiros detalhados de modelagem molecular.

Apêndice A – Pré-teste e Pós-teste (Experimento Piloto)

Instrumento utilizado no experimento piloto da pesquisa.

Apêndice B – Pré-teste e Pós-teste (Experimento Definitivo)

Instrumento utilizado no experimento definitivo, com questões ajustadas.

Apêndice C – Iniciando o Arguslab

Roteiro para familiarização com a interface do software.

Apêndice D – Construindo a Molécula da Água e Cálculos

Roteiro para construção da molécula da água, incluindo cálculos de ligação e ângulo.

Nota: Este apêndice incorpora o conteúdo originalmente previsto para o Apêndice E.

Apêndice F – Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Amônia

Roteiro para medições na molécula da amônia.

Apêndice G – Otimizando Geometria de uma Molécula

Roteiro para otimização de geometria molecular.

Apêndice H – Construindo a Molécula do Benzeno

Roteiro completo incluindo MPE.

Apêndice I – Construindo a Molécula do Clorobenzeno

Roteiro completo incluindo MPE e análise de reatividade.

Apêndice J – Construindo a Molécula do Fenol

Roteiro completo incluindo MPE e análise de reatividade.

Apêndice K – Construindo a Molécula do Nitrobenzeno

Roteiro completo incluindo MPE e análise de reatividade.

APÊNDICES

APÊNDICE A - Pré-teste e Pós-teste Experimento Piloto 1



Questões do Pré-teste e Pós-teste

Objetivo: Validação do roteiro

Assunto: Reação de Substituição Eletrofílica Aromática

Data:

Nome do aluno:

Observação: responda às questões sem consultar qualquer material, e caso não saiba responder coloque o motivo. Por exemplo: não tive este conteúdo e não sei responder; tive o conteúdo e não lembro mais como responder.

1) Qual ou quais grupos abaixo são eletrófilos?

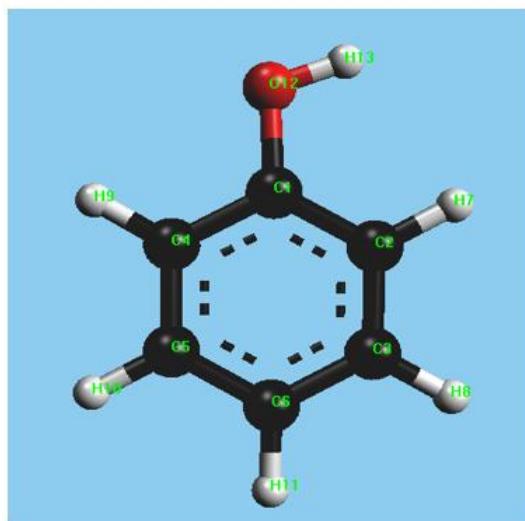
- NH₄⁺; Cl⁻; NO₂⁺; Br⁺
- Br⁺; OH⁻; H⁺; CH₃⁺
- CH₃⁺; H⁺; Cl⁻; NO₂⁺
- Cl⁻; Br⁻; OH⁻; I⁻

2) Relacione as colunas para grupo ativador (orientador *meta* e *para*) e grupo desativador (orientador *meta*)?

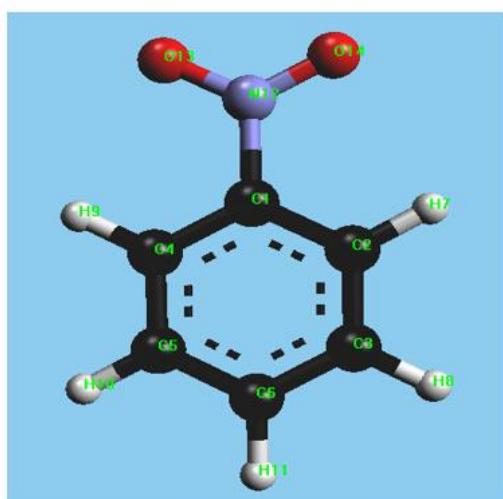
- a) NH₃; -CH₃; -OCH₃; -OH
 - b) -CO; -CN; -NO₂; -COOH
- São os que orientam as substituições nas posições 3 e 5 em relação a eles, posição conhecida como *meta*
- São os substituintes que orientam as substituições nas posições 2, 4 e 6 em relação a eles, conhecidas como posições *ortho* e *para*.

3) Considere uma molécula com anel aromático (Benzeno) e um grupo genérico ligado ao anel. Ao reagir à molécula com um eletrófilo (E⁺), qual as orientações possíveis do eletrófilo no anel? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.

- 4) Com relação à molécula do Fenol, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.



- 5) Com relação à molécula do Nitrobenzeno, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.



- 6) Com relação à molécula do Clorobenzeno, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.



- 7) Em relação ao Mapa de Potencial Eletrostático de uma Molécula, marque a alternativa correta:
- () Mostra a distribuição tridimensional de carga elétrica na molécula
 - () Mostra a distribuição dos átomos na molécula
 - () Através do Mapa de Potencial Eletrostático podemos definir se uma molécula é neutra ou negativa
 - () Mostra a geometria molecular da molécula
- 8) Qual a finalidade do Potencial Eletrostático de uma molécula?
- () O Potencial Eletrostático mede a interação das ligações entre os átomos na molécula
 - () O Potencial Eletrostático mede a interação de uma carga positiva com núcleos e elétrons de uma molécula ao longo de uma superfície de densidade eletrônica
 - () O Potencial Eletrostático mede a interação núcleo – núcleo entre os átomos de uma molécula bem como a sua densidade eletrônica
 - () O Potencial Eletrostático mede a interação entre elétrons em uma molécula

APÊNDICE B - Pré-teste e Pós-teste Experimento Definitivo 2



Nome:

Data:

Observação: responda as questões sem consultar qualquer material, e caso não saiba responder deixe em branco.

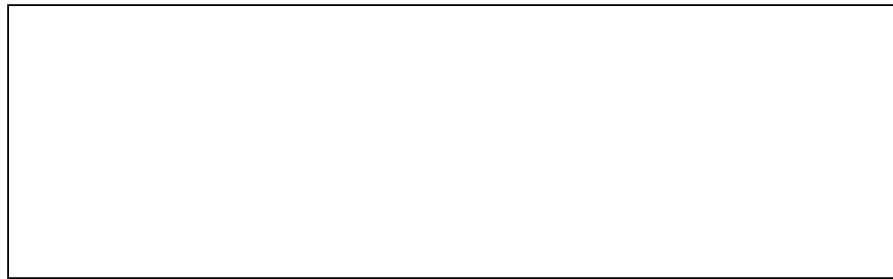
1) Faça o desenho da molécula da amônia usando a representação 2D e 3D?

a) Representação 2D

b) Representação 3D

2) Represente a molécula da água e da amônia nas suas respectivas geometrias e responda se a molécula é polar ou apolar?

a) Representação da molécula da água

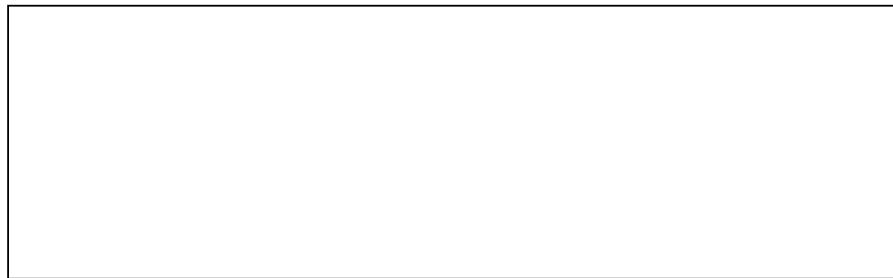


Tipo de geometria:

A molécula é:

- () Molécula apolar
() Molécula polar

b) Representação da molécula da amônia



Tipo de Geometria:

A molécula é:

- () Molécula apolar
() Molécula polar

3) Represente a molécula do Benzeno desenhando as duas representações com as ligações conjugadas e um desenho com as ligações duplas tracejadas. A molécula do Benzeno é aromática ou não-aromática?

a) Ligações duplas conjugadas

b) Ligações duplas conjugadas

c) Ligação tracejada

d) Molécula apolar ou polar? Justifique?

4) Qual a finalidade do Potencial Eletrostático de uma molécula?

- O Mapa de Potencial Eletrostático mede a interação das ligações entre os átomos na molécula.
- Mostra a distribuição tridimensional de carga elétrica na molécula. O potencial eletrostático mede a interação de uma carga positiva com núcleos e elétrons de uma molécula ao longo de uma superfície de densidade eletrônica.
- Define a geometria molecular da molécula.

5) Represente a molécula da água e esboce o Mapa de Potencial Eletrostático?

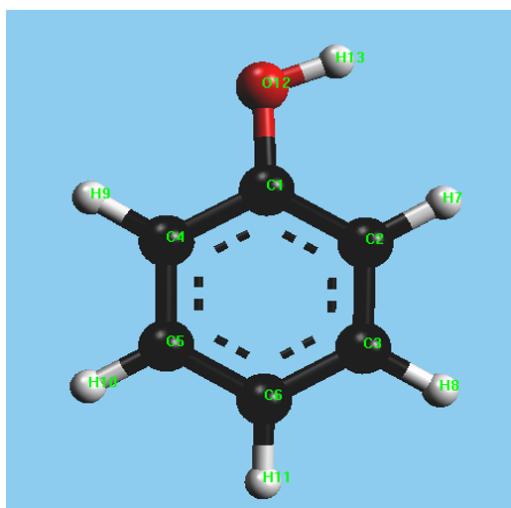
6) Qual dos grupos abaixo são eletrófilos?

- () NH_4^+ ; Cl^- ; NO_2^+ ; Br^+
- () Br^+ ; OH^- ; H^+ ; CH_3^+
- () CH_3^+ ; H^+ ; Cl^+ ; NO_2^+
- () Cl^- ; Br^- ; OH^- ; I^-

7) Relacione as colunas para grupo ativador (orientador *meta* e *para*) e grupo desativador (orientador *meta*)?

- a) NH_3 ; $-\text{CH}_3$; $-\text{OCH}_3$; $-\text{OH}$
- b) $-\text{CO}$; $-\text{CN}$; $-\text{NO}_2$; $-\text{COOH}$
- () São os que orientam as substituições nas posições 3 e 5 em relação a eles, posição conhecida como *meta*
- () São os substituintes que orientam as substituições nas posições 2, 4 e 6 em relação a eles, conhecidas como posições *ortho* e *para*.

8) Com relação à molécula do Fenol, qual o nome da posição nos Carbonos 2, 3 e 6? Escreva o nome nos retângulos abaixo.



9) Represente a reação entre o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro) com os seguintes compostos: Fenol, Nitrobenzeno e Clorobenzeno. Forneça as estruturas dos reagentes, o eletrófilo e o(s) produtos da reação.

a) Fenol mais grupo nitro

b) Nitrobenzeno mais grupo nitro

c) Clorobenzeno mais grupo nitro

10) Escreva, no espaço abaixo, tudo que você sabe sobre modelagem molecular, como se estivesse explicando para um colega. Para tanto, utilize gráficos, tabelas, imagens, equações, tudo que você desejar.

APÊNDICE C - Iniciando Arguslab 3



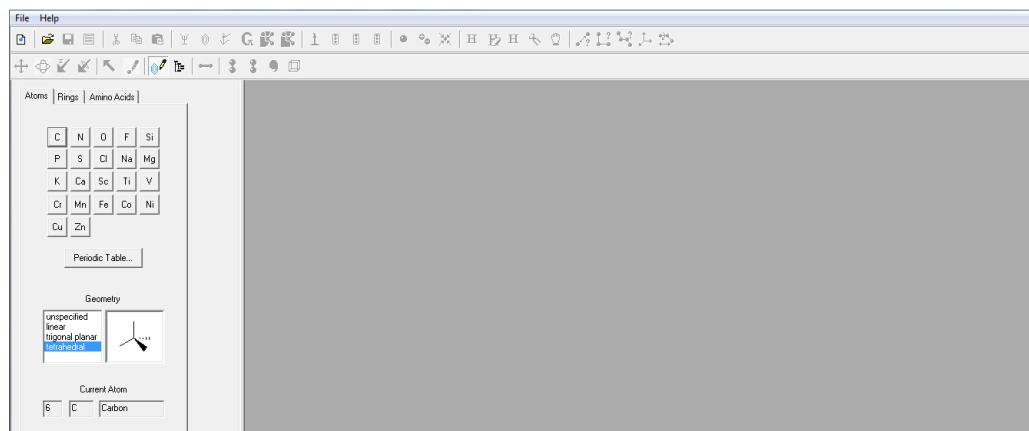
Nome:

Data:

Exercício 1

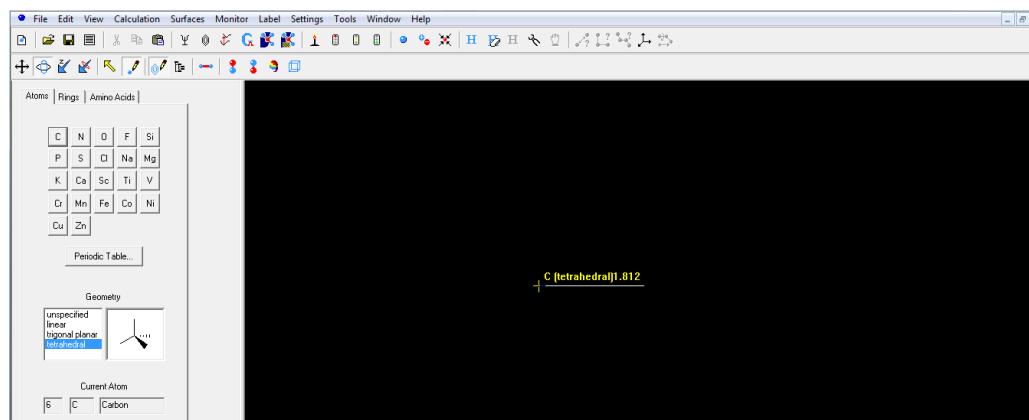
Iniciando o Arguslab

1) Tela inicial do Arguslab



2) Clicar na opção File na Barra de Menus

3) Clicar na opção New na Barra de Menus



4) Iniciar a construção da molécula.

Exercício 2

Como salvar um arquivo no Arguslab

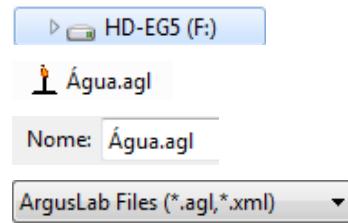
- 1) Na caixa de diálogo File selecione à opção Save As (salvar como)
- 2) Dê um nome para o arquivo, por exemplo, Água.agl
- 3) Escolha a pasta
- 4) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



Exercício 3

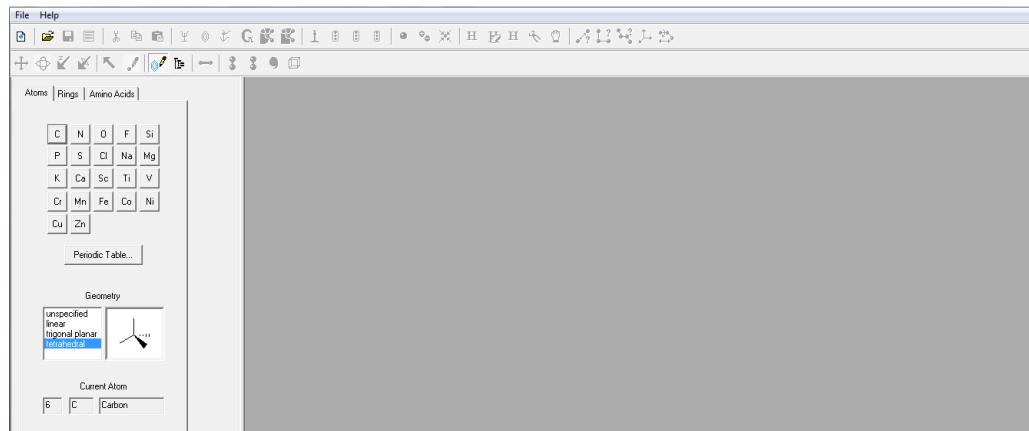
Como abrir um arquivo no Arguslab

- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open (abrir)
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

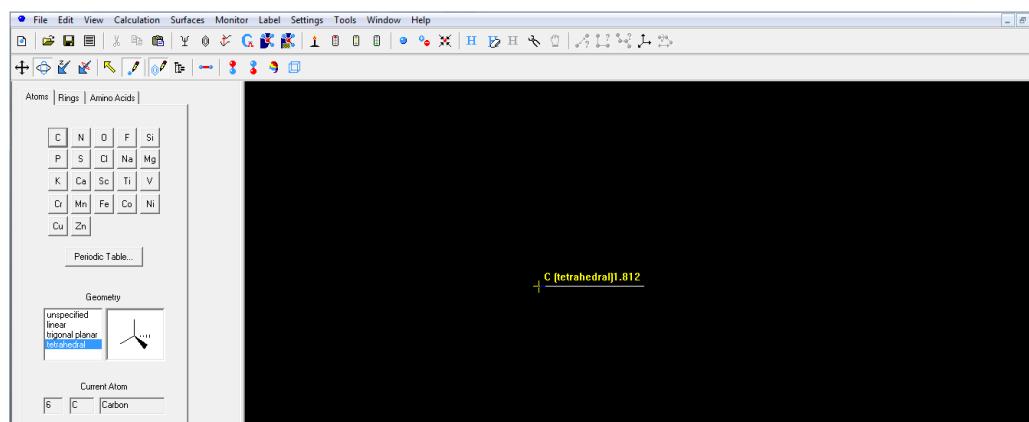


Exercício 4**Construindo a molécula da água no Arguslab**

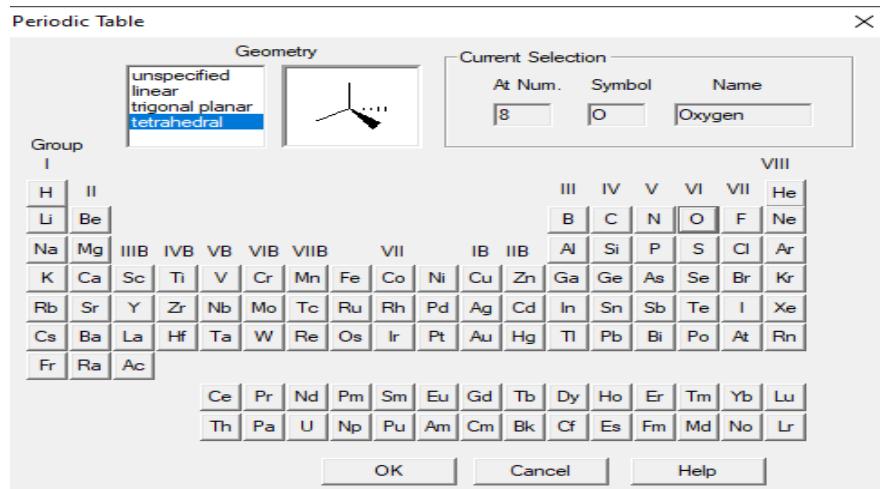
1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:



2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

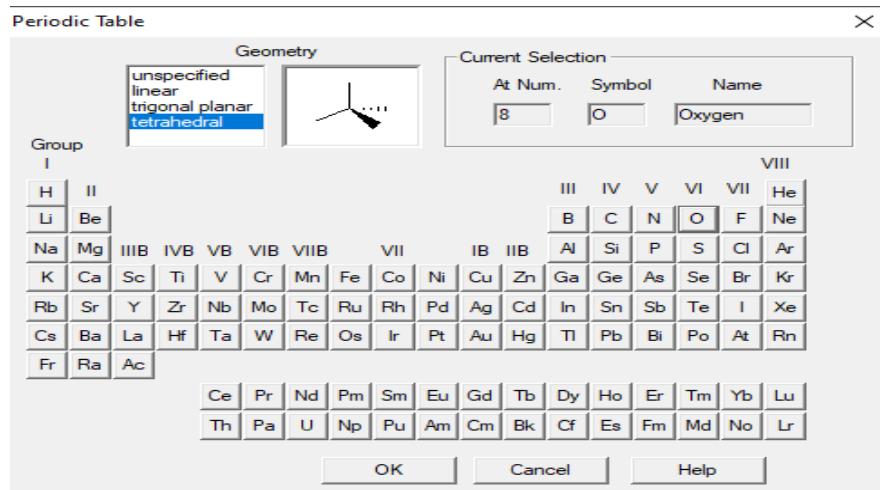


3) Clicar na opção Tabela Periódica:



4) Clicar no botão na Barra de Ferramentas ou selecione Modo de Seleção no menu Editar. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

5) Na Tabela Periódica selecione o átomo de Oxigênio:



6) Clique em OK e após com o botão direito do mouse clique na tela:



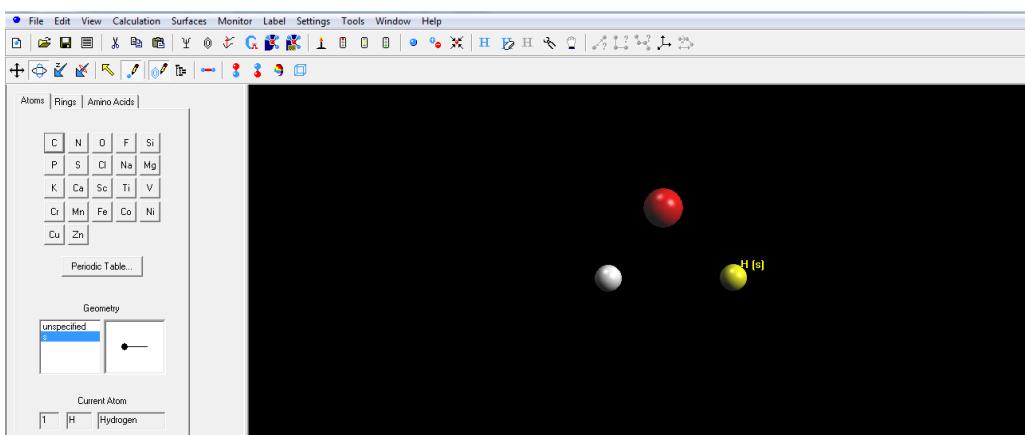
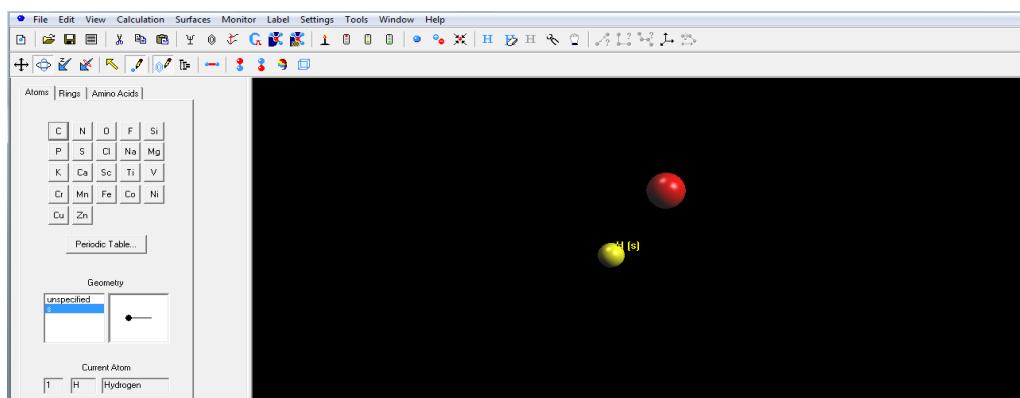
7) Clicar no botão na Barra de Ferramentas

8) Selecionar a Tabela Periódica

9) Selecionar o átomo de Hidrogênio

10) Clicar em OK

11) Com o botão direito do mouse e clique duas vezes na tela:

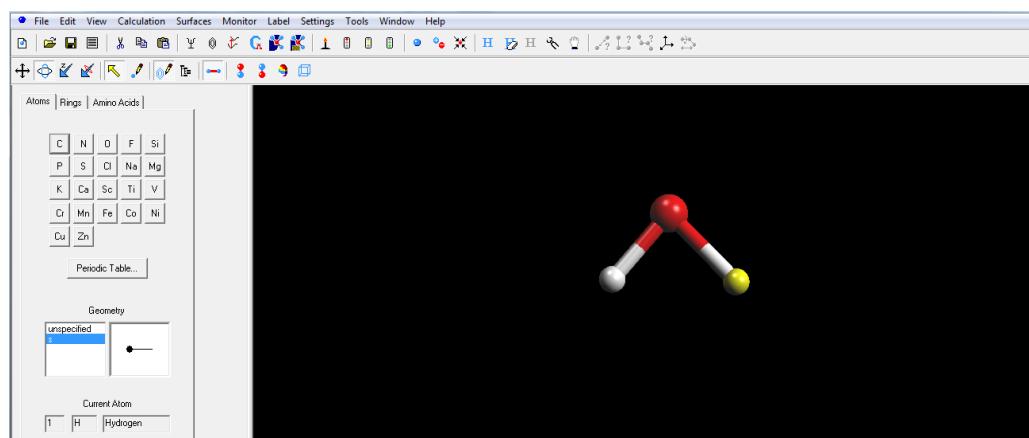
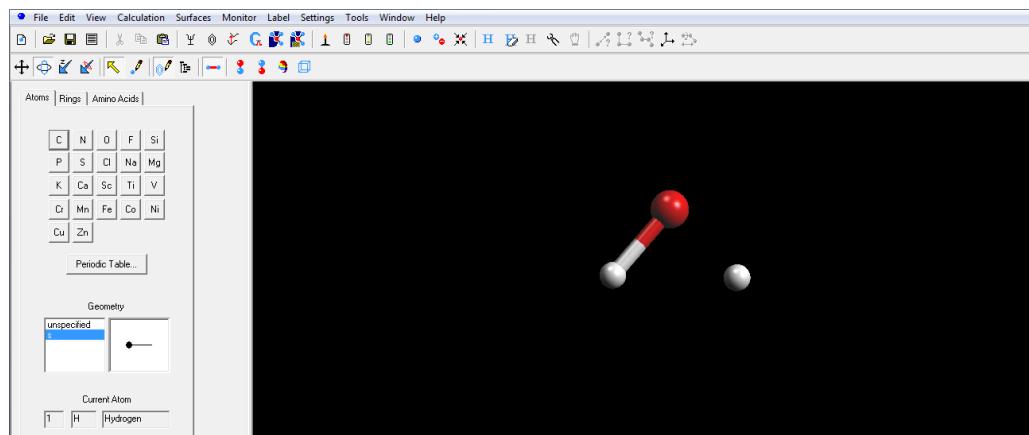


12) Assim temos os átomos que formam a molécula da água, um Oxigênio e dois Hidrogênios

13) Próximo passo é a adição das ligações químicas

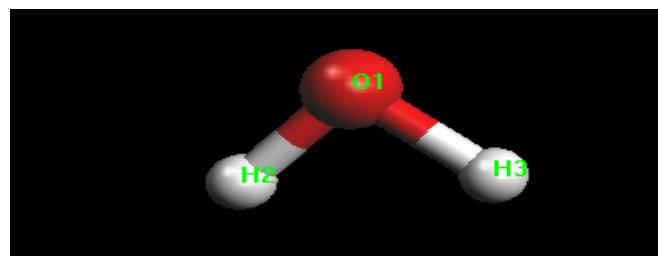
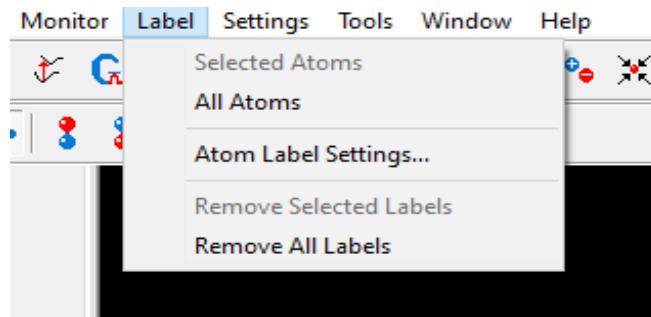
14) Adicionando Ligações Químicas com o botão esquerdo do mouse: clicar

com o botão esquerdo no átomo de Hidrogênio, selecionar a opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas e depois com o botão esquerdo clicar no átomo de Oxigênio. Após repetir o processo para o segundo átomo de Hidrogênio:

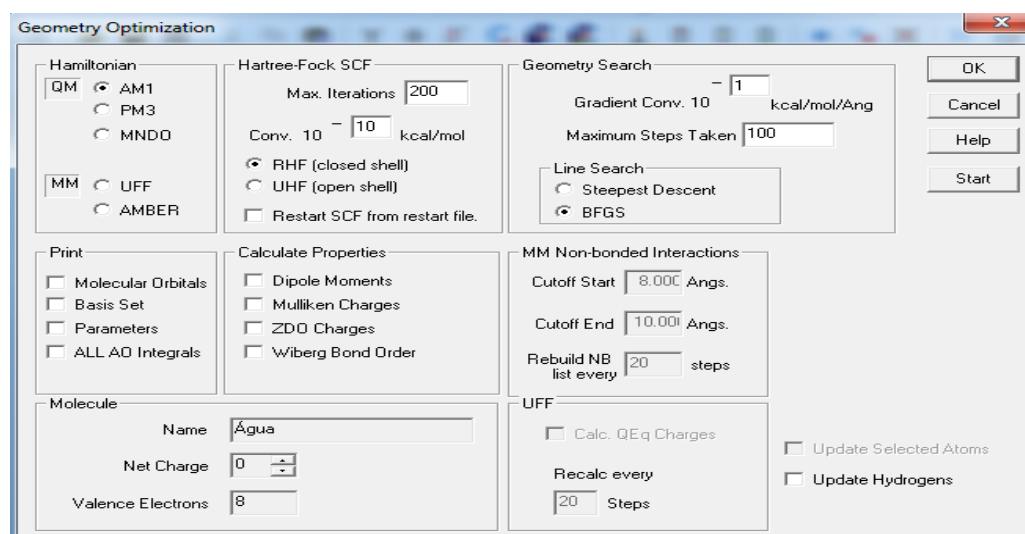


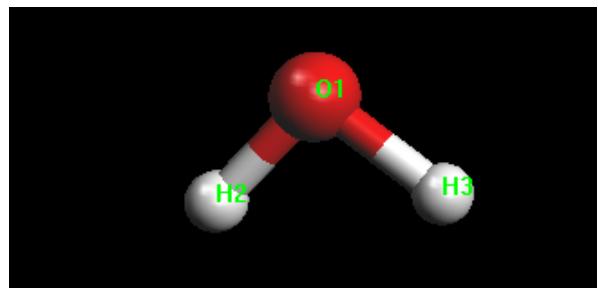
15) Salve o arquivo.

16) Selecione a opção Label no menu e clique em All Atoms:



- 17)Clique no botão otimizar geometria na Barra de Ferramentas  ou no menu Calculation. Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria:
 18)Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1
 19)Após clique em OK





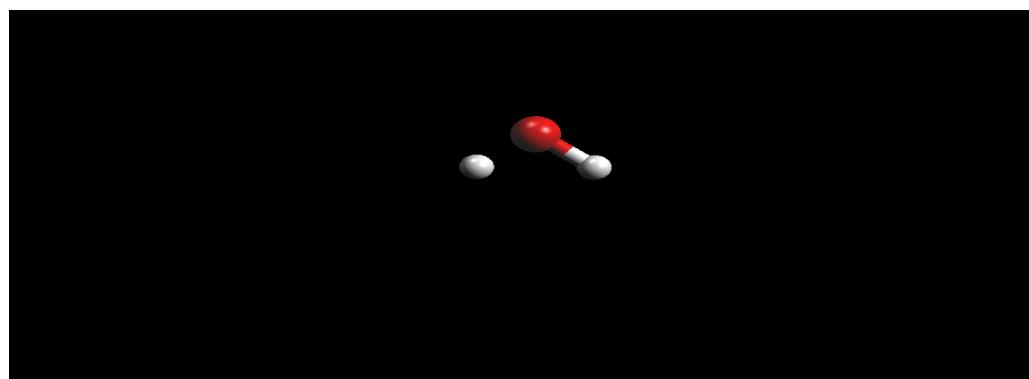
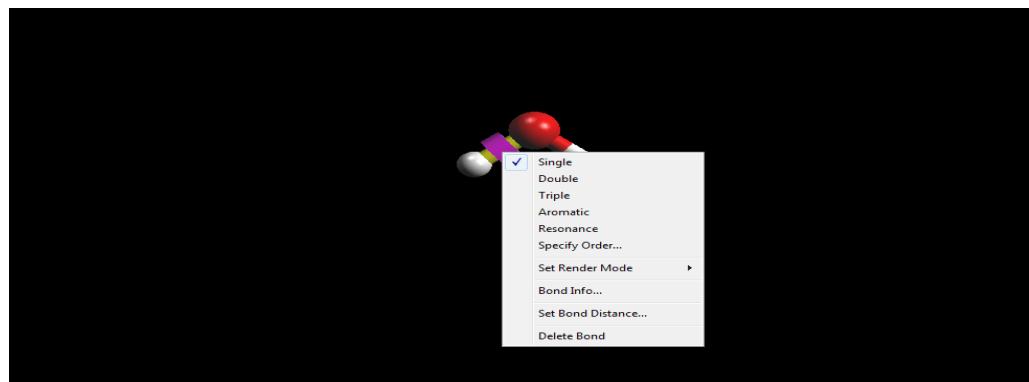
20) Salve o arquivo.

Exercício 5**Como deletar ligações no Arguslab**

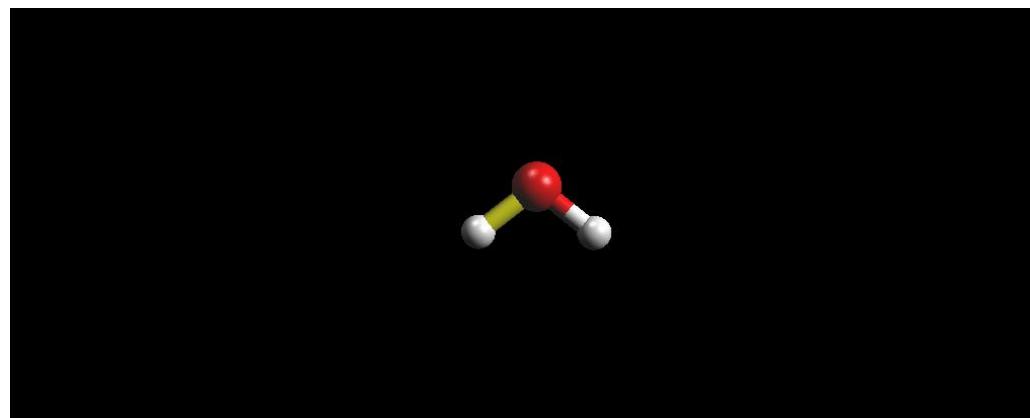
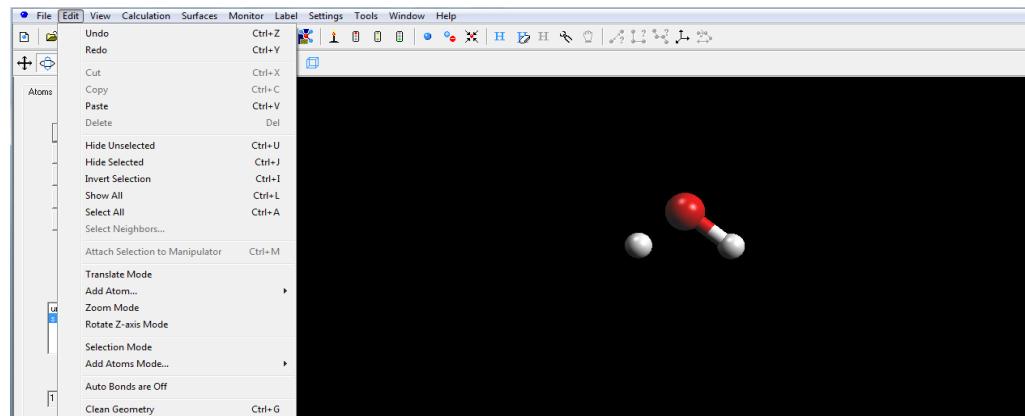
- 1) Como o botão esquerdo do mouse clique sobre a ligação desejada:



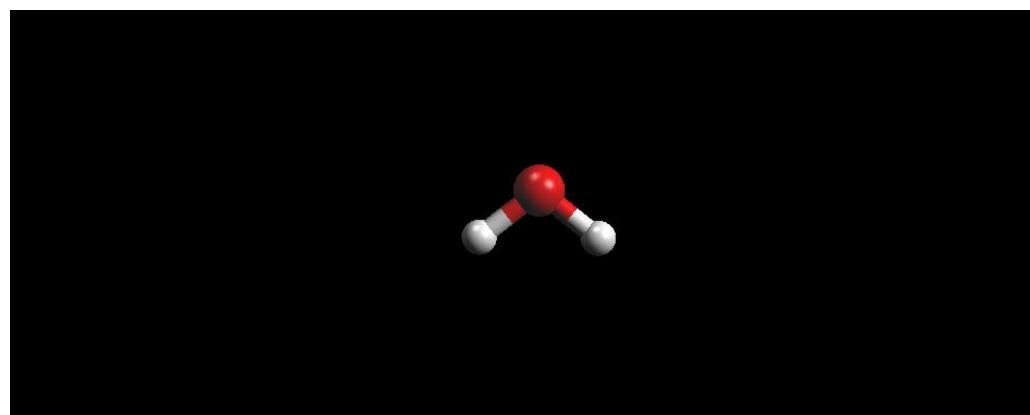
- 2) Com o botão direito do mouse clique na opção Delete Bond (deletar ligação):



- 3) Para desfazer a operação clique na opção Edit na Barra de Ferramentas e na opção Undo:

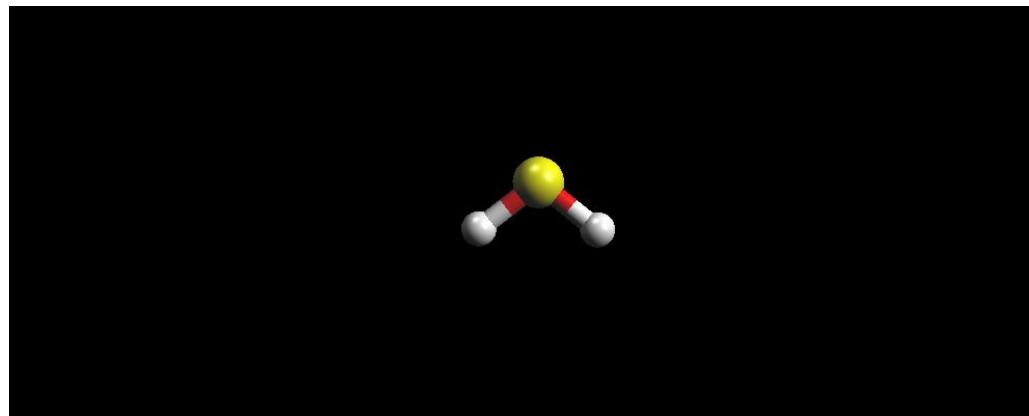


- 4) Clique na ligação com o botão esquerdo do mouse para retirar a seleção:

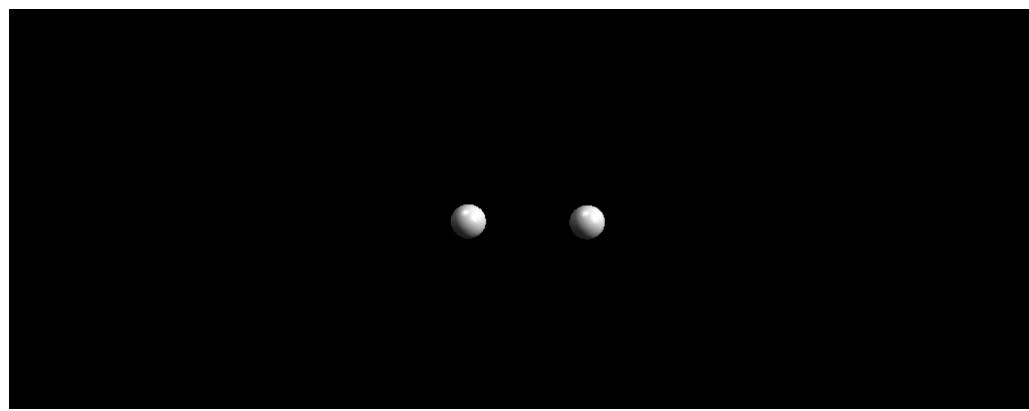
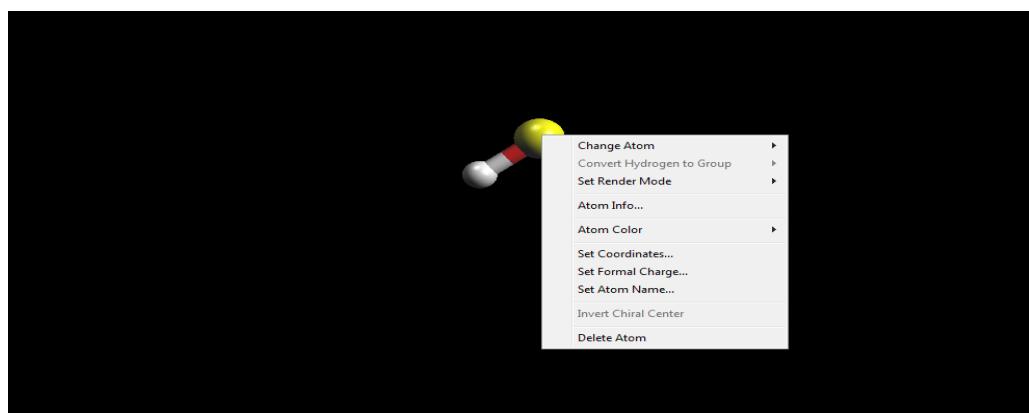


Exercício 6**Como deletar átomos no Arguslab**

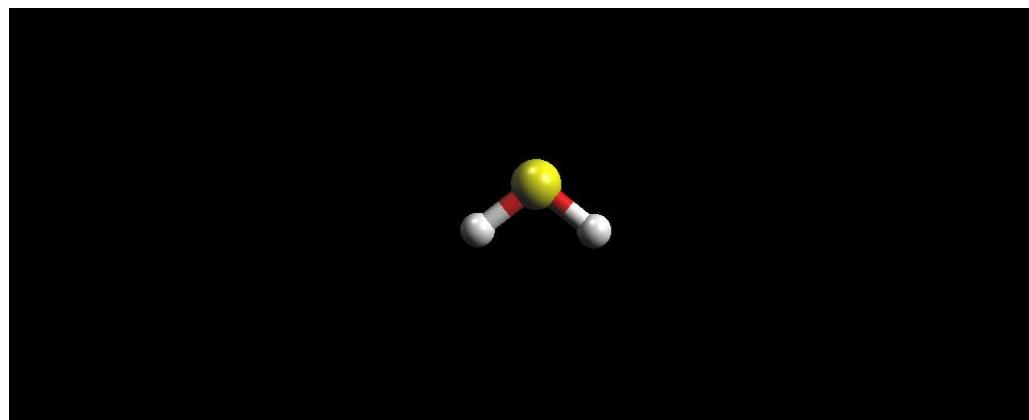
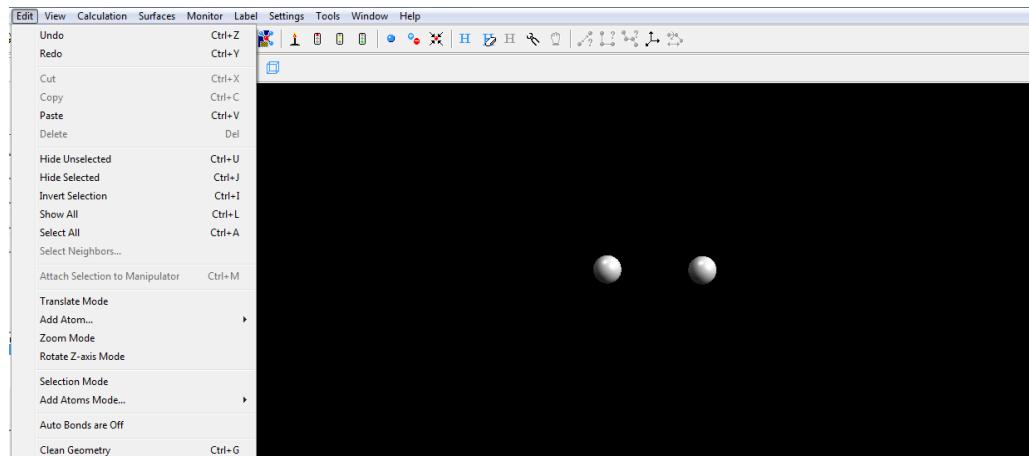
- 1) Com o botão esquerdo do mouse selecione o átomo desejado:



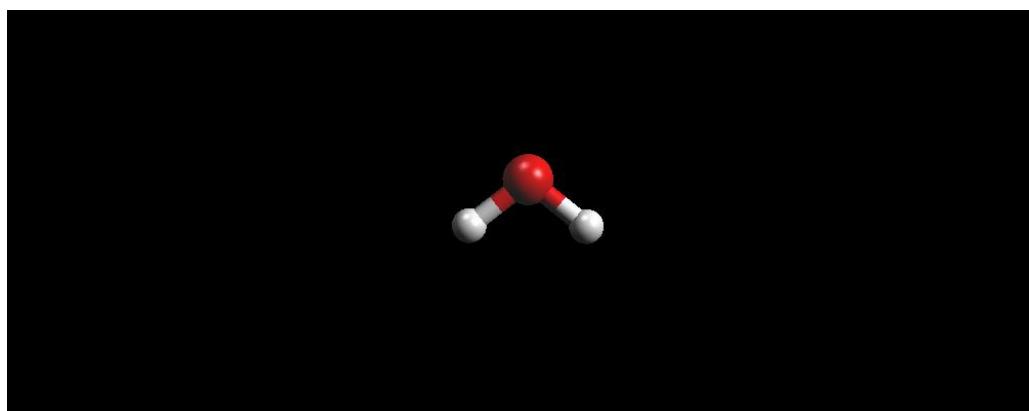
- 2) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo desejado, e selecione Delete Atom:



- 3) Para desfazer a operação clique na opção Edit na Barra de Ferramentas e na opção Undo:



- 4) Clique no átomo com o botão esquerdo do mouse para retirar a seleção:



APÊNDICE D - Iniciando Arguslab 4



Nome:

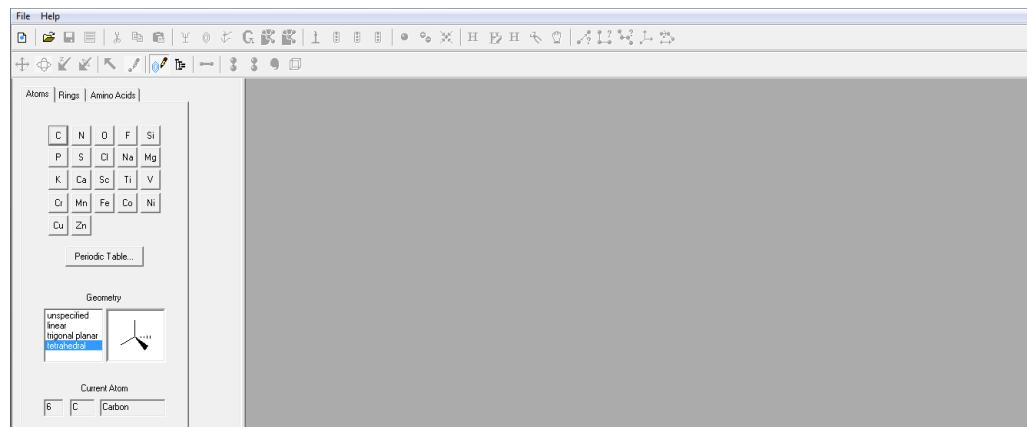
Data:

Exercício 1

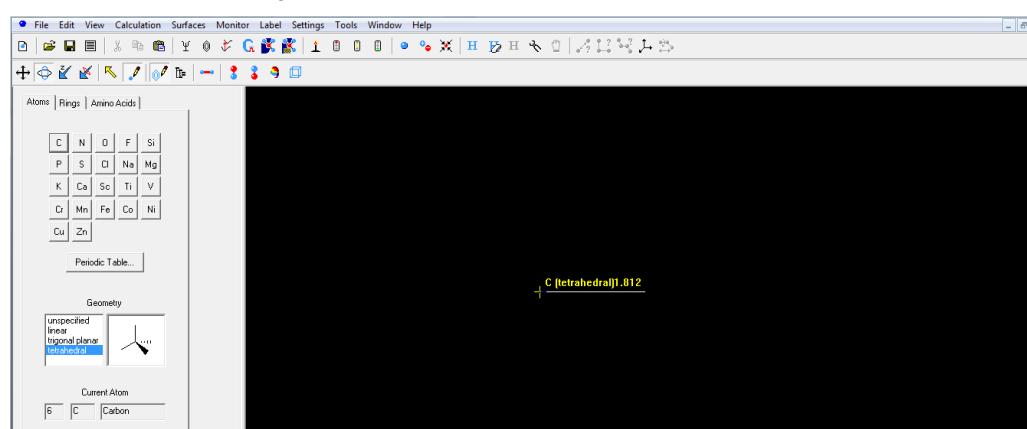
Iniciando o Arguslab

Construindo a molécula da Amônia no Arguslab

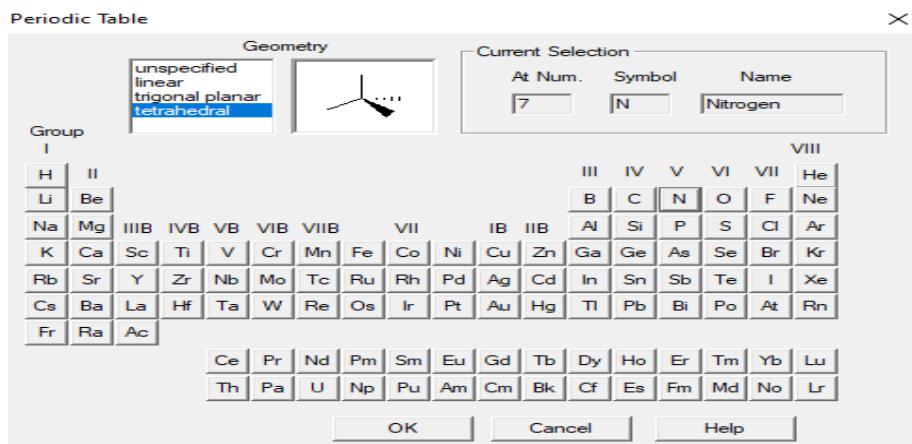
1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:



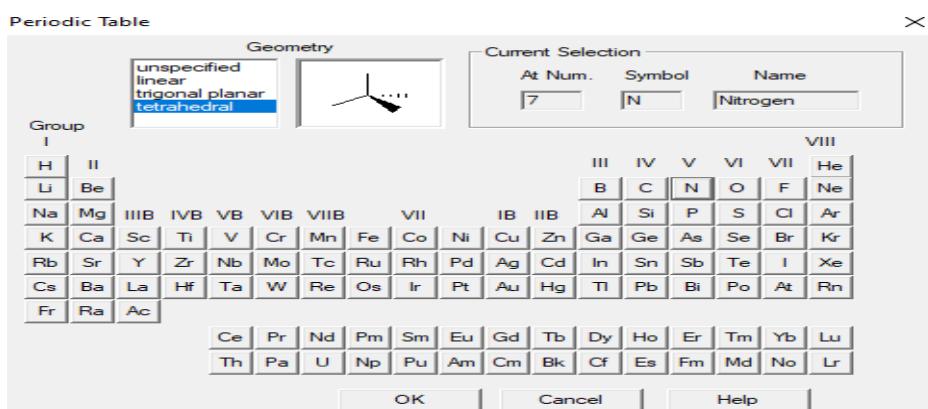
2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:



3) Clicar na opção Tabela Periódica:



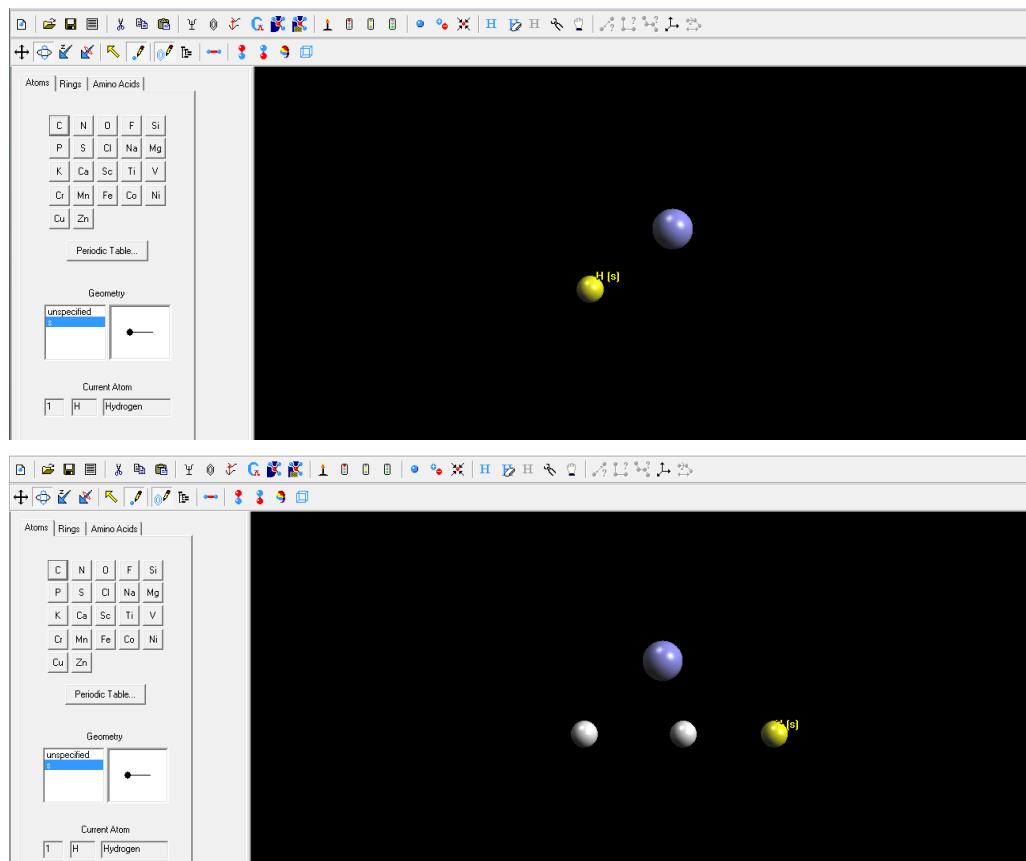
- 4) Clicar no botão na Barra de Ferramentas ou selecione Modo de Seleção no menu Editar. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo
- 5) Na Tabela Periódica selecione o átomo de Nitrogênio e escolha a especificação tetrahedral:



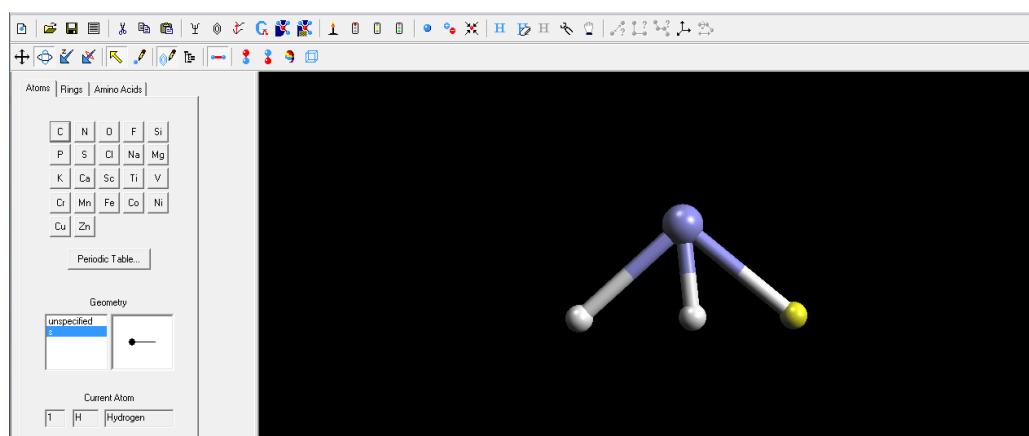
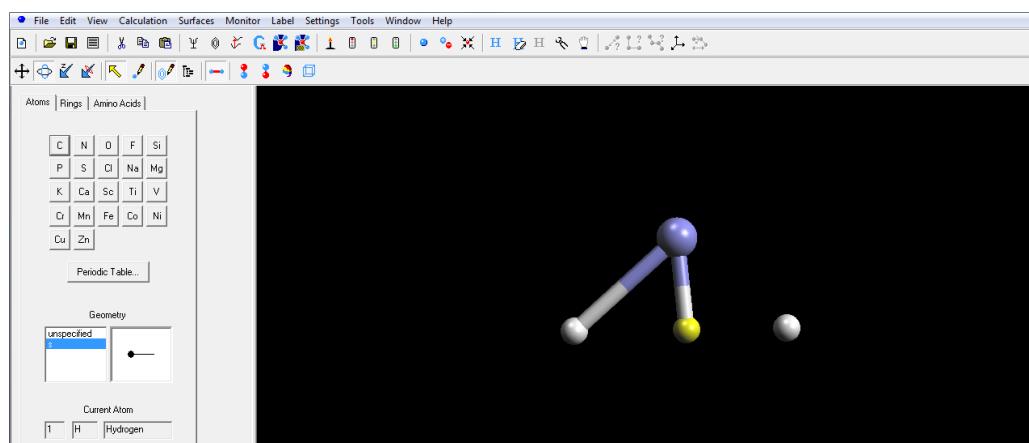
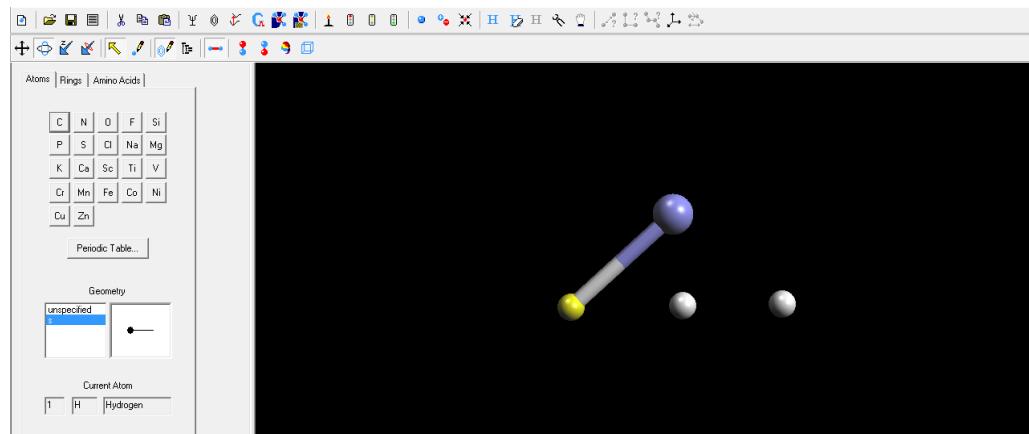
- 6) Clique em OK e após com o botão direito do mouse clique na tela:



- 7) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas
- 8) Selecionar a Tabela Periódica
- 9) Selecionar o átomo de Hidrogênio escolhendo a opção S
- 10) Clicar em OK
- 11) Com o botão direito do mouse clicar três vezes na tela:



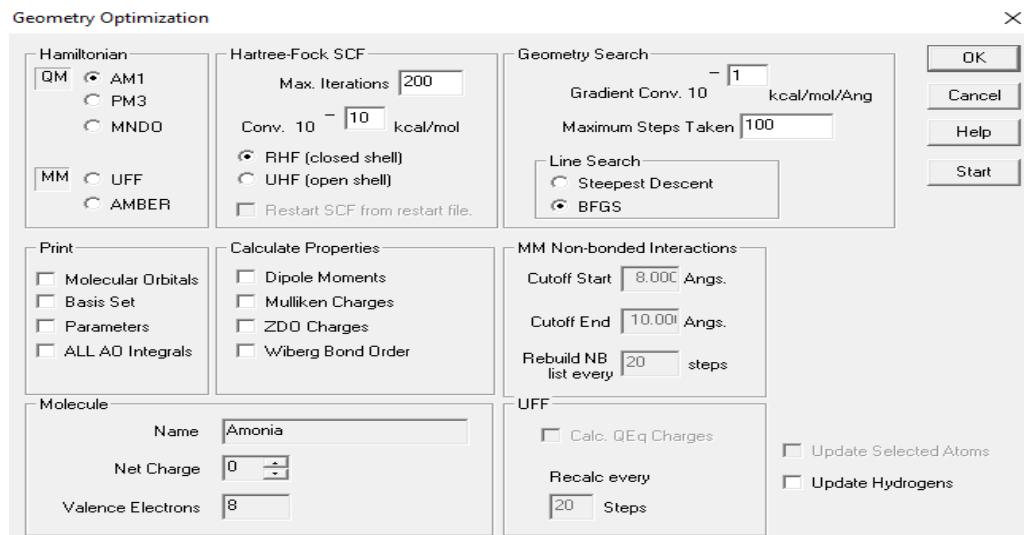
- 12) Assim temos os átomos que formam a molécula da amônia, um Nitrogênio e três Hidrogênios
- 13) Próximo passo é a adição das ligações químicas
- 14) Adicionando Ligações Químicas com o botão esquerdo do mouse: clicar com o botão esquerdo no átomo de Hidrogênio, selecionar a opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas e depois com o botão esquerdo clicar no átomo de Nitrogênio. Após repetir o processo para o segundo e terceiro átomo de Hidrogênio:



15) Clique no botão otimizar geometria na Barra de Ferramentas Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria:

16) Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1

17) Após clique em OK



APÊNDICE E - Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Água 5



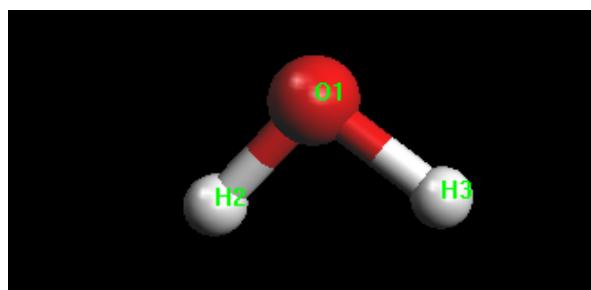
Nome:

Data:

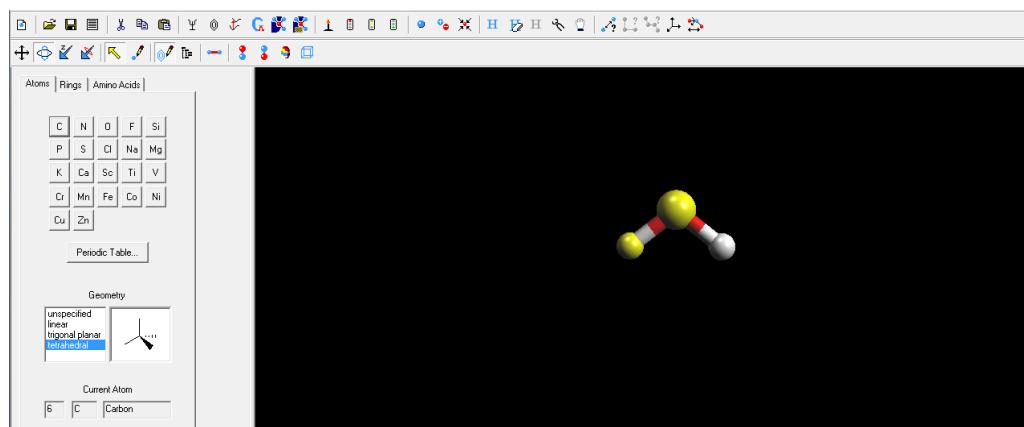
Exercício 1

Calcular a distância entre átomos da molécula da água no Arguslab

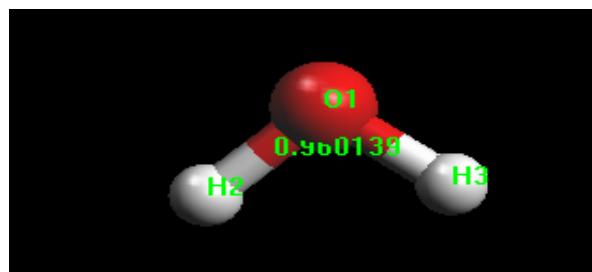
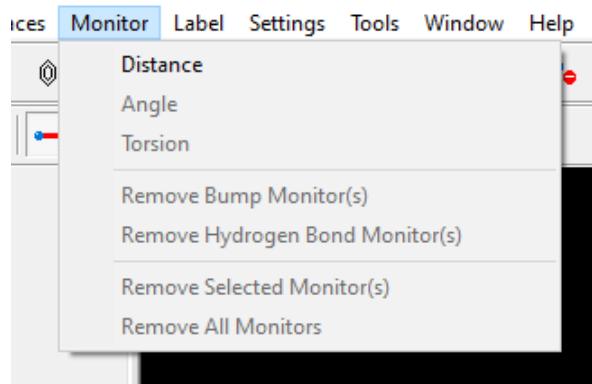
5) Abra o arquivo da molécula da água com a geometria otimizada.



6) Selecione a opção na Barra de Ferramentas, aperte a tecla Ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione dois átomos com o botão esquerdo do mouse:



7) Selecione a opção distância entre dois átomos na Barra de Ferramentas ou monitor no menu e escolha a opção Distance:

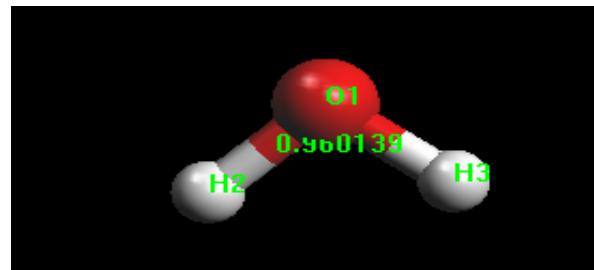


- 8) O valor da distância entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.
- 9) Salve o arquivo.

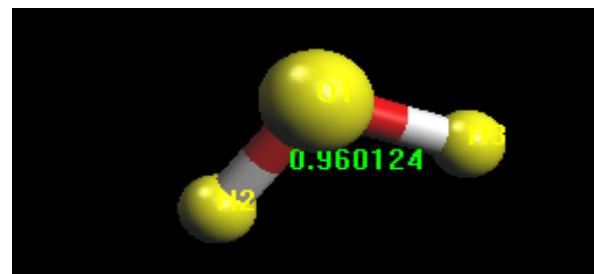
Exercício 2

Calcular o ângulo entre átomos da molécula da água no Arguslab

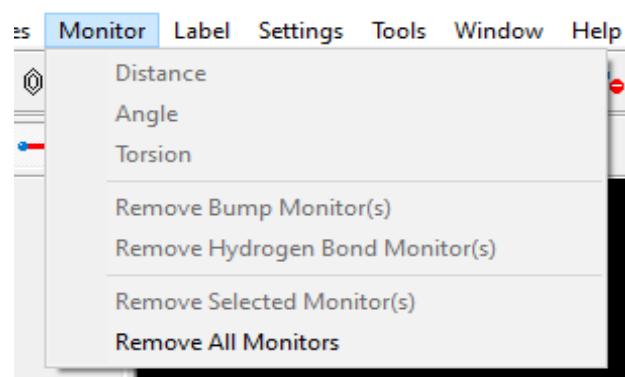
- 1) Abra o arquivo da molécula da água com a geometria otimizada.

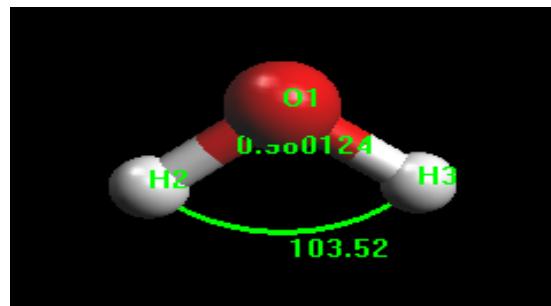


- 2) Selecione a opção  na Barra de Ferramentas, aperte a tecla Ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione três átomos com o botão esquerdo do mouse:



- 3) Selecione a opção ângulo entre três átomos  na Barra de Ferramentas ou monitor na barra menu e clique em Angle:





- 4) O valor do ângulo entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.
- 5) Salve o arquivo.

APÊNDICE F - Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Amônia 6



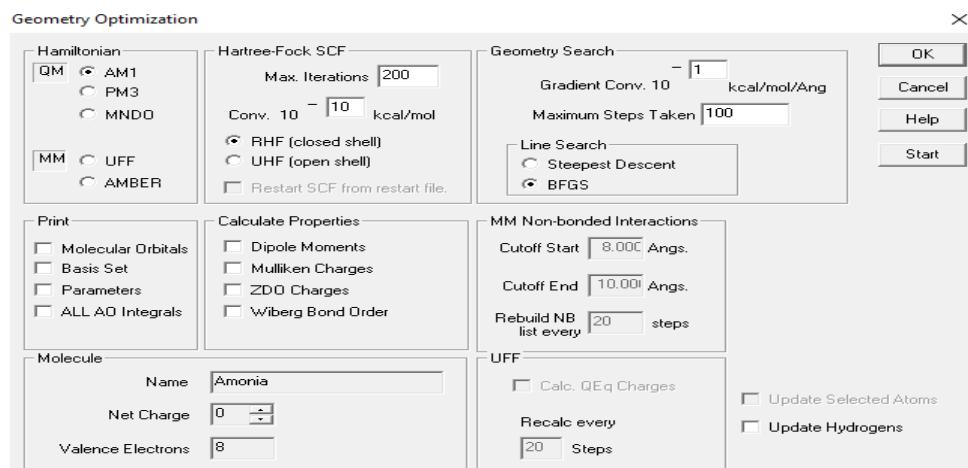
Exercício 1

Nome:

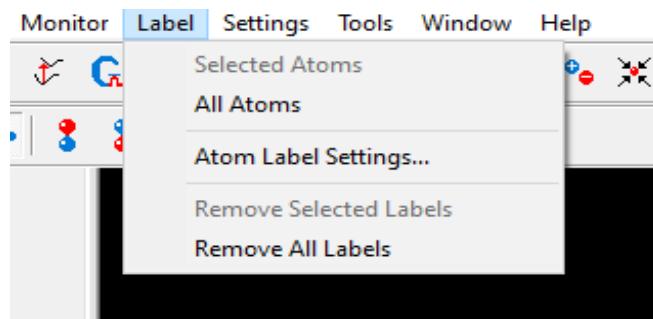
Data:

Calcular a distância entre átomos da molécula da amônia no Arguslab

- 1) Abra o arquivo da molécula da amônia e otimize a geometria escolhendo a opção AM1.



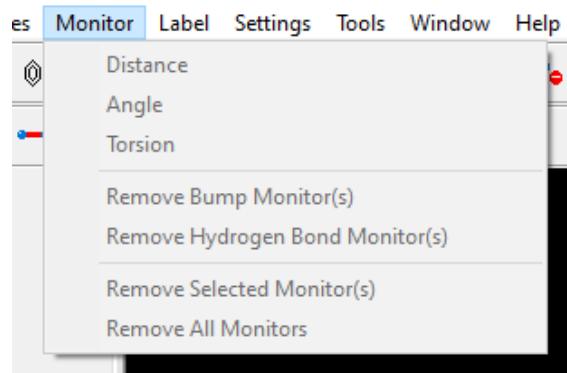
2) Selecione a opção Label no menu e clique em All Atoms:



3) Selecione a opção na Barra de Ferramentas, aperte a tecla ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione dois átomos com o botão esquerdo do mouse:



4) Selecione a opção distância entre dois átomos na Barra de Ferramentas ou clique em monitor na barra de menu e clique em Distance.

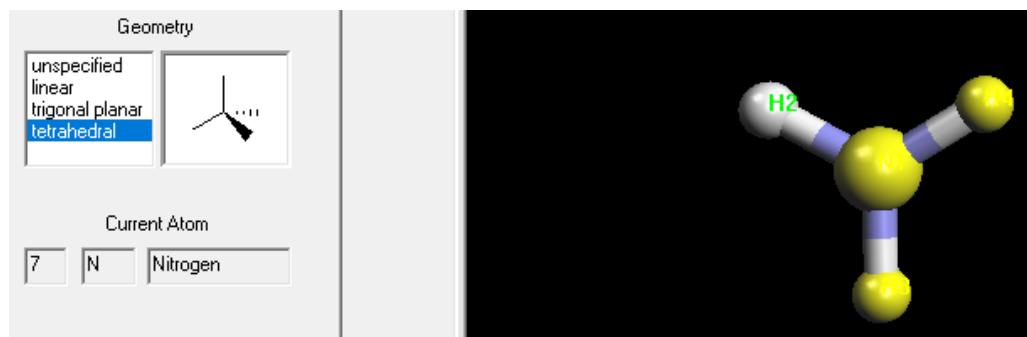


- 5) O valor da distância entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.

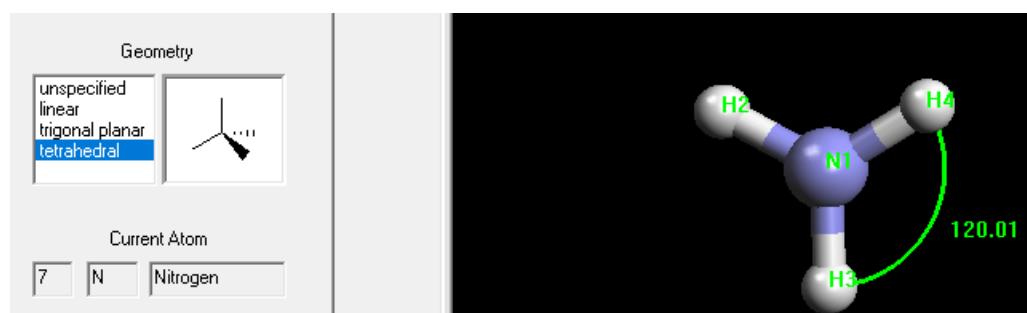
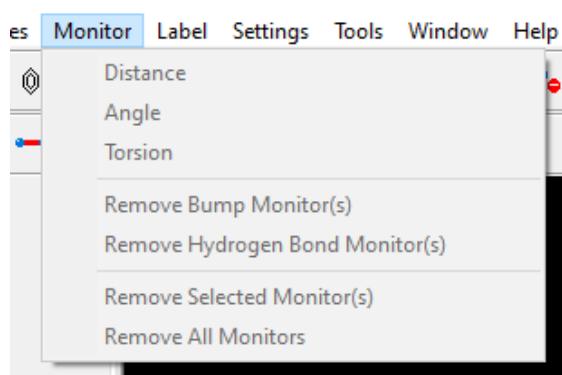
Exercício 2

Calcular o ângulo entre átomos da molécula da amônia no Arguslab

- 1) Selecione a opção  na Barra de Ferramentas, aperte a tecla ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione três átomos com o botão esquerdo do mouse:



- 2) Selecione a opção ângulo entre três átomos  na Barra de Ferramentas ou clique em monitor na barra de menu e clique em Angle:



- 3) O valor do ângulo entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.
 4) Salve o arquivo.

APÊNDICE G - Otimizando Geometria de uma Molécula 7



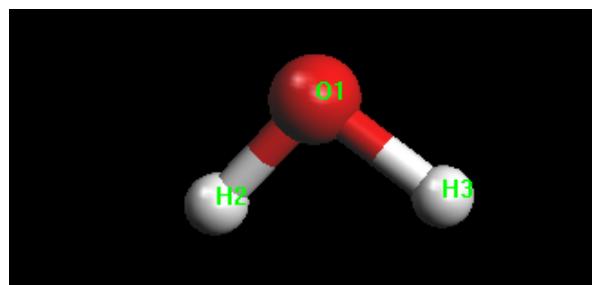
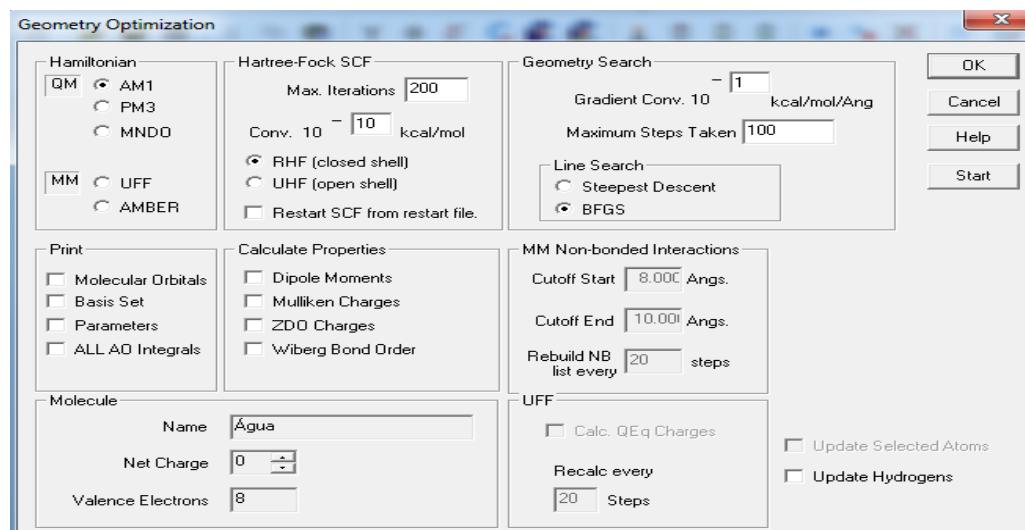
Nome:

Data:

Exercício 1

Otimizar a Geometria de uma molécula no Arguslab

- 1) Clique no botão otimizar geometria na Barra de Ferramentas ou no menu Calculation. Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria:
- 2) Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1
- 3) Após clique em OK



- 4) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.
- 5) Salve o arquivo.

APÊNDICE H - Construindo Molécula Benzeno no Arguslab 8



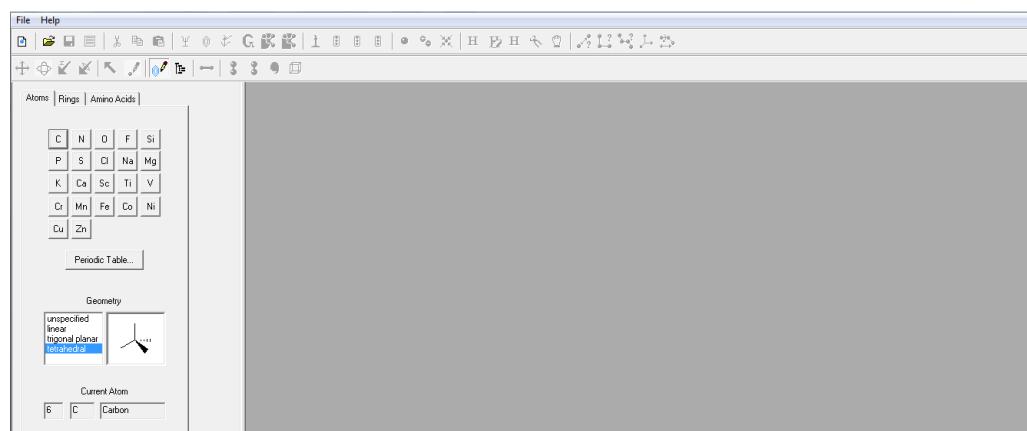
Exercício 1

Nome:

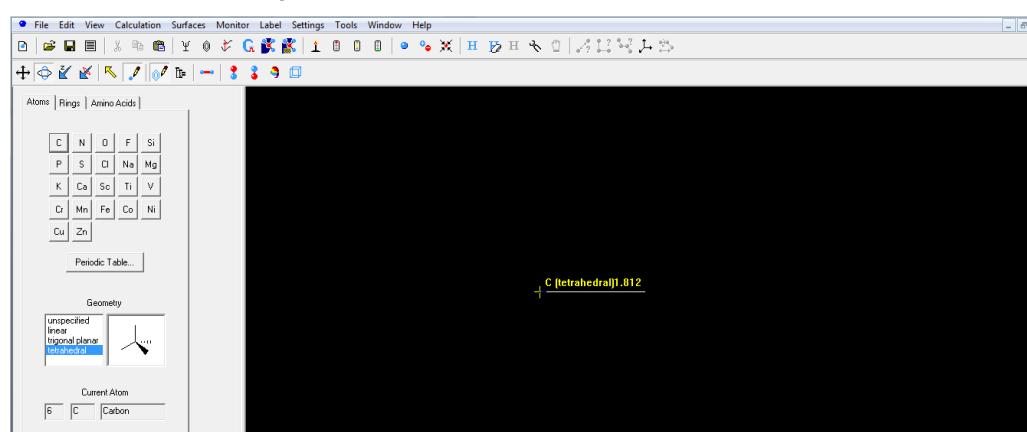
Data:

Construindo a molécula do Benzeno no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

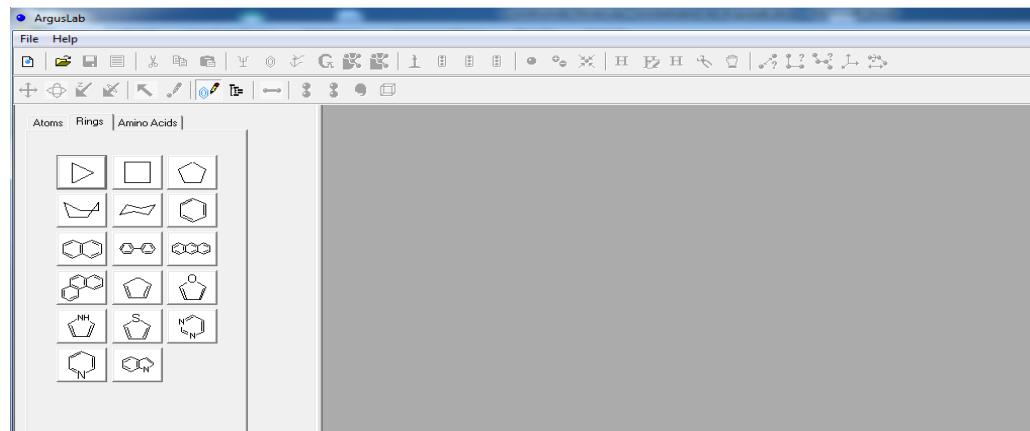


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

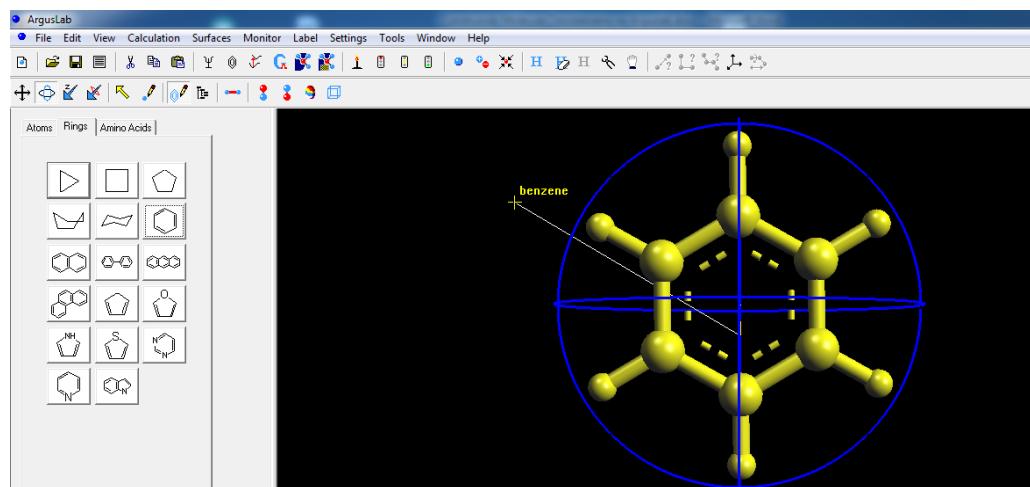


- 3) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

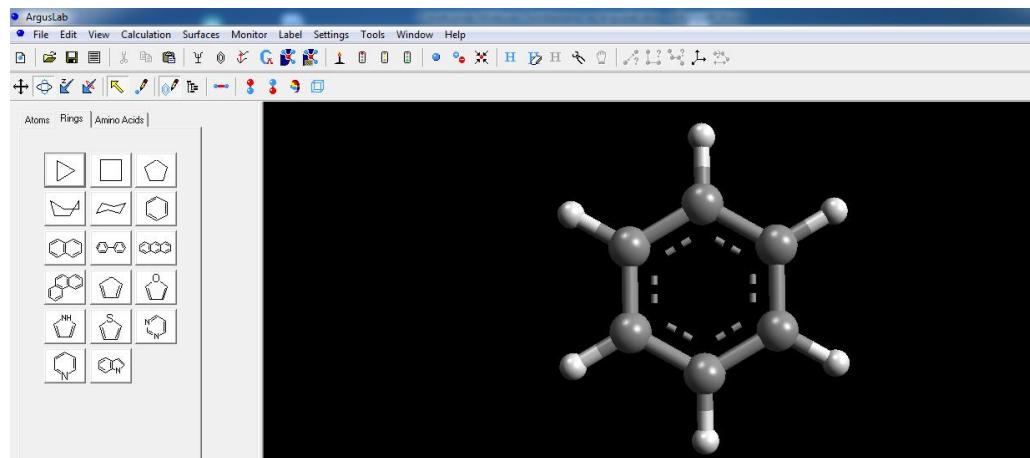
- 4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



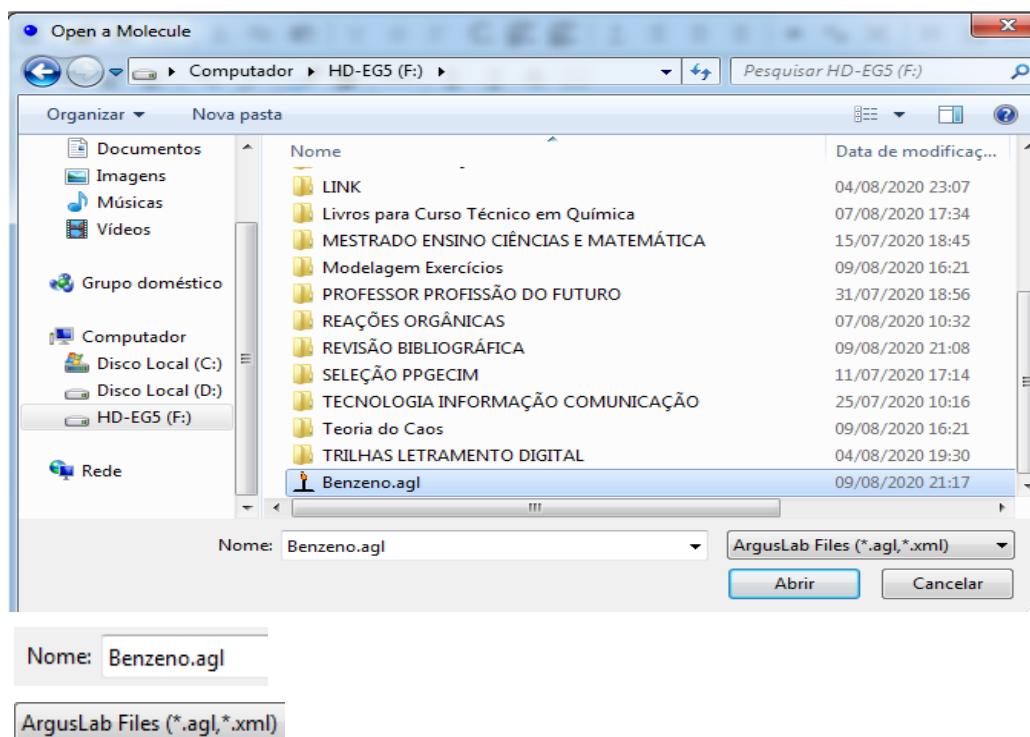
- 5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



- 6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



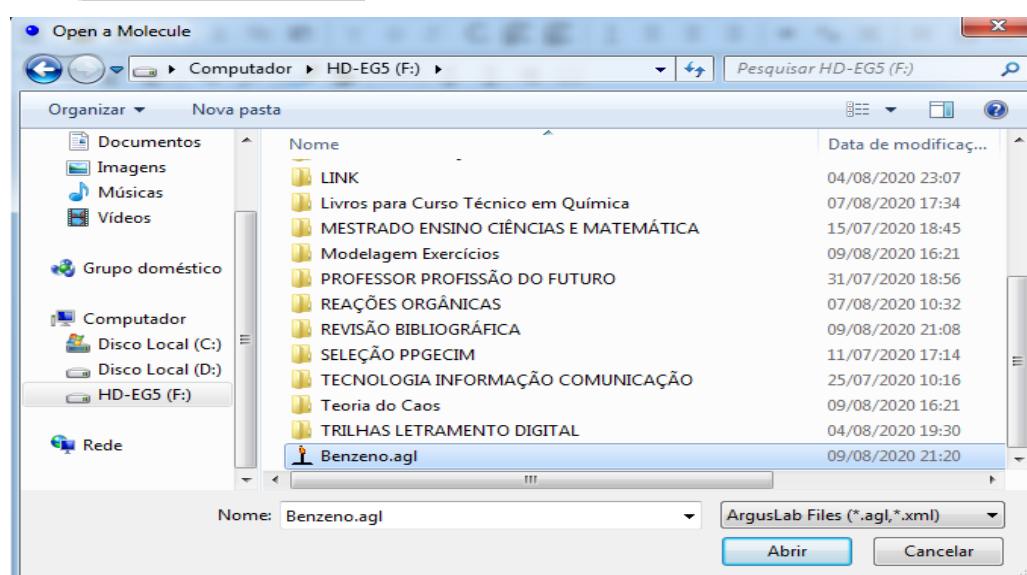
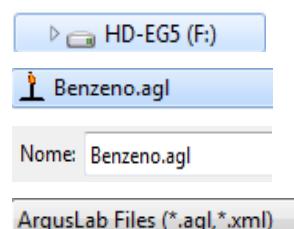
- 7) Feche o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save As
 8) Dê o nome para o arquivo de Benzeno.agl
 9) Escolha a pasta
 10) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



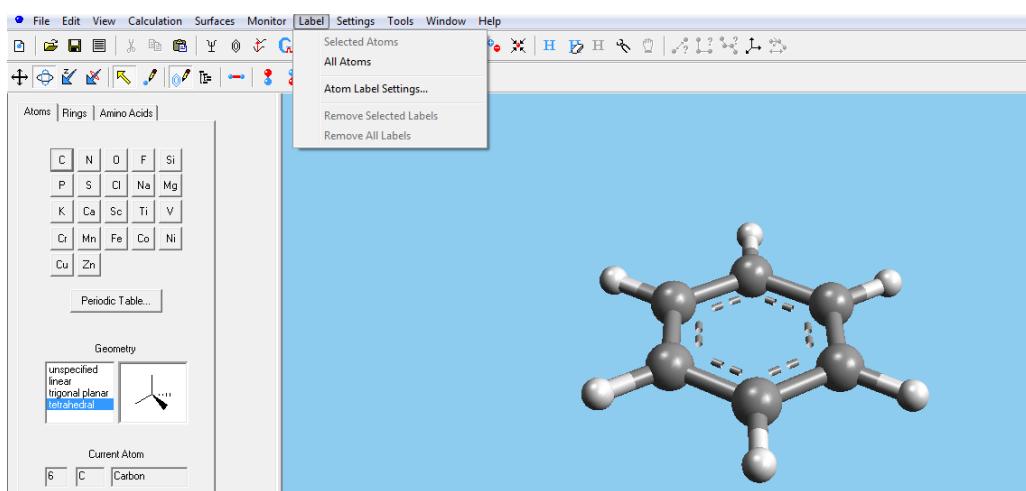
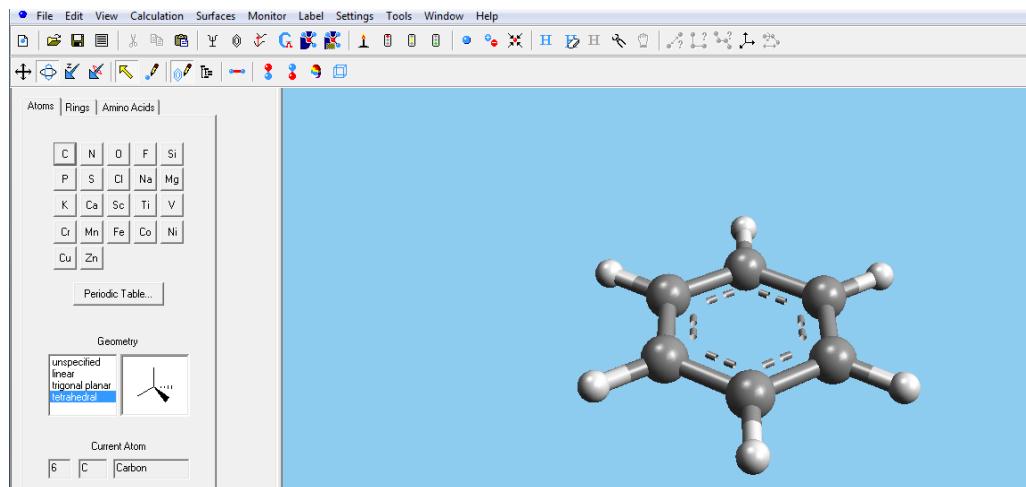
Exercício 2

Otimizar a Geometria da molécula do Benzeno no Arguslab

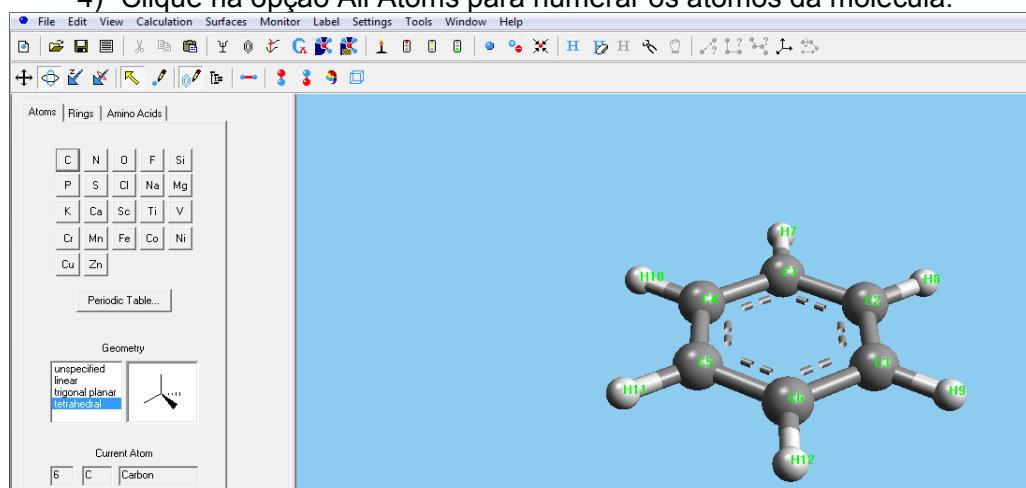
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



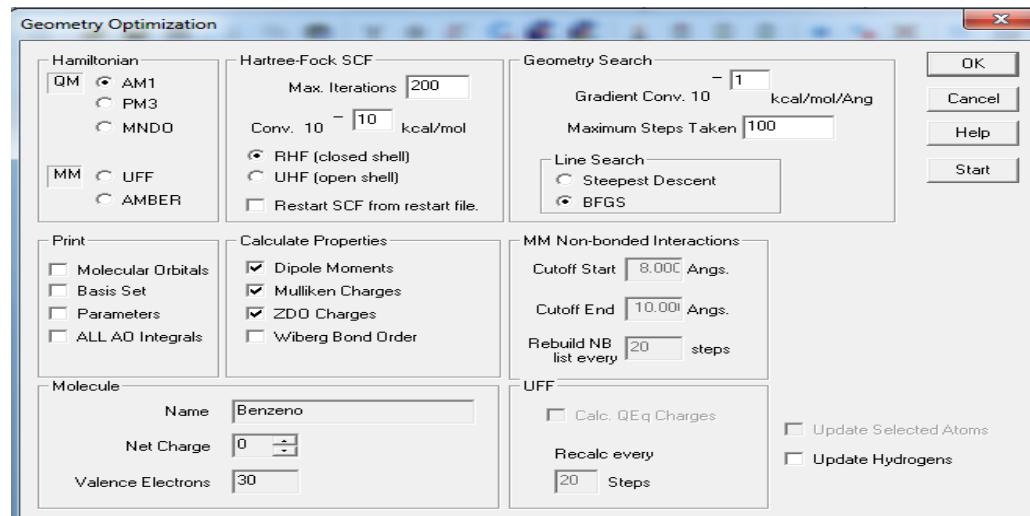
- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:



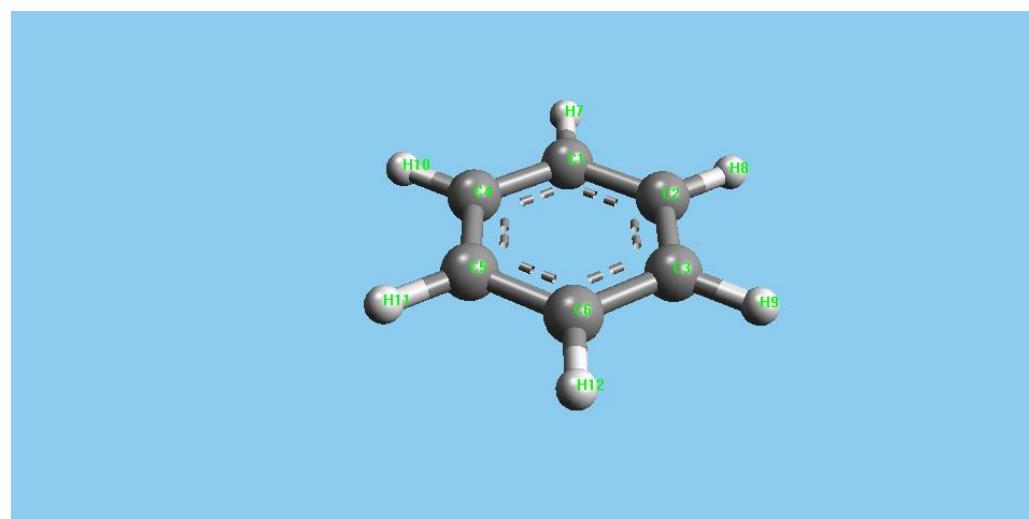
- 4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



- 5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



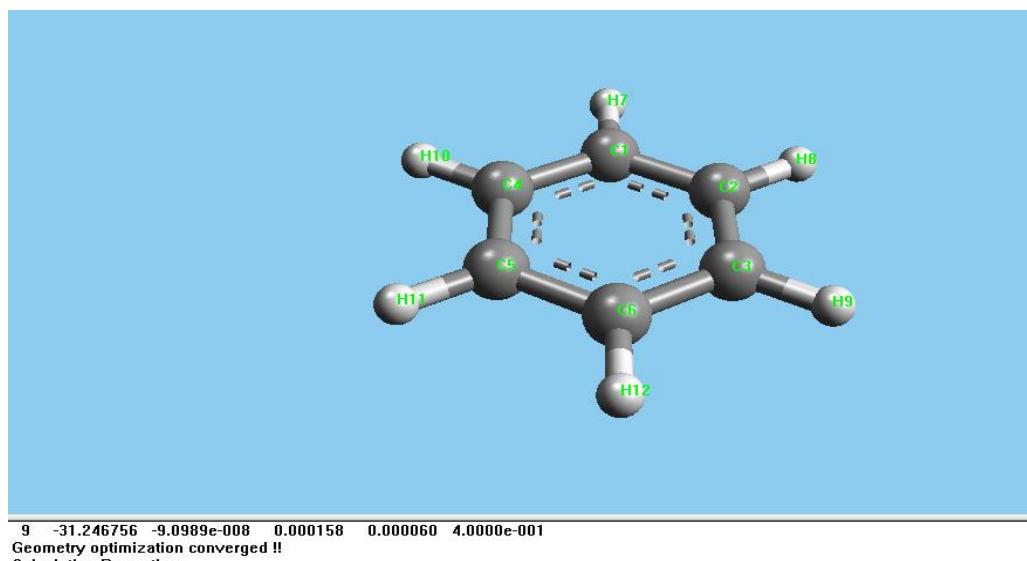
- 6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



```
9 -31.246756 -9.0989e-008 0.000158 0.000060 4.0000e-001
Geometry optimization converged !!
Calculating Properties
Calculation Finished
```

7) Selecione a opção  Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Nitrobenzeno.out.txt.

8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção  na Barra de Ferramentas:



9) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

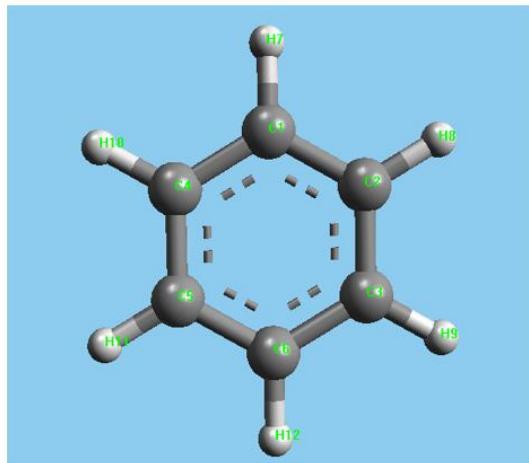
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Benzeno

- 1) Abra o arquivo texto Benzeno.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Mulliken, faça um Print Scren da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic Charges

1	C	-0.1916
2	C	-0.1916
3	C	-0.1916
4	C	-0.1916
5	C	-0.1916
6	C	-0.1916
7	H	0.1916
8	H	0.1916
9	H	0.1916
10	H	0.1916
11	H	0.1916
12	H	0.1916

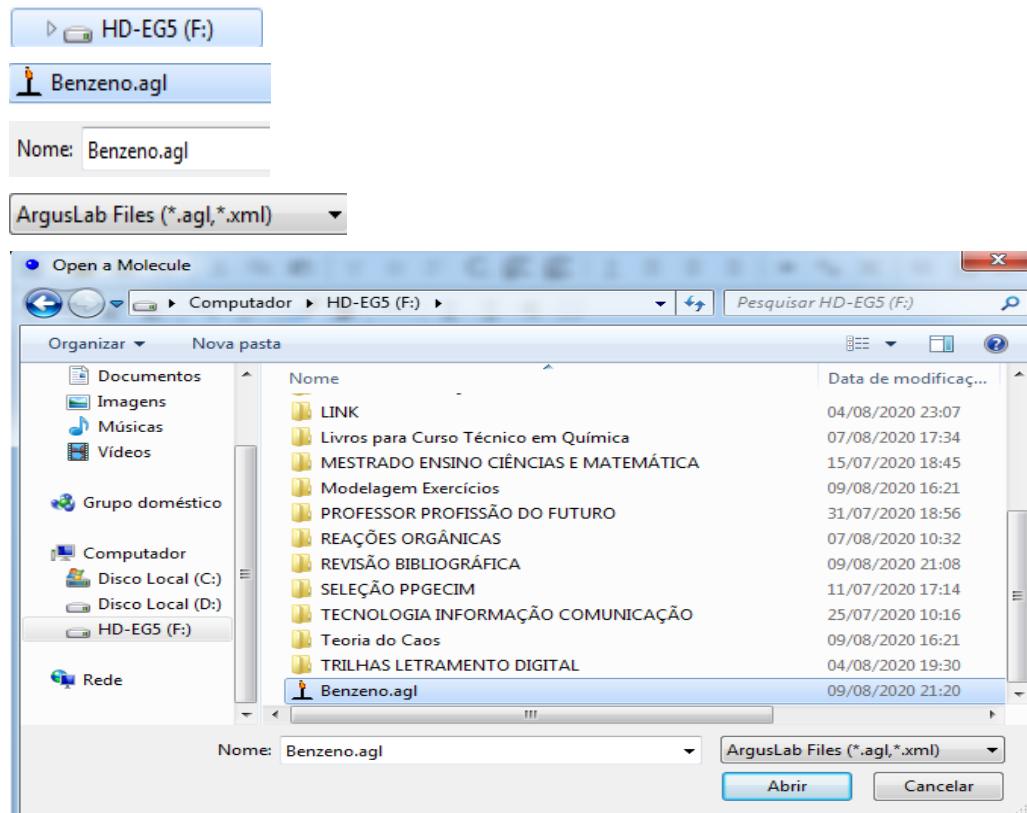
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



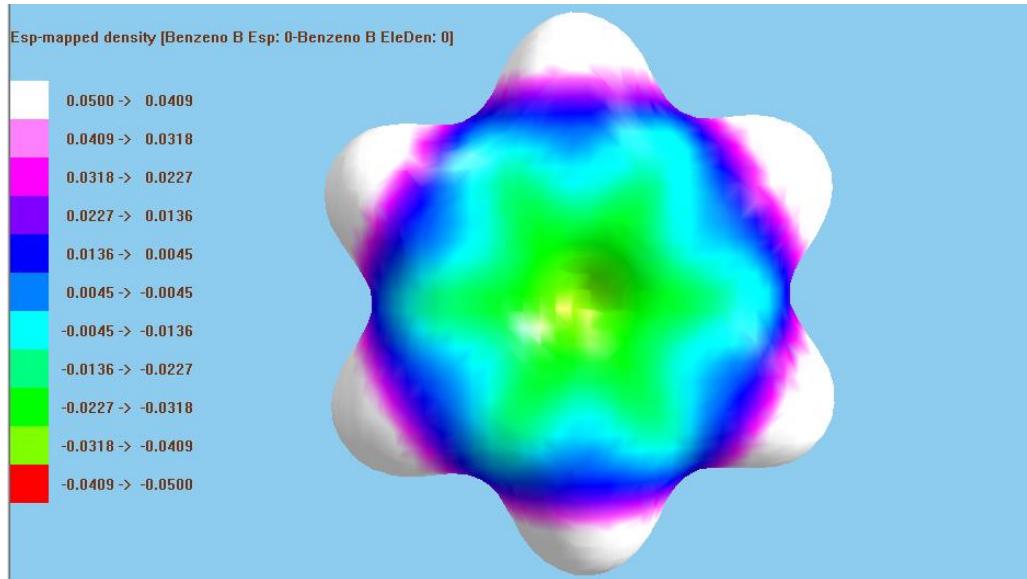
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Benzeno no Arguslab

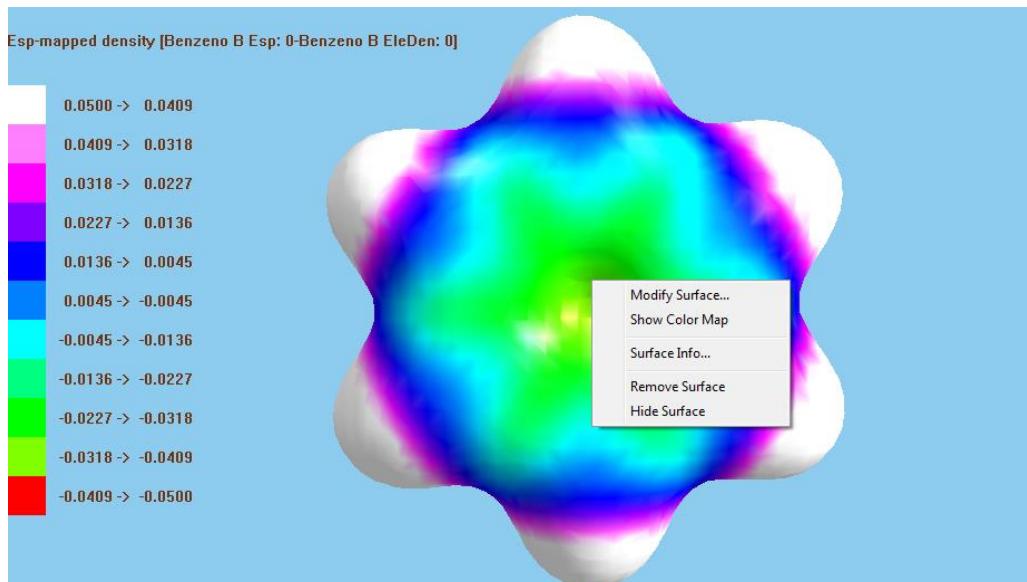
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

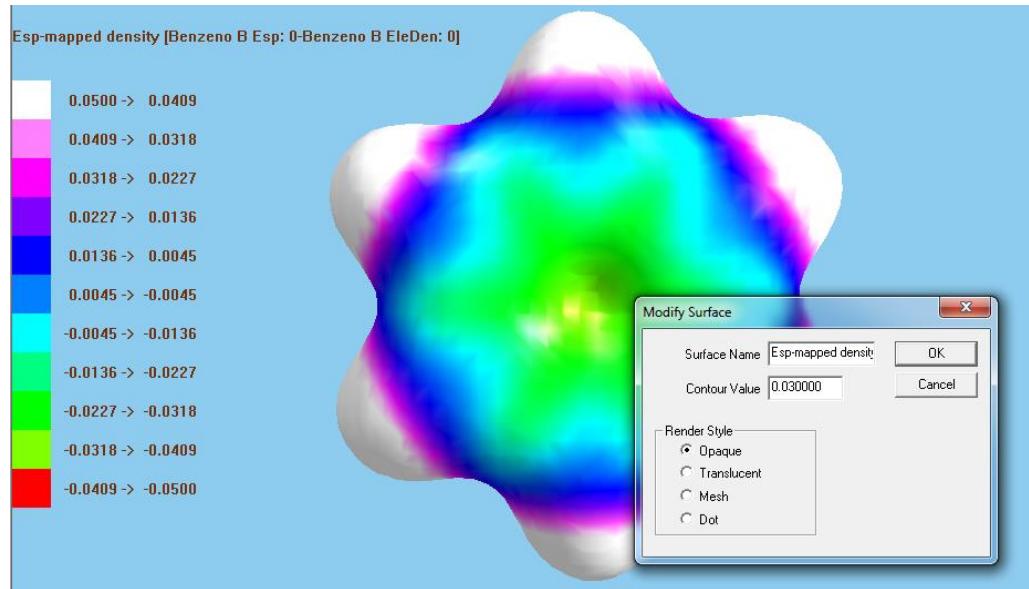


- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula de Benzeno ficará com o seguinte aspecto:

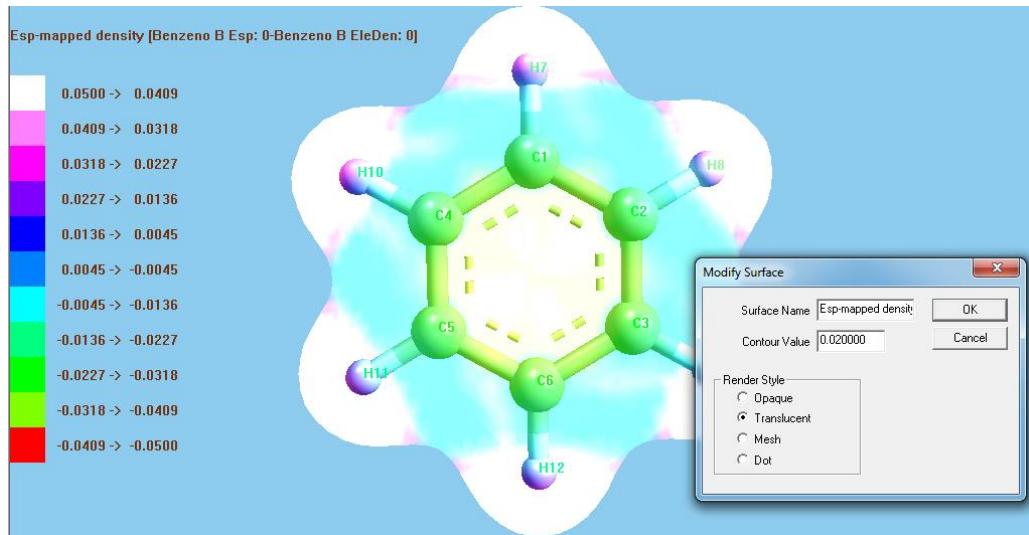


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:



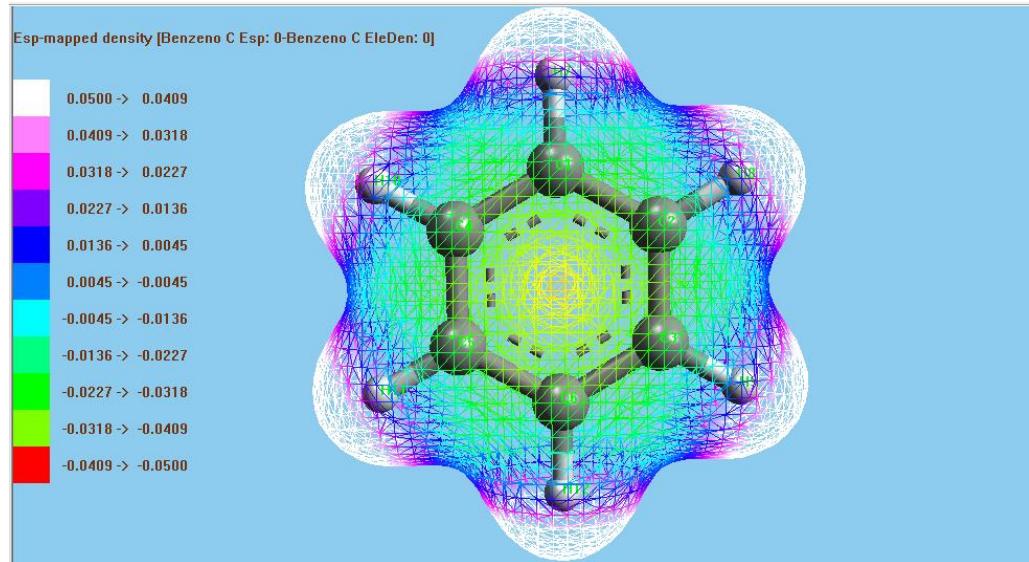


5) Altere o valor de contorno para 0.020000 e escolha a opção Translucent:



6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:

7) Selecione a opção Mesh:



8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE I - Construindo Molécula Clorobenzeno no Arguslab 9



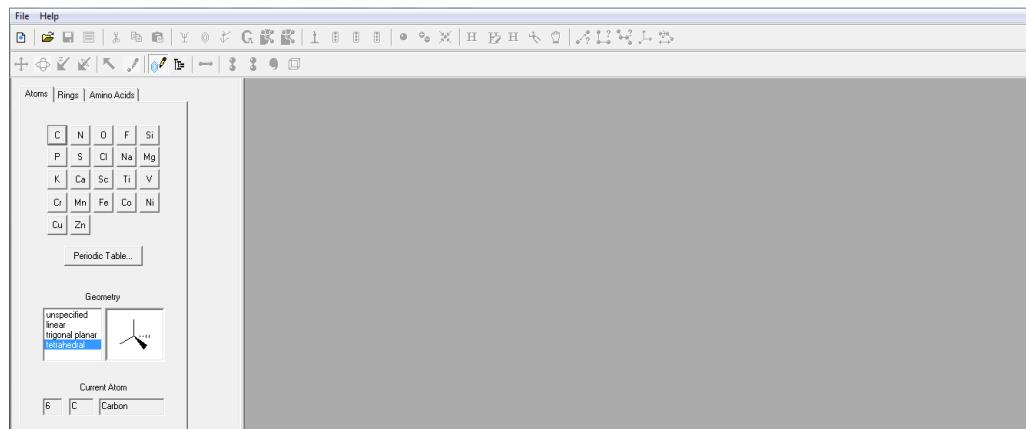
Exercício 1

Nome:

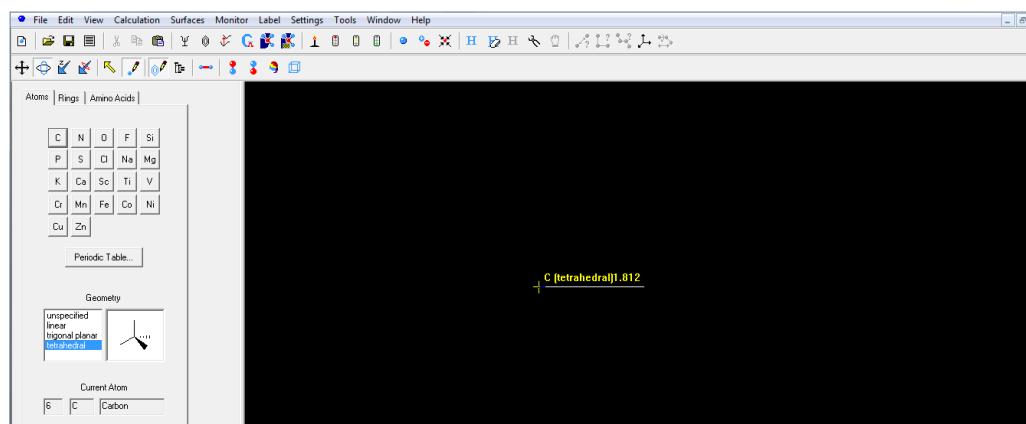
Data:

Construindo a molécula do Clorobenzeno no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

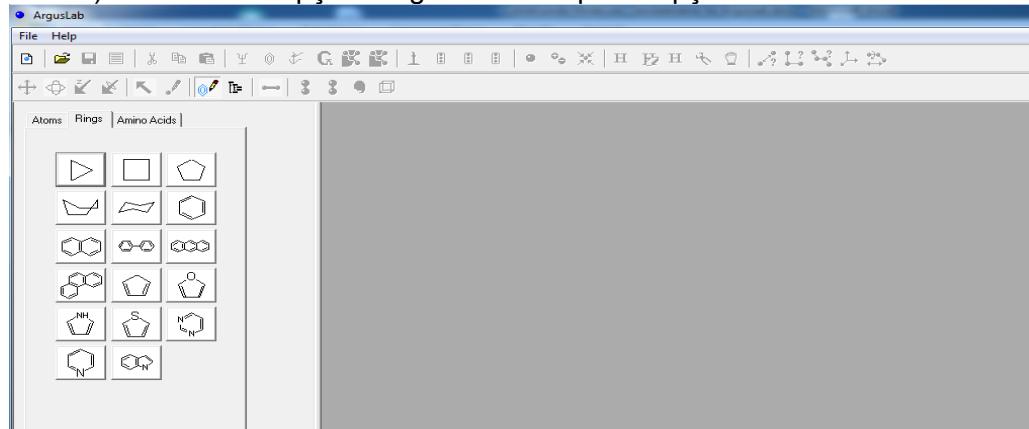


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

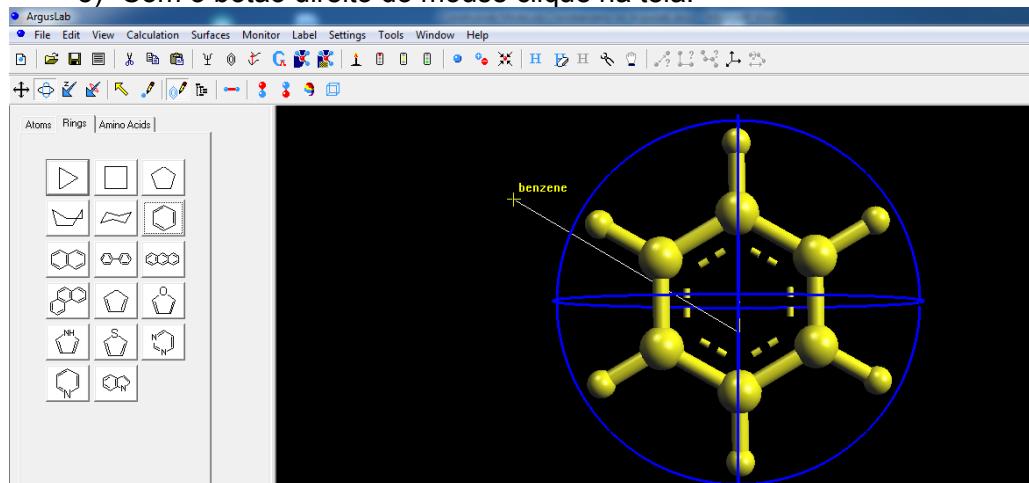


3) Clicar no botão na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

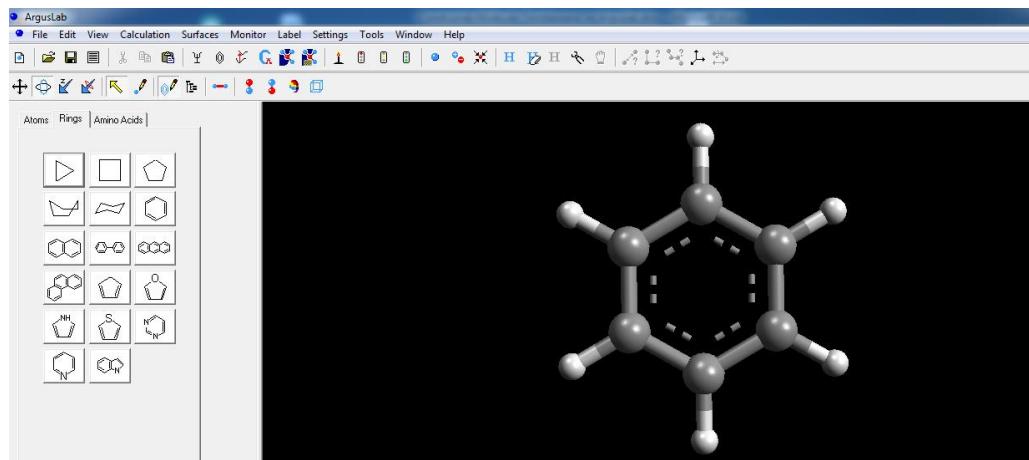
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



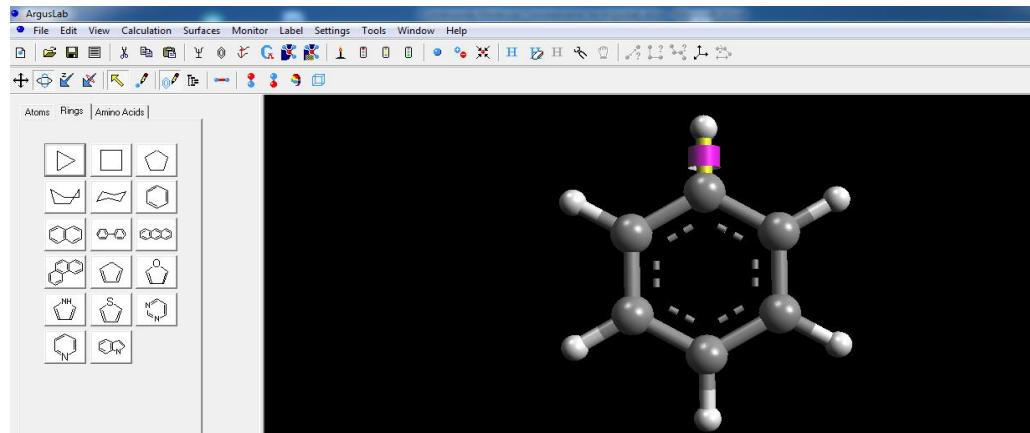
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



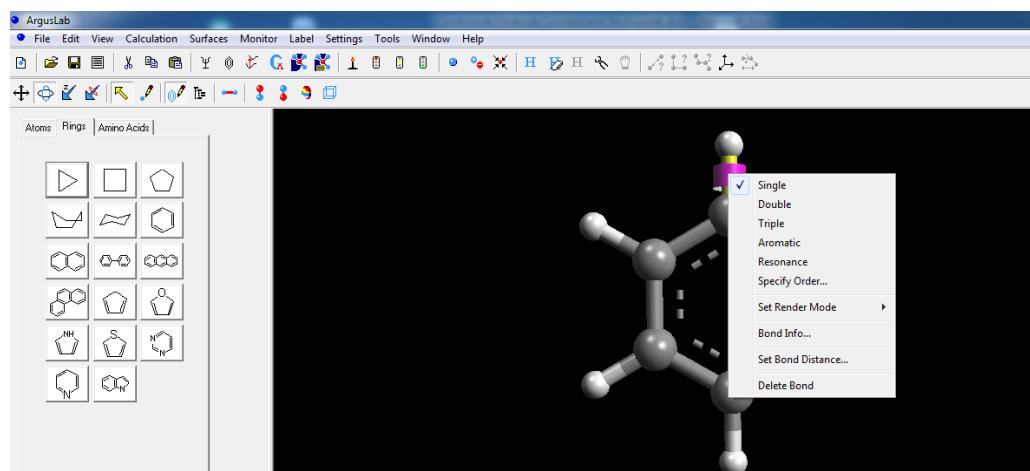
6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



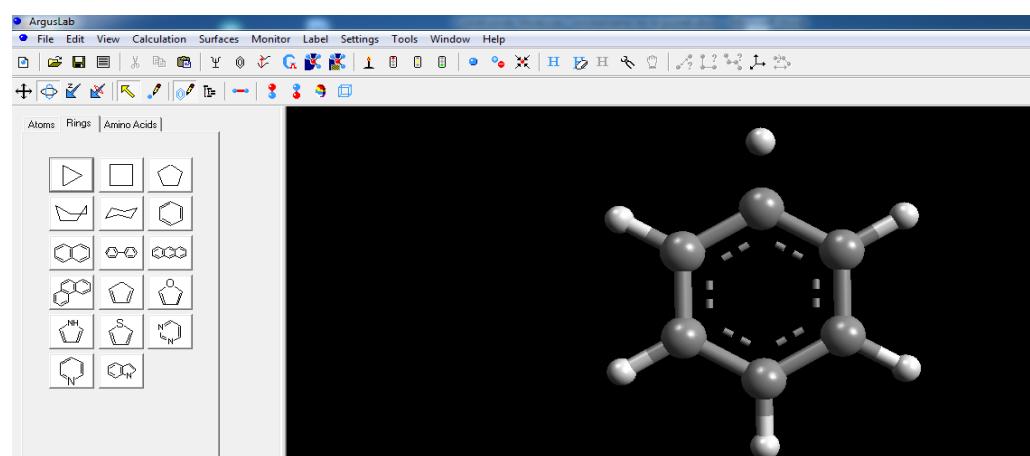
7) Com o botão esquerdo do mouse clique na ligação Carbono - Hidrogênio:



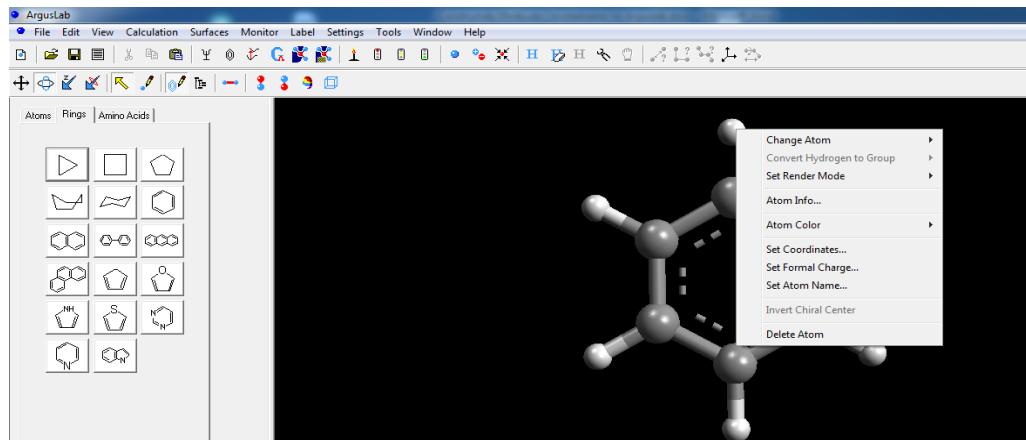
8) Clique com o botão direito do mouse sobre a ligação selecionada:



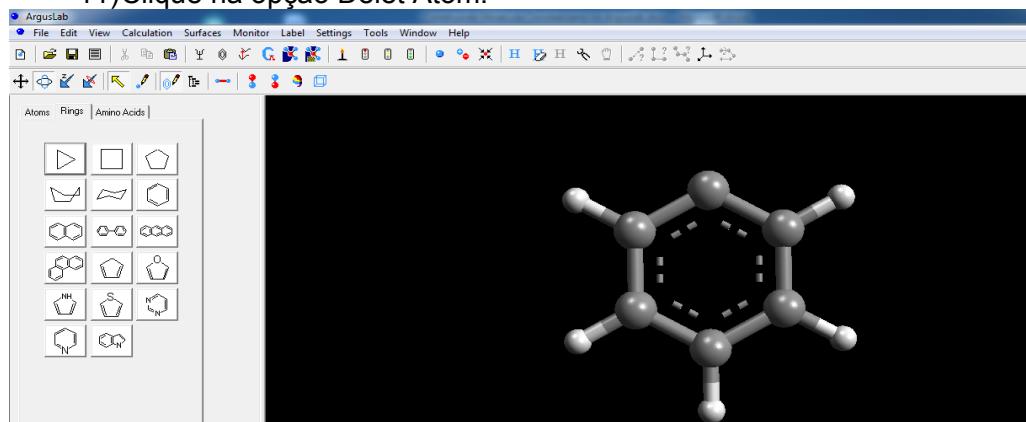
9) Clique na opção Delete Bond:



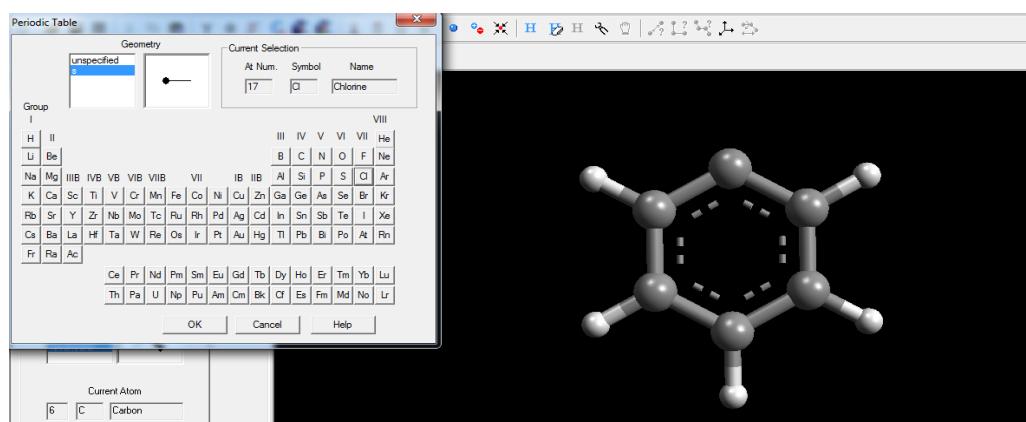
10) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo de Hidrogênio selecionado:



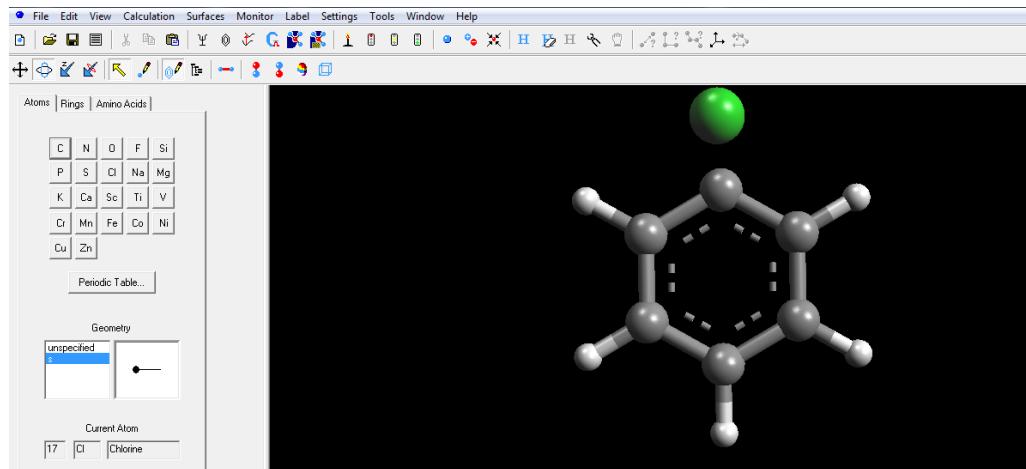
11) Clique na opção Delete Atom:



12) Selecione novamente na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela periódica, e após clique no átomo de Cloro com a opção S e clique em OK:

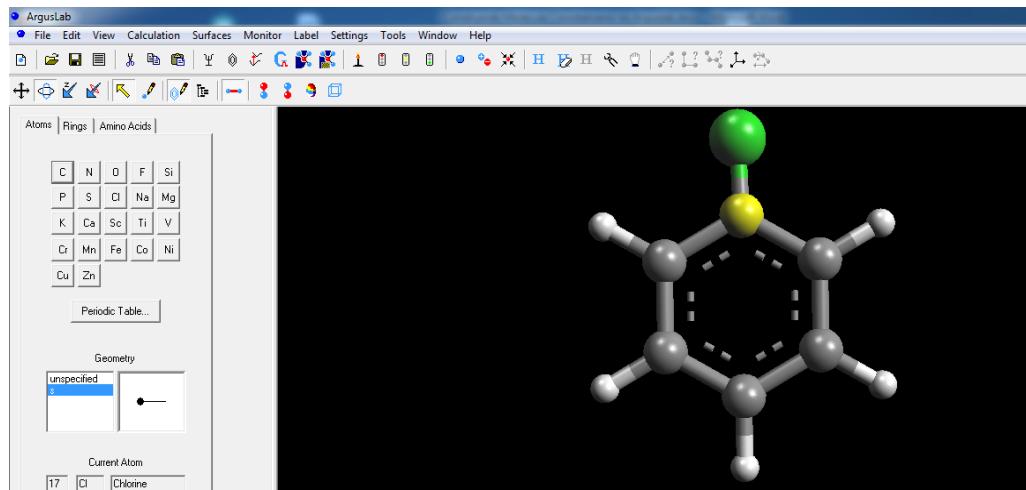


13)Com o botão direito do mouse clique no local do átomo de Hidrogênio que foi deletado:



14)Para inserir a ligação entre o átomo de Cloro e o Carbono: selecione a

opção e clique na opção vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo de Cloro e Carbono, a ligação é inserida:

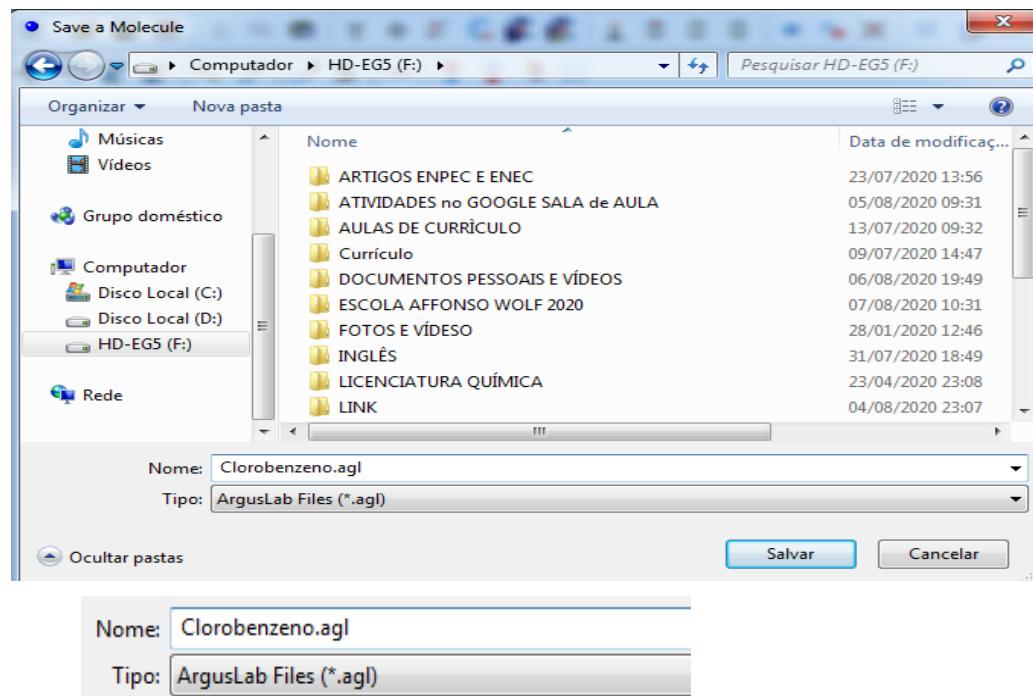


15)Salve o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save As

16)Dê o nome para o arquivo de Clorobenzeno.agl

17)Escolha a pasta

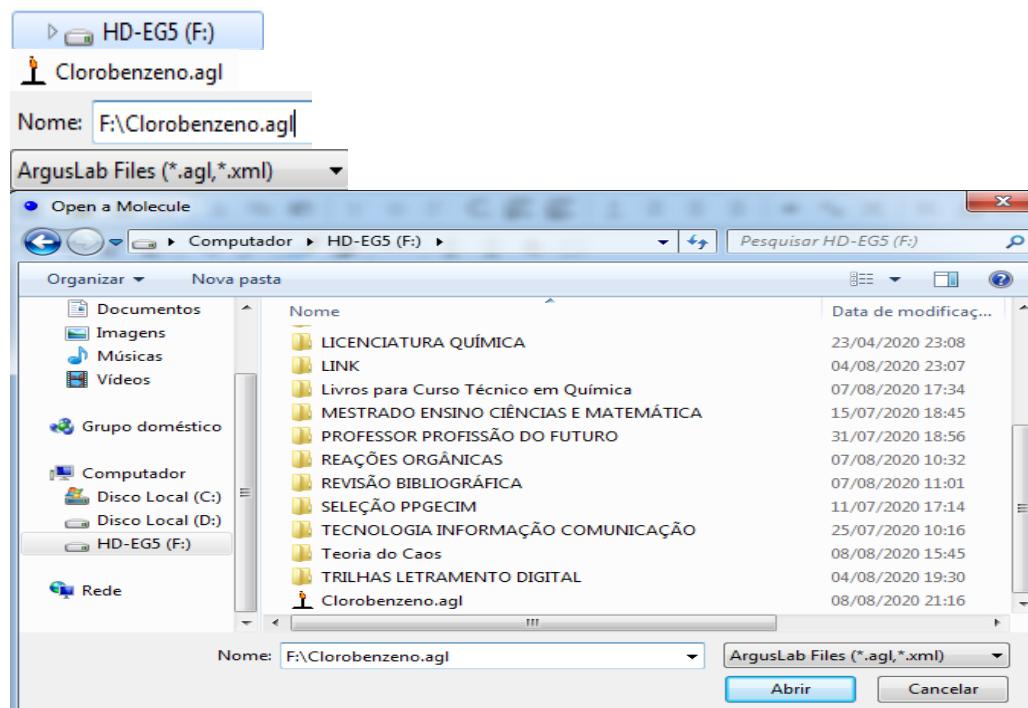
18)Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



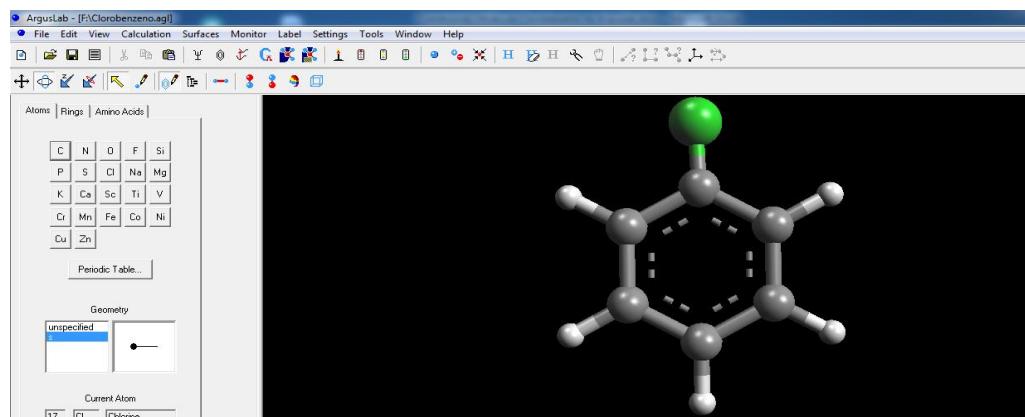
Exercício 2

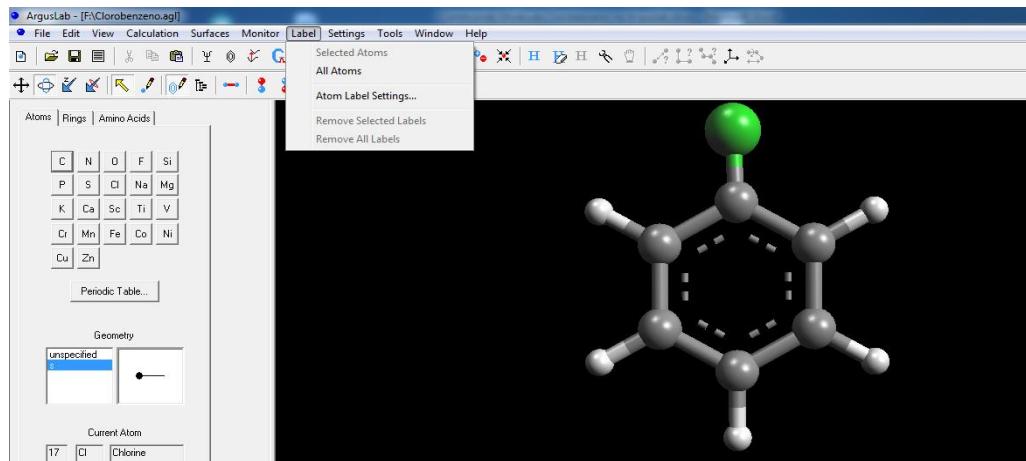
Otimizar a Geometria da molécula do Clorobenzeno Arguslab

- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

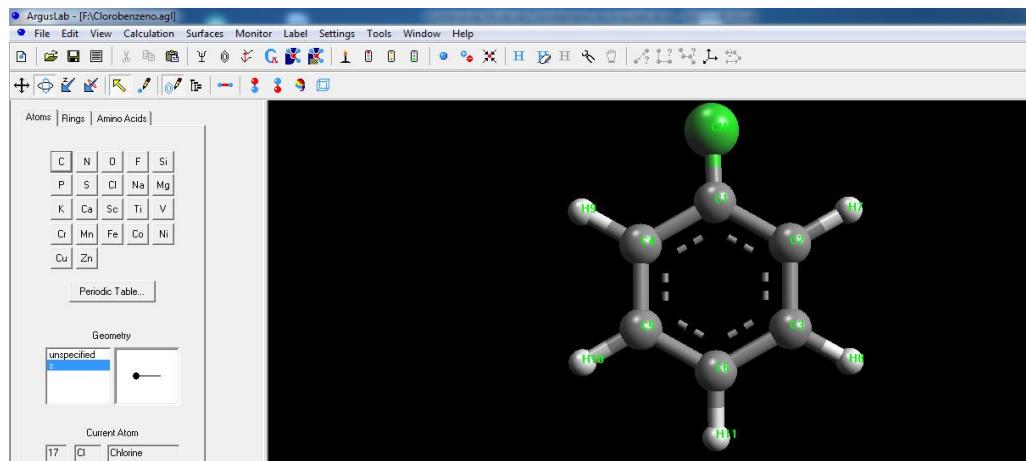


- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:

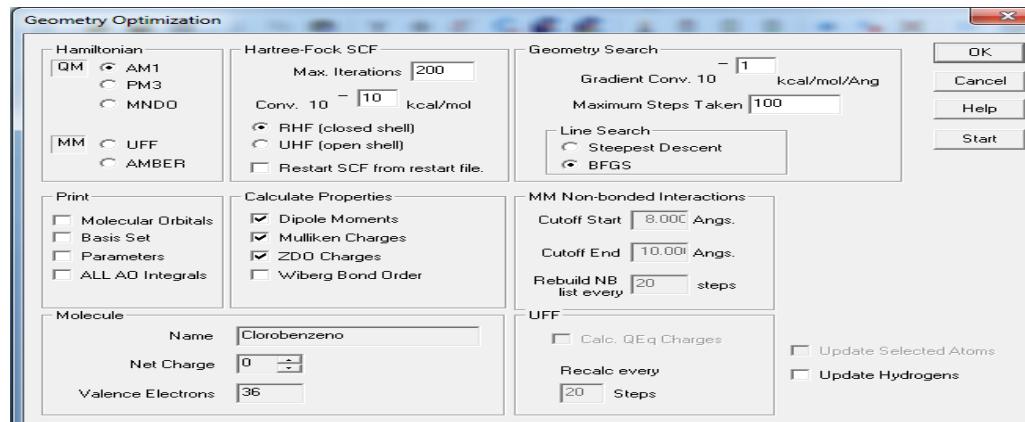




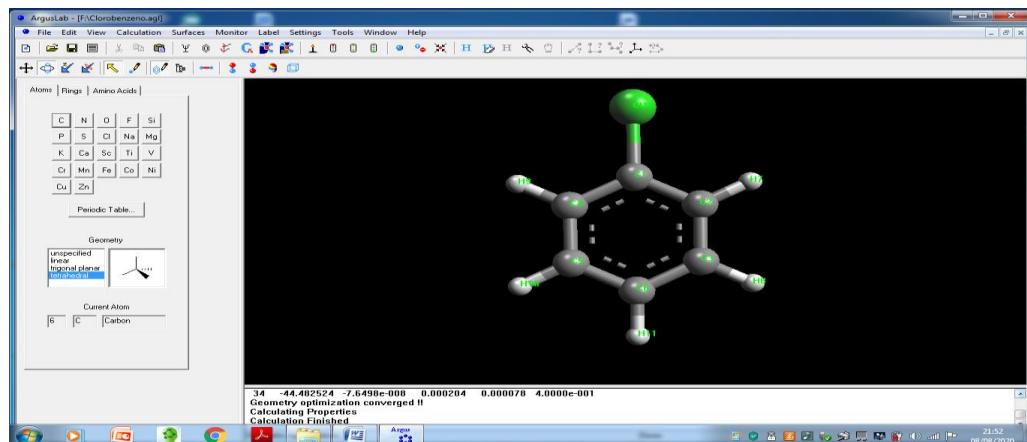
4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



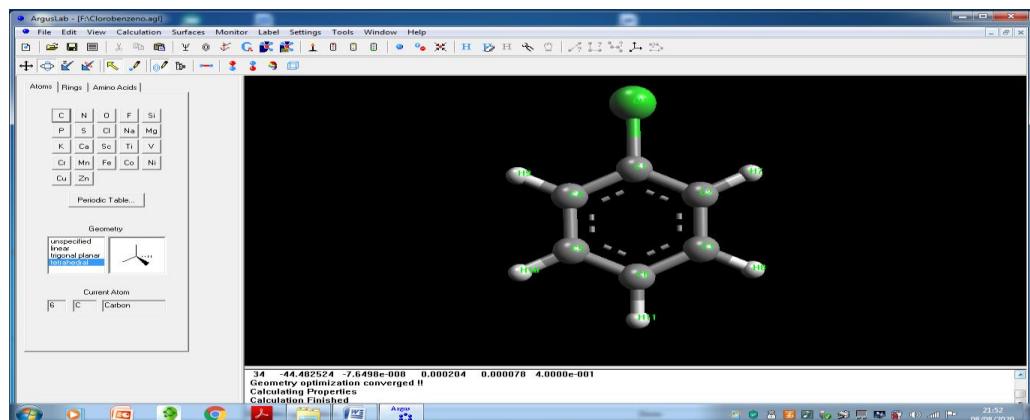
5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



- 6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



- 7) Selecione a opção Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Clorobenzeno.out.txt.
- 8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção na Barra de Ferramentas:



- 9) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

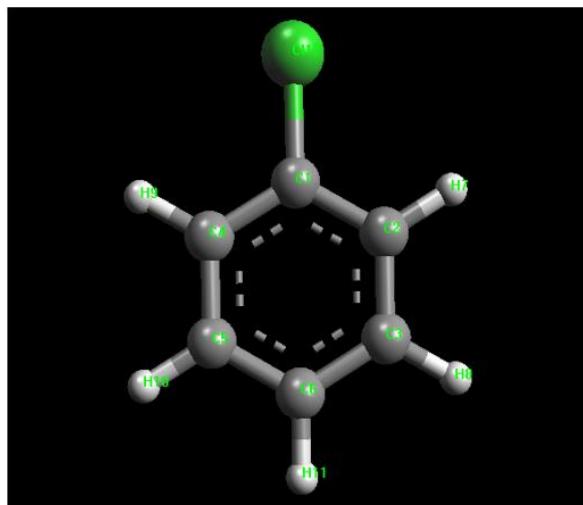
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Clorobenzeno

- 1) Abra o arquivo texto Clorobenzeno.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Mulliken, faça um Print Scren da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic Charges

1	C	-0.0808
2	C	-0.1770
3	C	-0.1835
4	C	-0.1771
5	C	-0.1834
6	C	-0.1919
7	H	0.2129
8	H	0.1998
9	H	0.2129
10	H	0.1999
11	H	0.1981
12	Cl	-0.0298

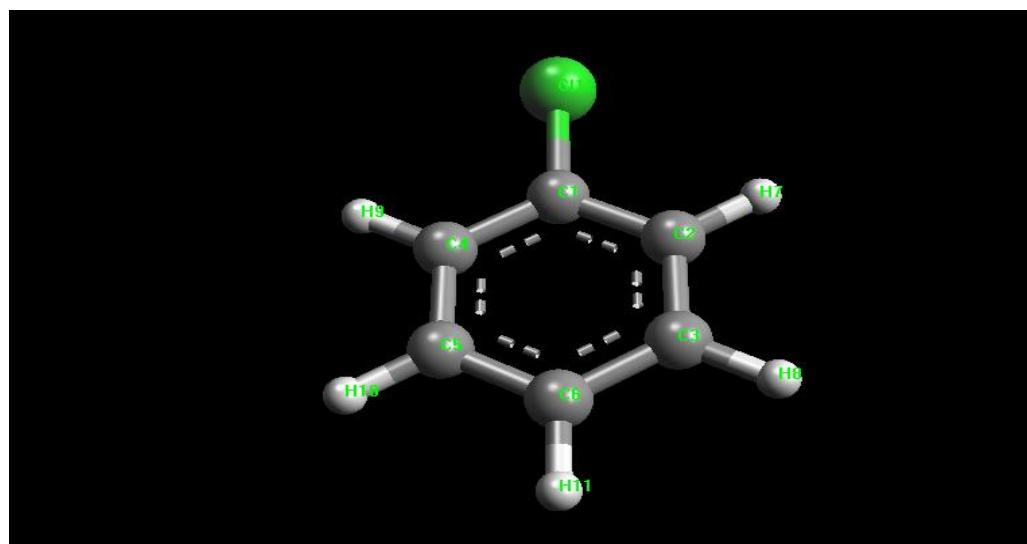
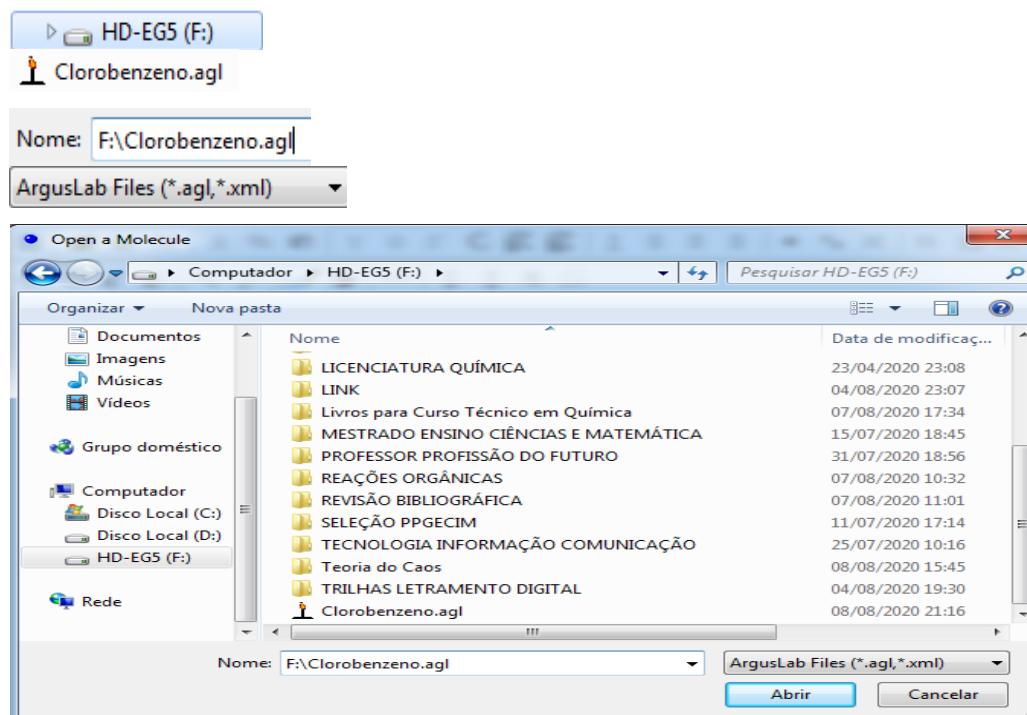
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



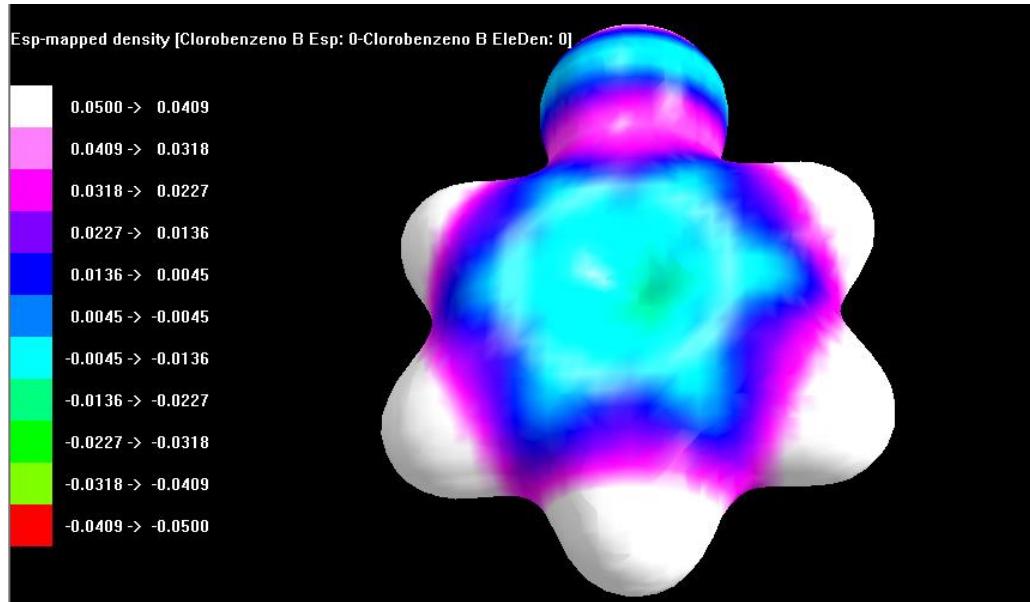
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Clorobenzeno no Arguslab

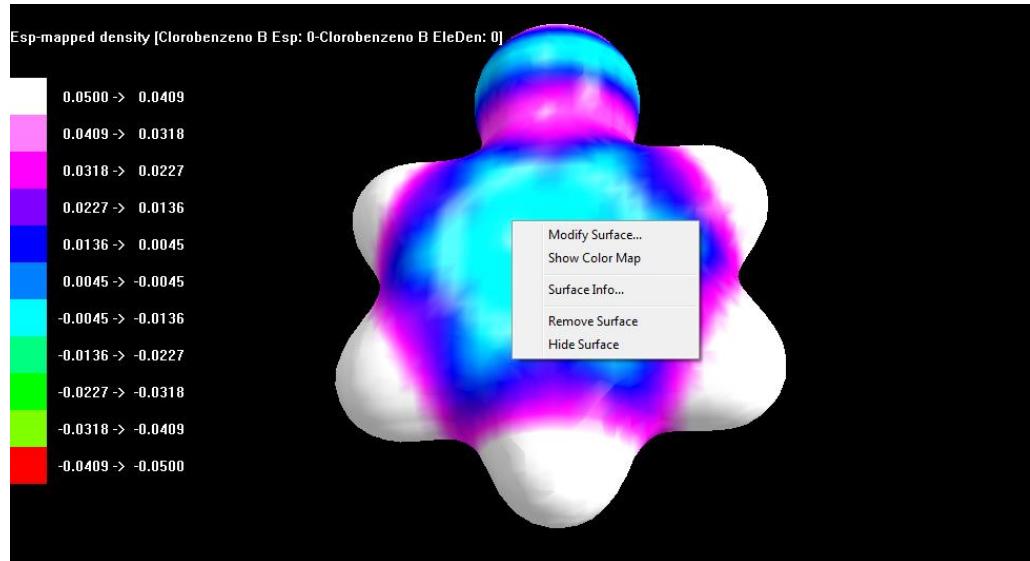
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

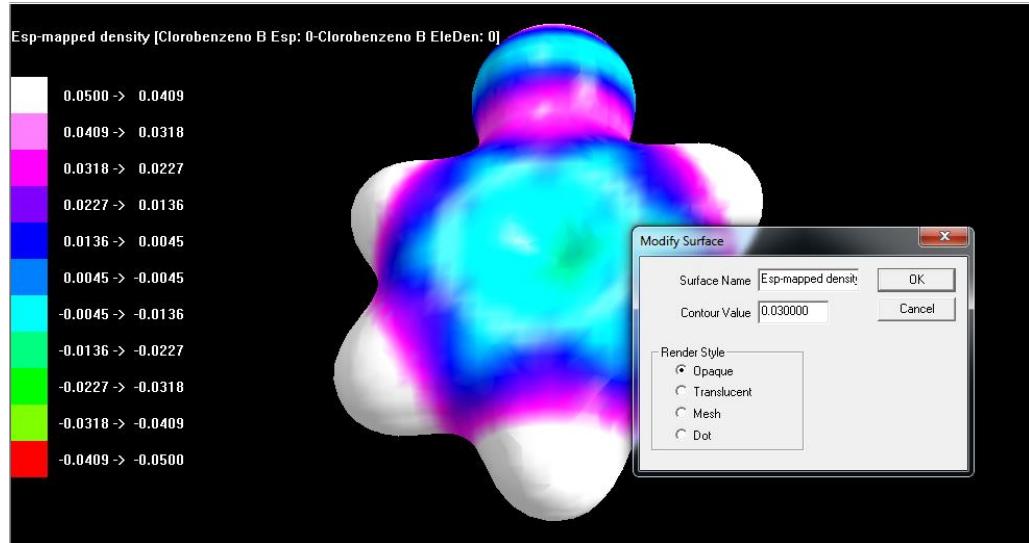


- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula de Clorobenzeno ficará com o seguinte aspecto:

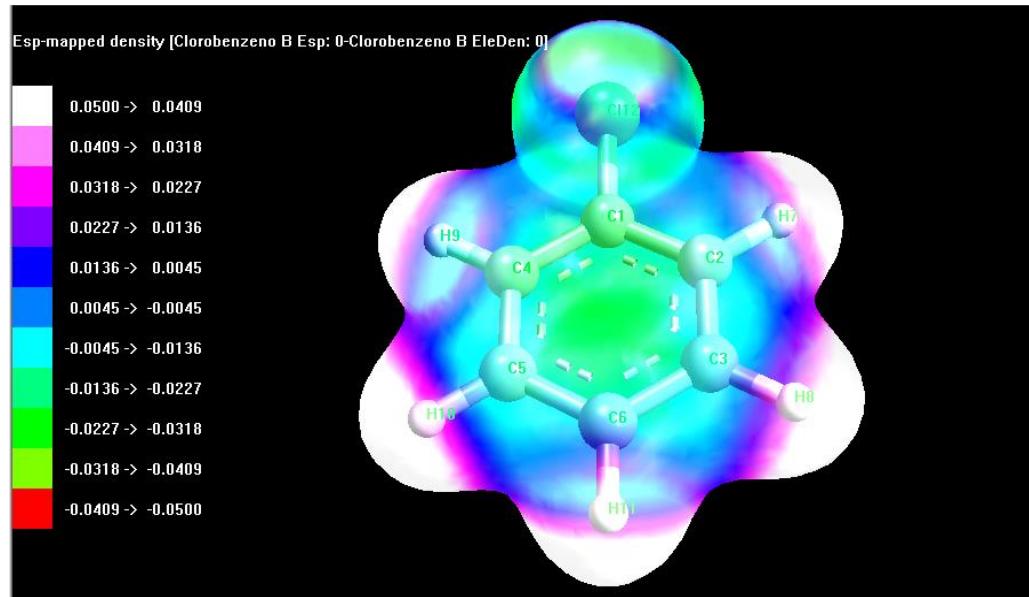


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:

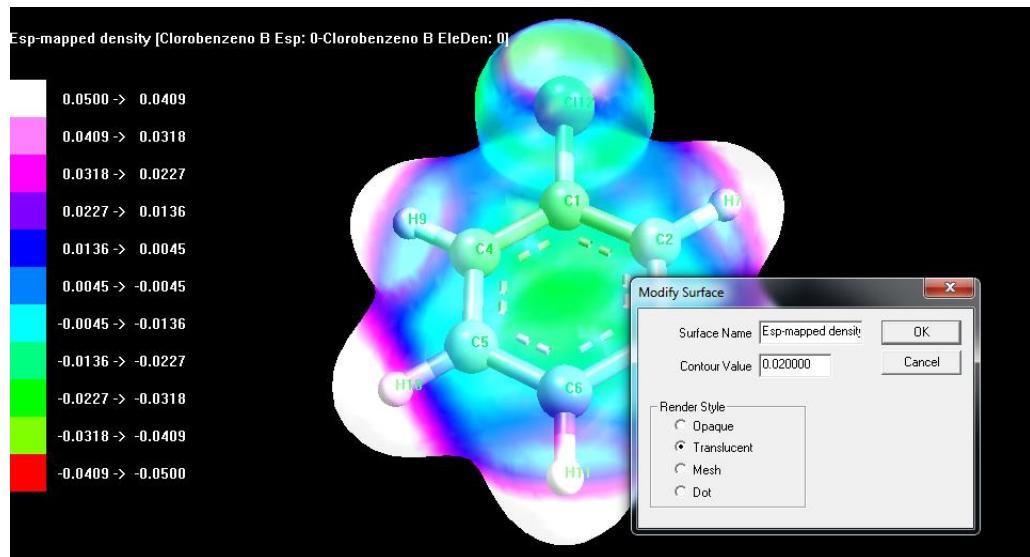




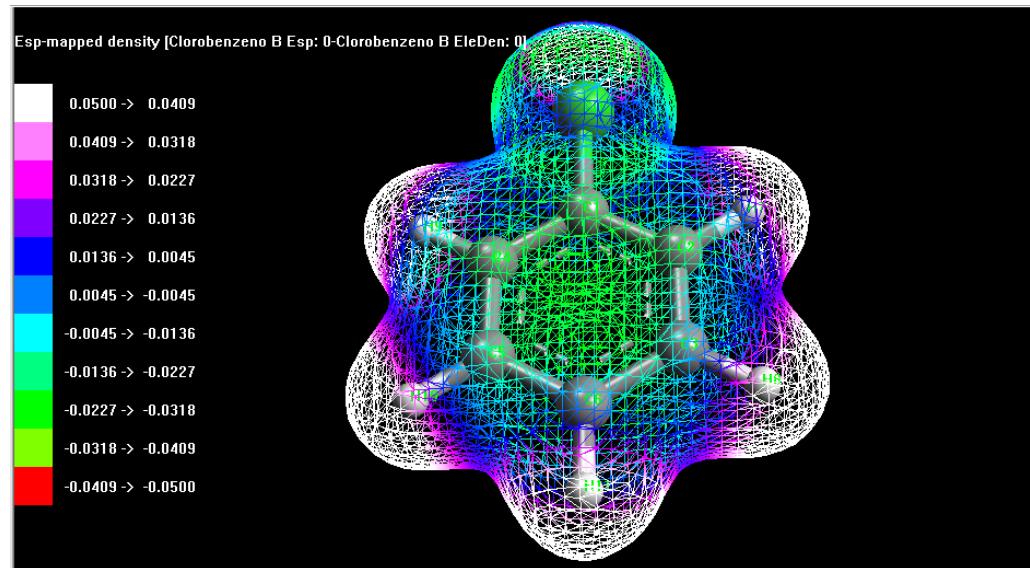
5) Altere o valor de contorno para 0.020000 e escolha a opção Translucent:



6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:



7) Selecione a opção Mesh:



8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE J - Construindo Molécula Fenol no Arguslab 10



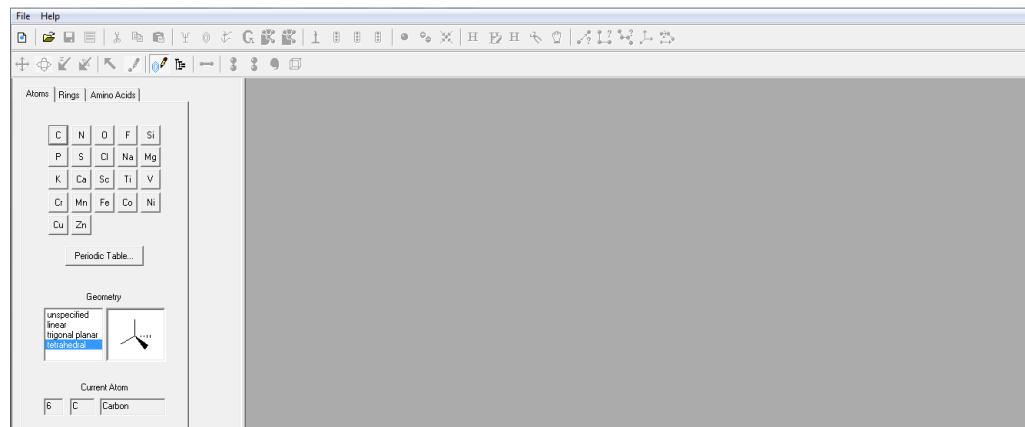
Exercício 1

Nome:

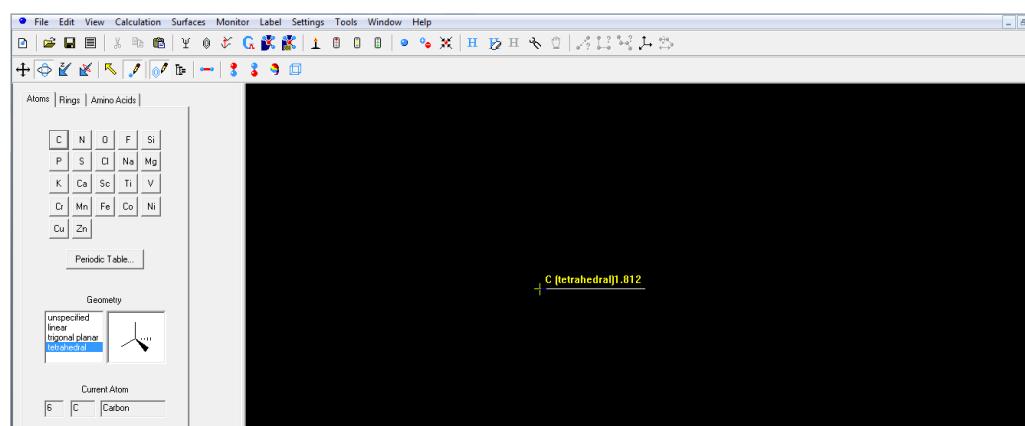
Data:

Construindo a molécula do Fenol no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

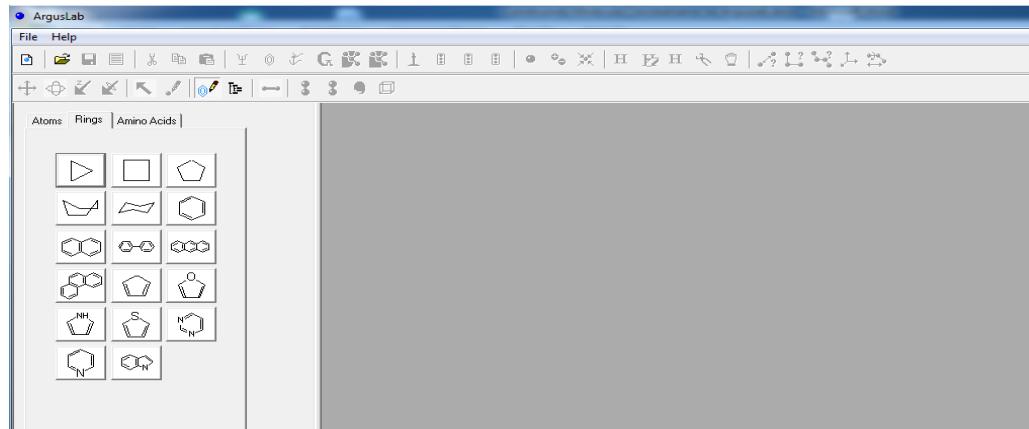


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

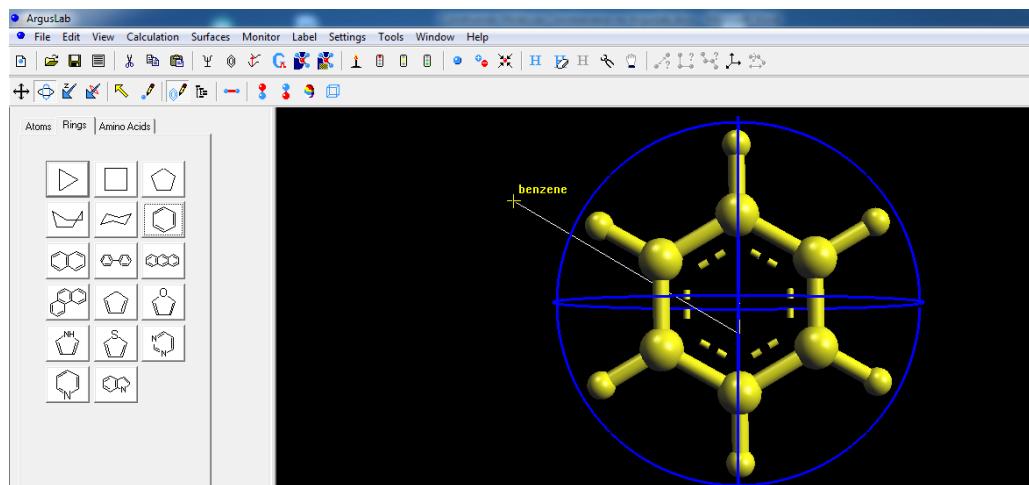


3) Clicar no botão na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

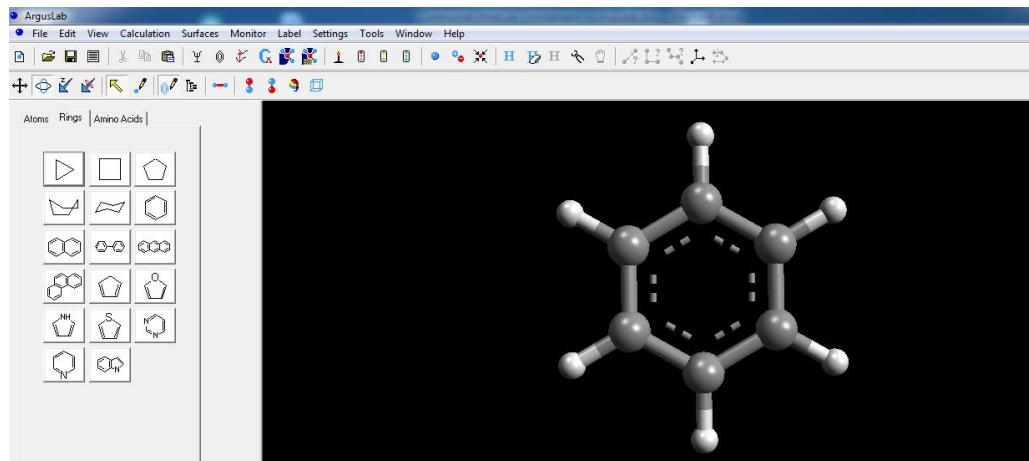
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



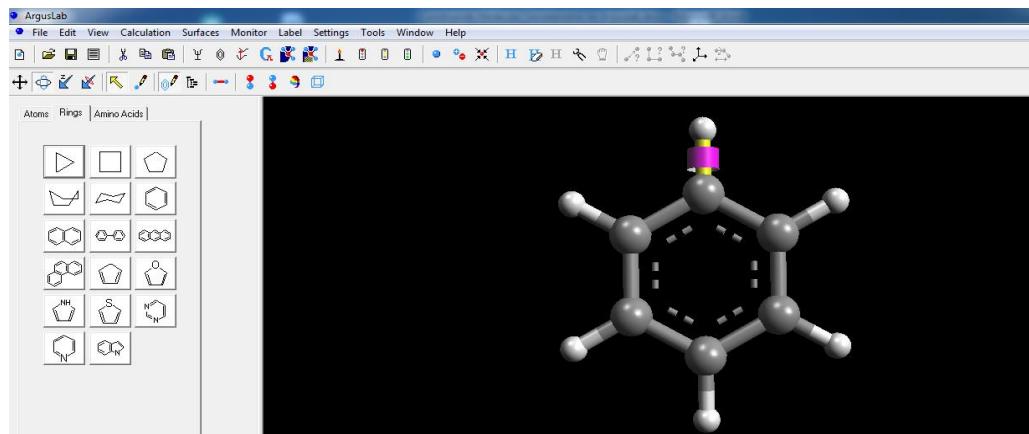
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



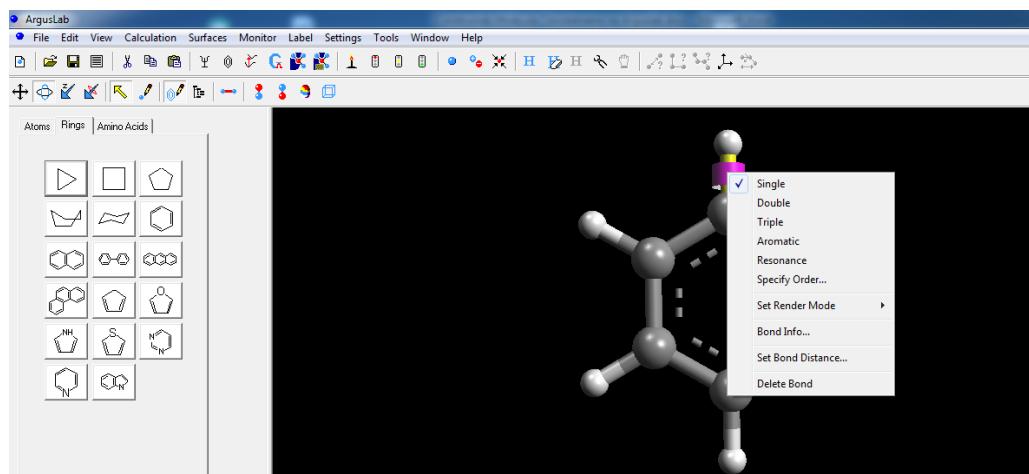
6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



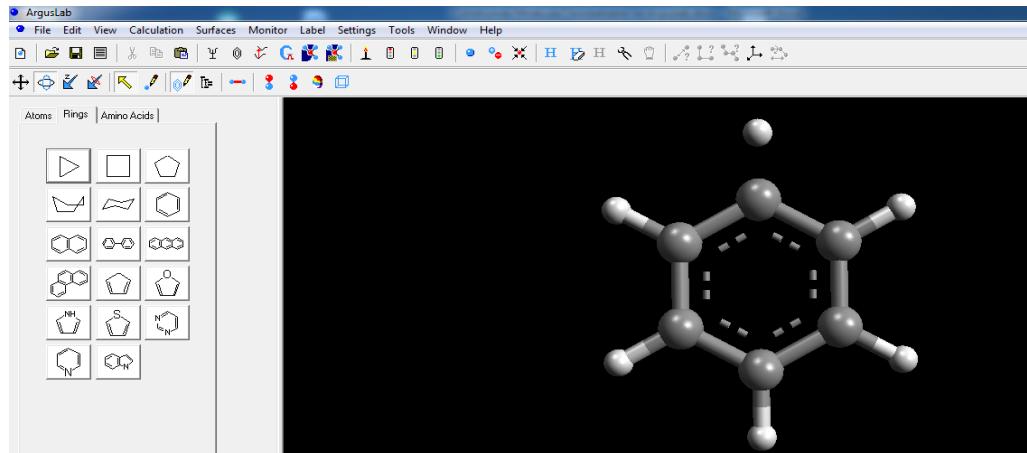
7) Com o botão esquerdo do mouse clique na ligação Carbono - Hidrogênio:



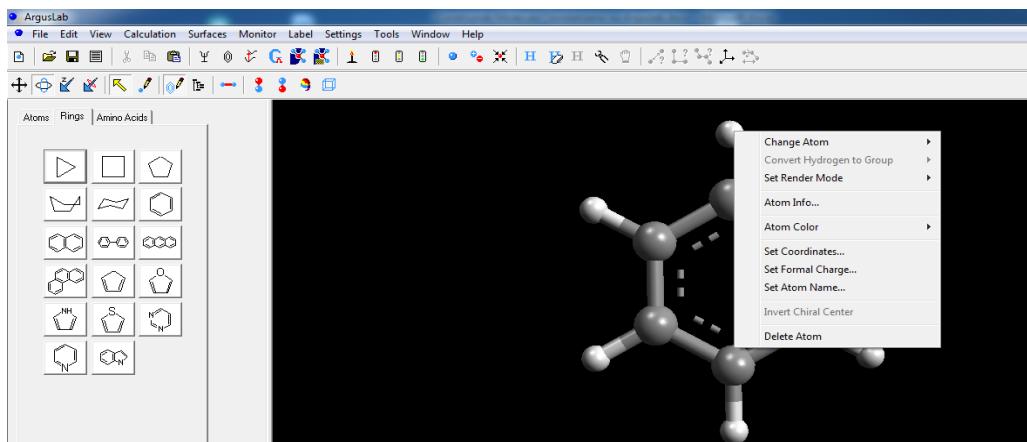
8) Clique com o botão direito do mouse sobre a ligação selecionada:



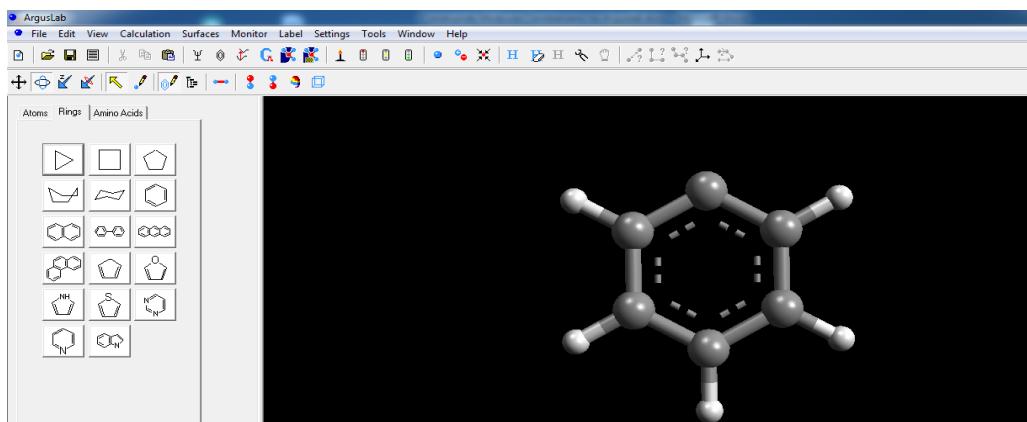
9) Clique na opção Delete Bond:



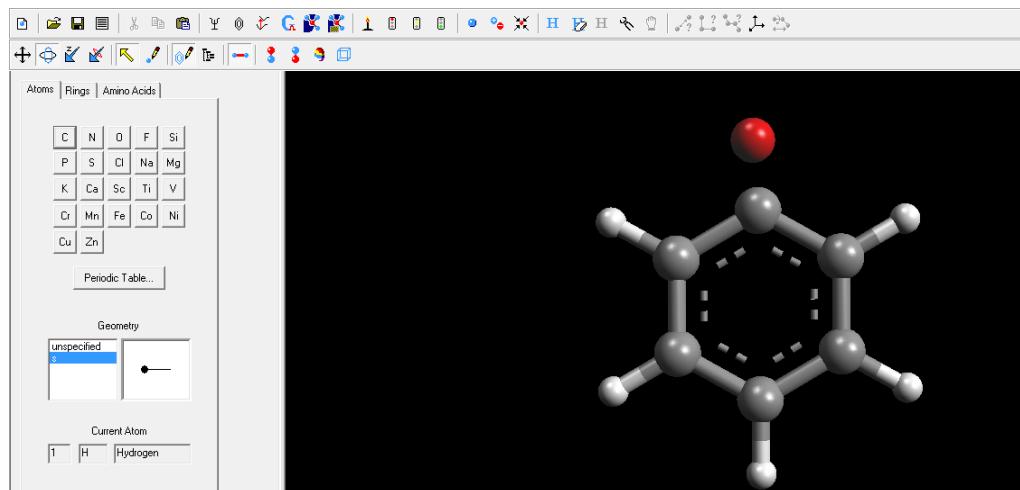
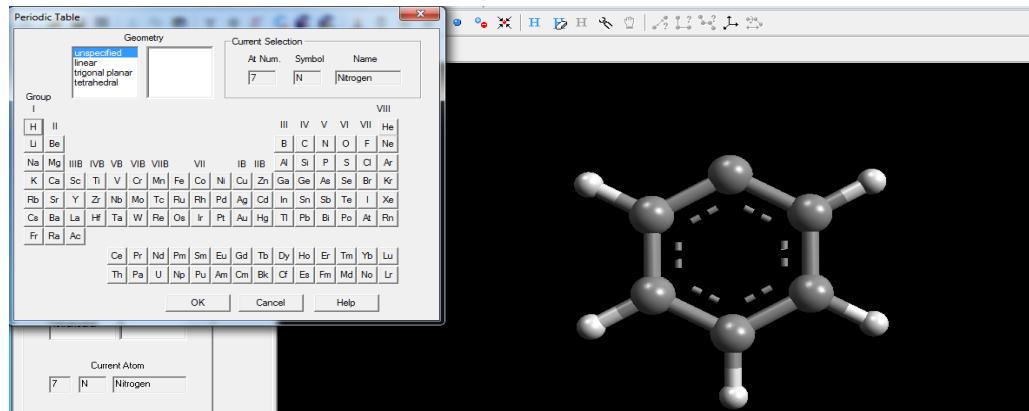
10) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo de Hidrogênio selecionado:



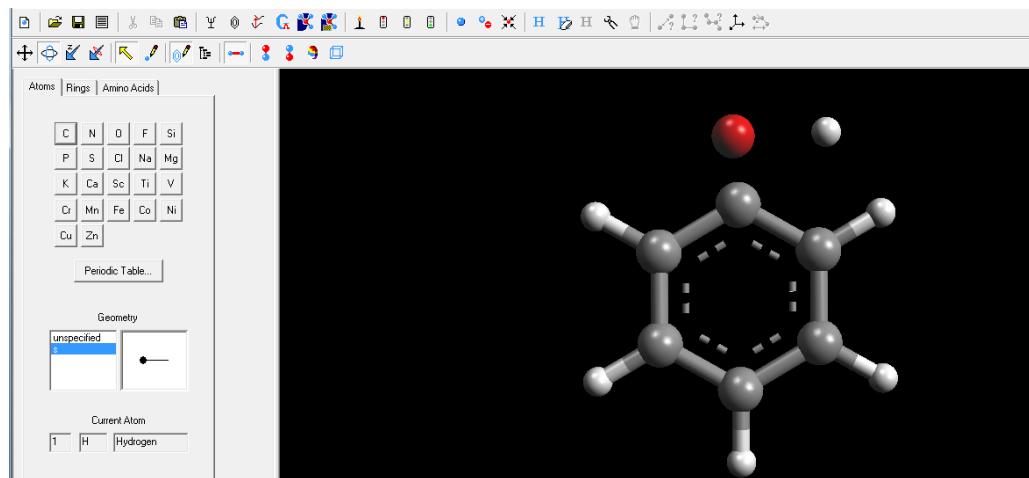
11) Clique na opção Delet Atom:



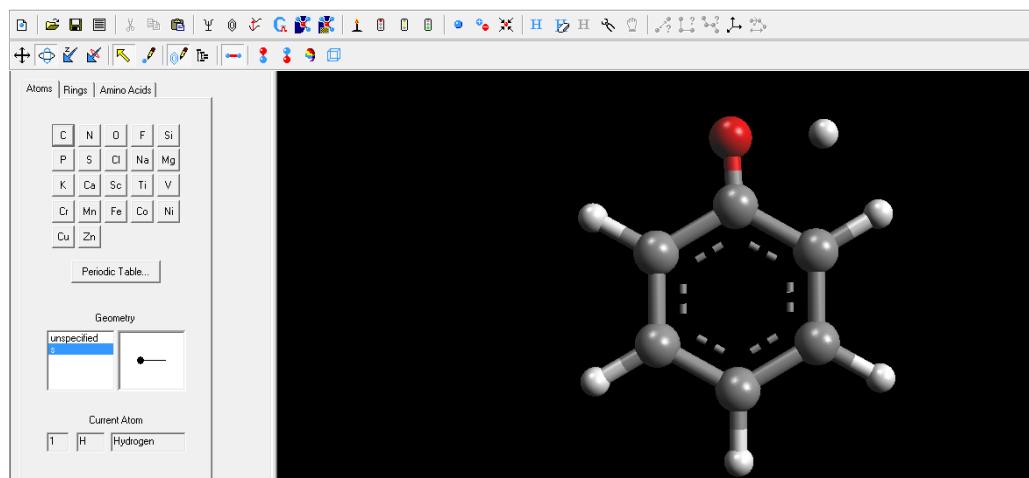
12) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela periódica, e após clique no átomo de Oxigênio com a opção unspecified e clique em OK:



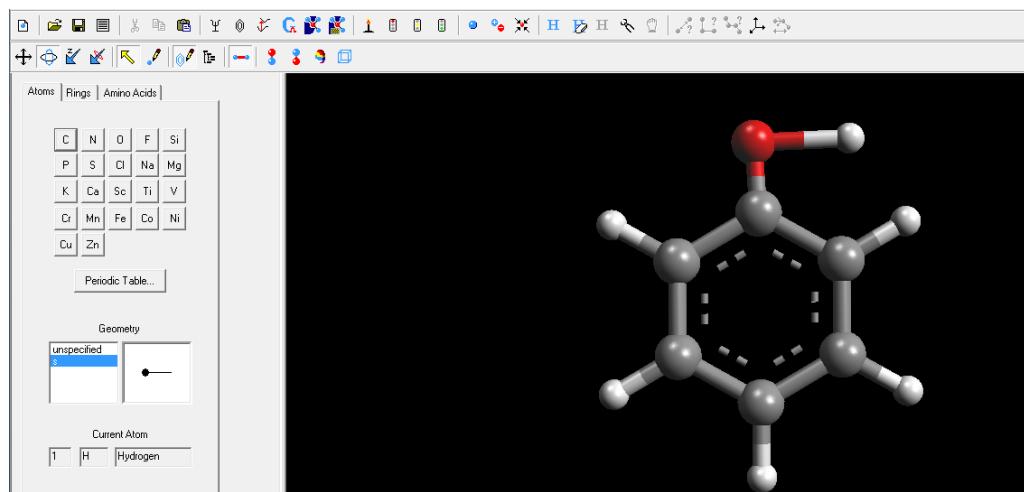
13) Selecione  na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela Periódica, e após clique no átomo de Hidrogênio opção S e clique em OK:



14) Para inserir a ligação entre o átomo de Oxigênio e o de Carbono: selecione  a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo Oxigênio e Carbono, a ligação é inserida:



15) Para inserir a ligação entre o átomo de Oxigênio e o de Hidrogênio: selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo Oxigênio e Hidrogênio, a ligação é inserida:



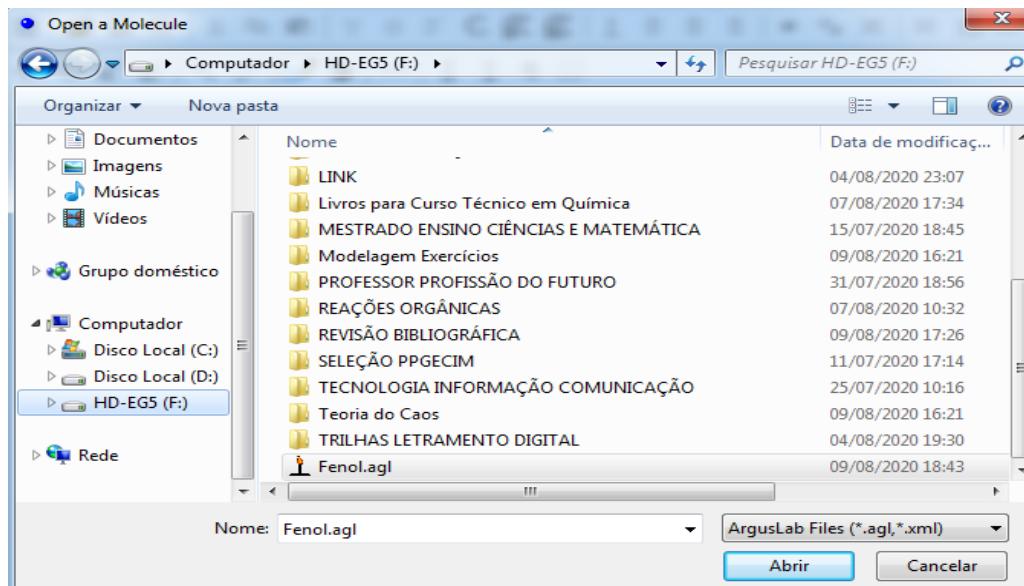
16) Feche o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save

As

17) Dê o nome para o arquivo de Fenol.agl

18) Escolha a pasta

19) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



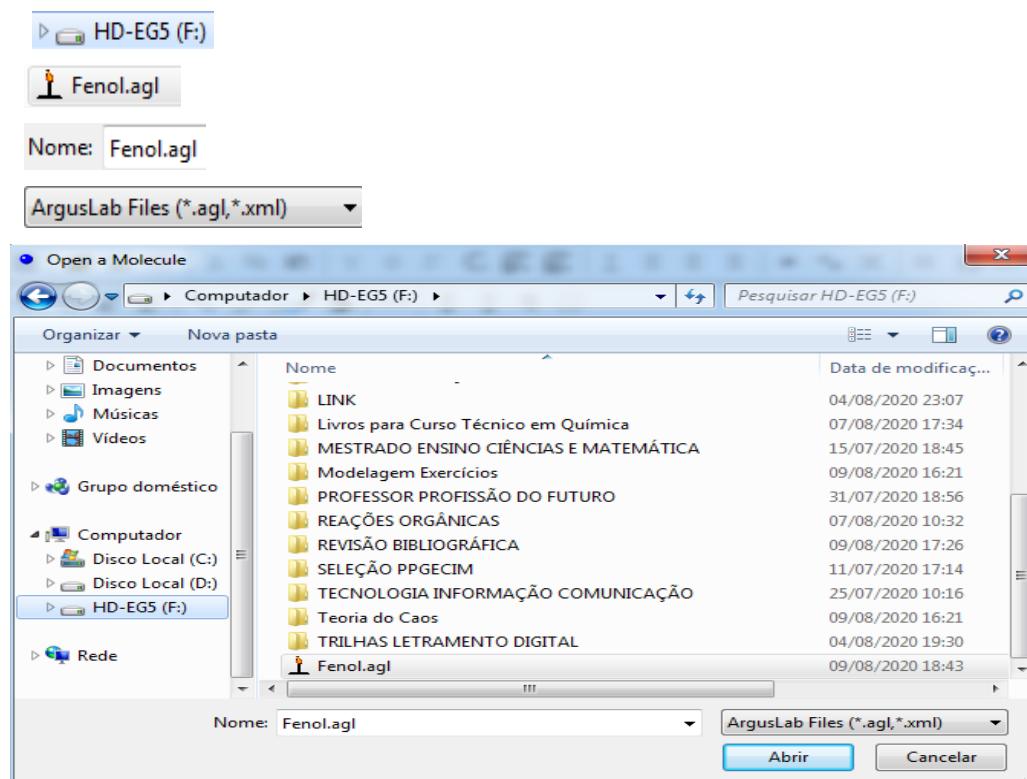
Nome: Fenol.agl

ArgusLab Files (*.agl, *.xml)

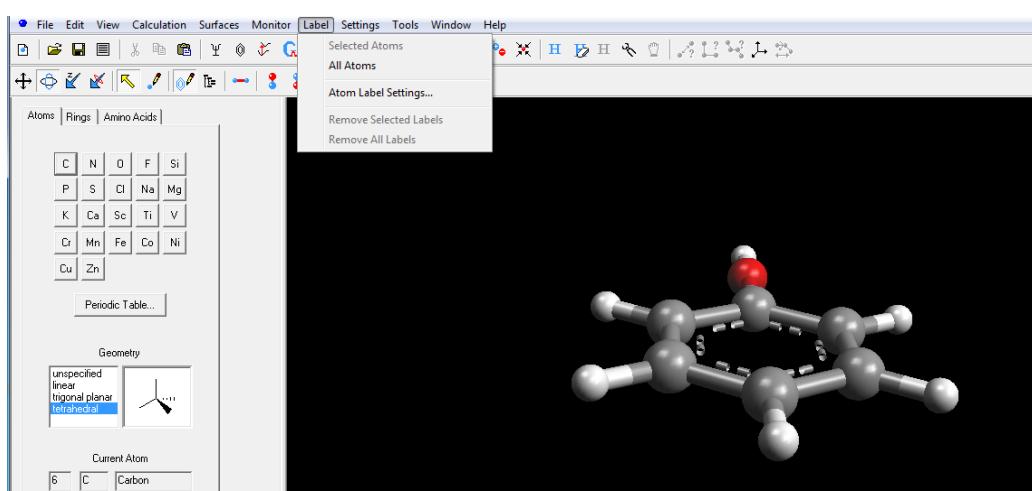
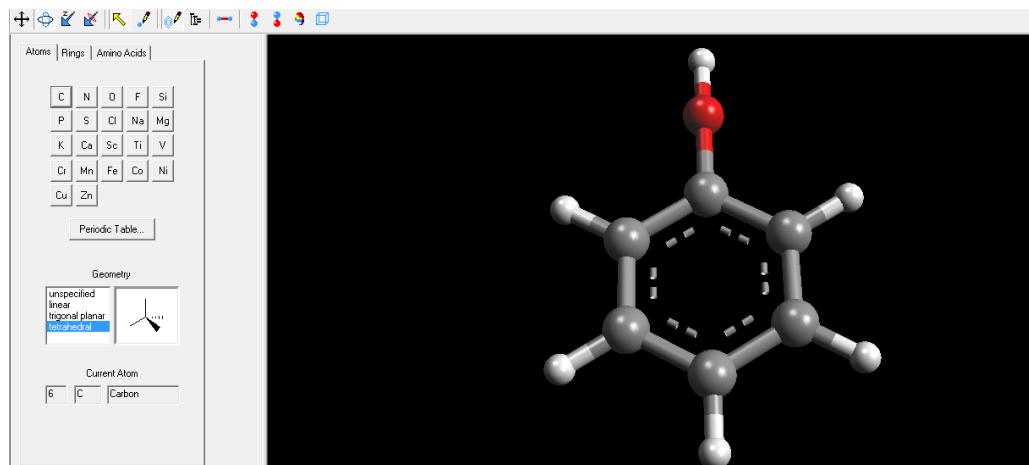
Exercício 2

Otimizar a Geometria da molécula do Fenol no Arguslab

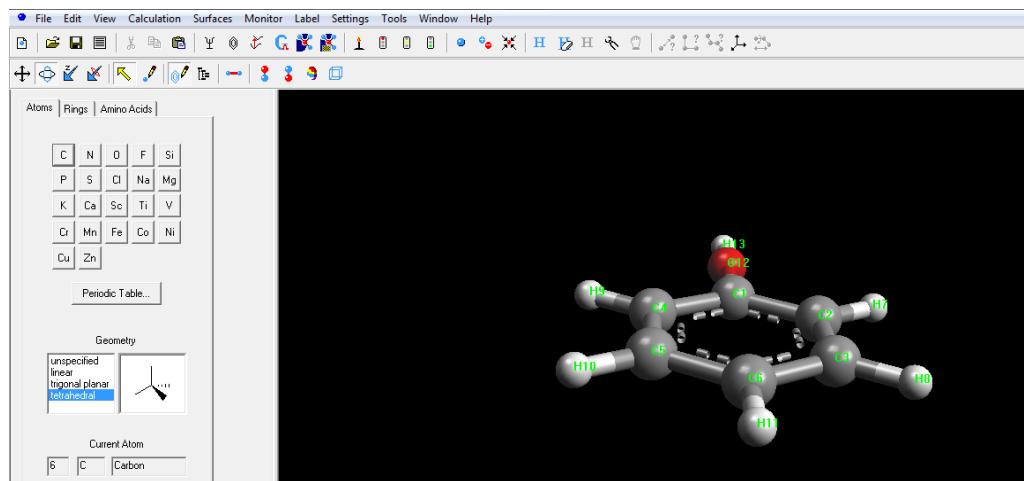
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



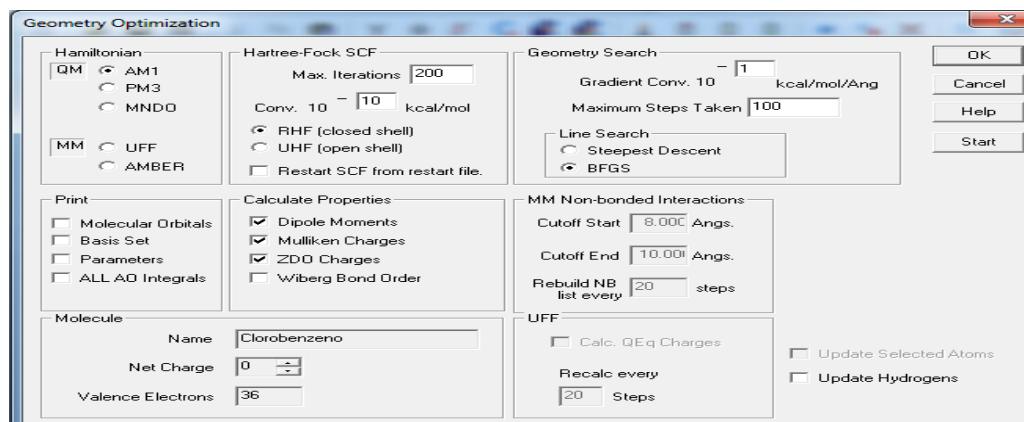
- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:



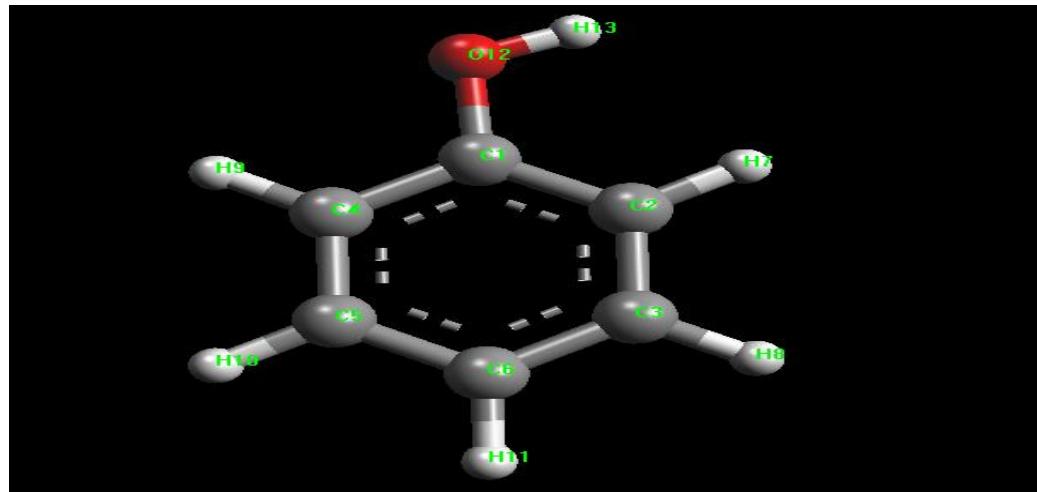
- 4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



- 5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



- 6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



- 7) Selecione a opção Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Fenol.out.txt.
- 8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção na Barra de Ferramentas:
- 9) Clique no botão Save na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

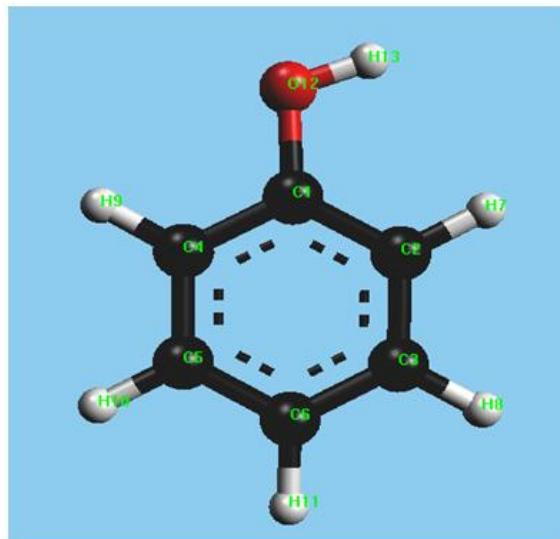
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Fenol

- 1) Abra o arquivo texto Fenol.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Mulliken, faça um Print Screen da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic charges

1	C	0.0728
2	C	-0.2720
3	C	-0.1503
4	C	-0.2108
5	C	-0.1586
6	C	-0.2260
7	H	0.1938
8	H	0.1940
9	H	0.2163
10	H	0.1961
11	H	0.1954
12	O	-0.3074
13	H	0.2568

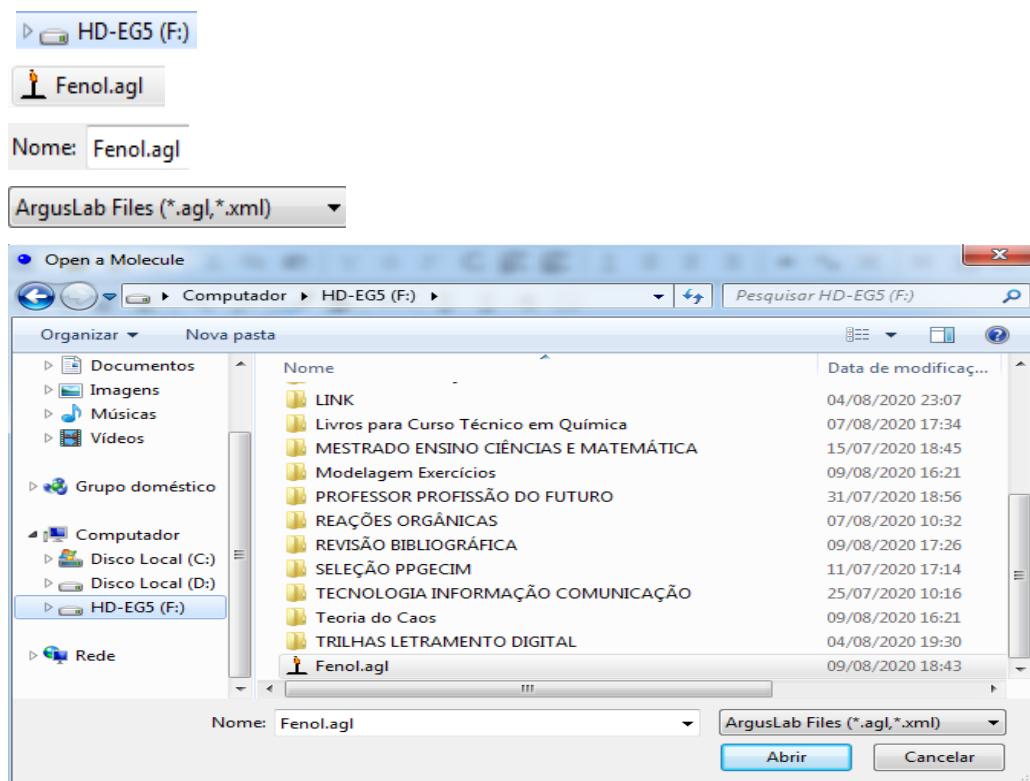
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



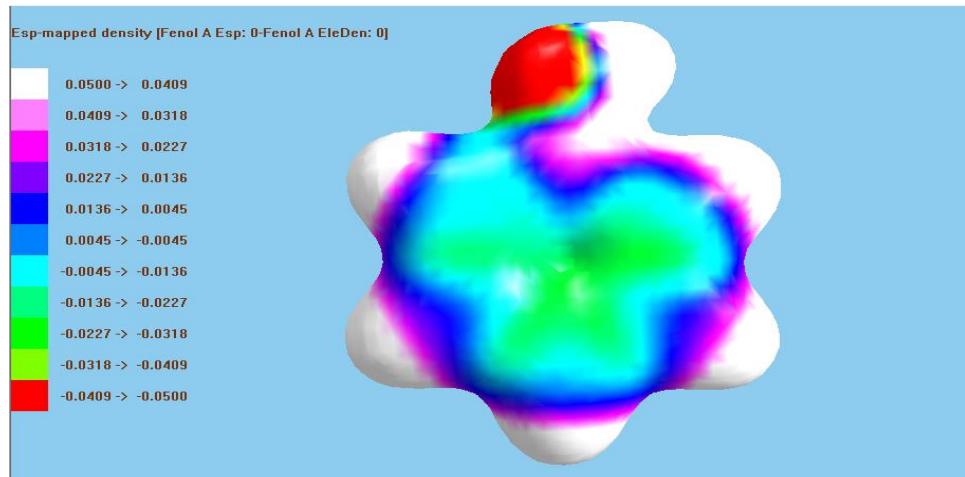
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Fenol no Arguslab

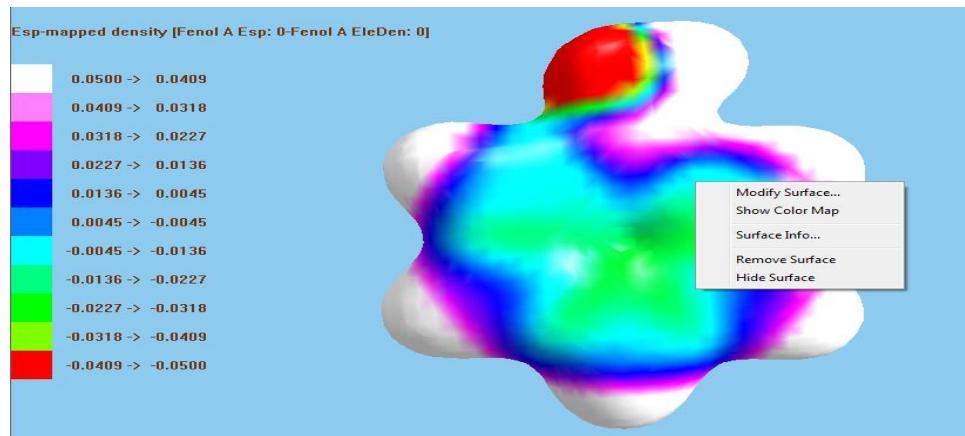
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



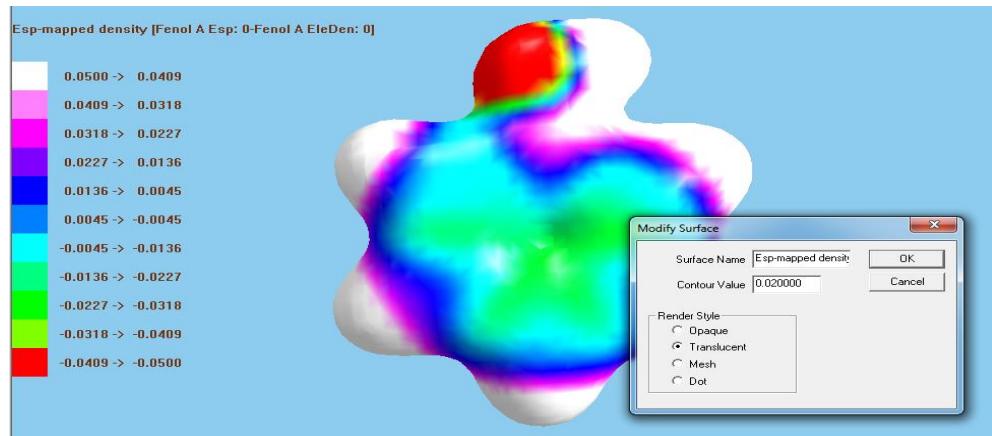
- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula do Fenol ficará com o seguinte aspecto:

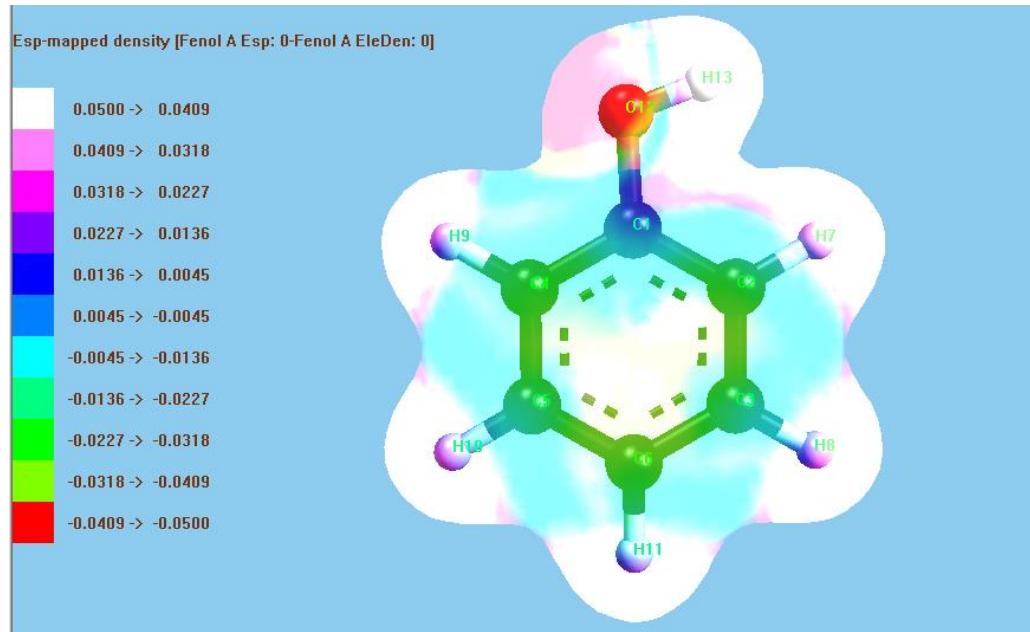


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:

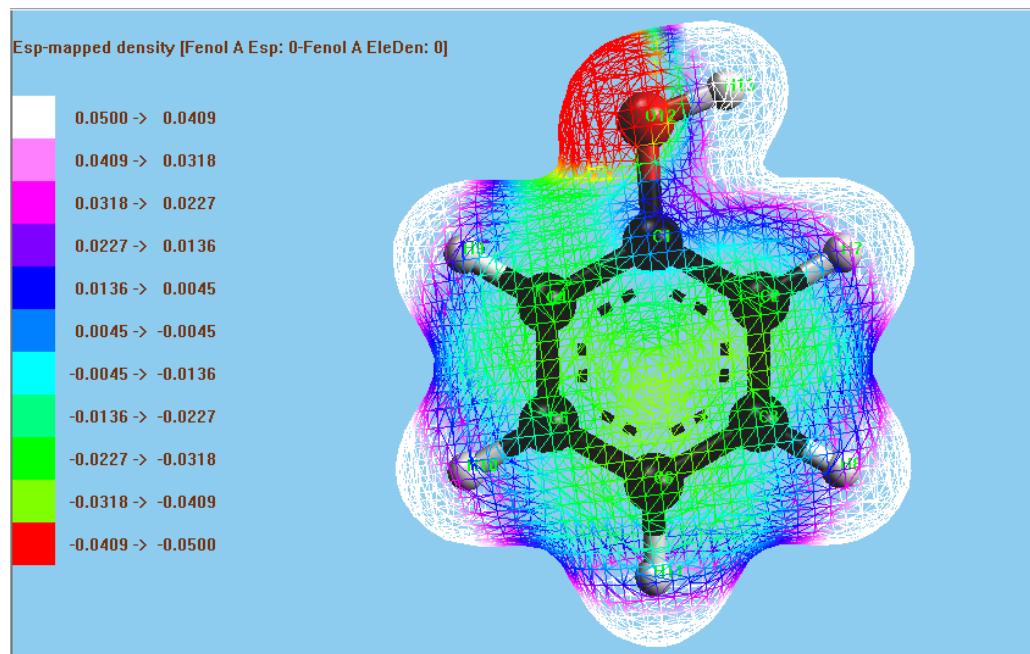


- 5) Altere o valor de contorno para 0.020000 e escolha a opção Translucent:





- 6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:
- 7) Selecione a opção Mesh:



- 8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE K - Construindo Molécula Nitrobenzeno no Arguslab 11



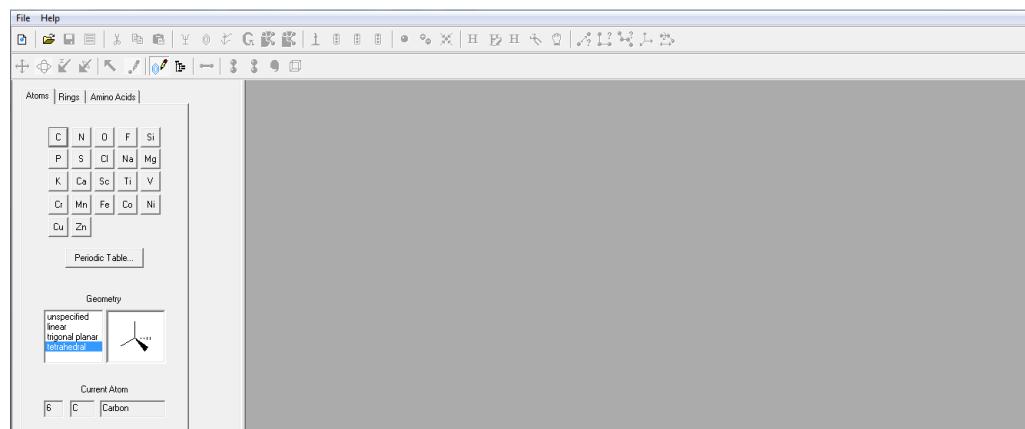
Exercício 1

Nome:

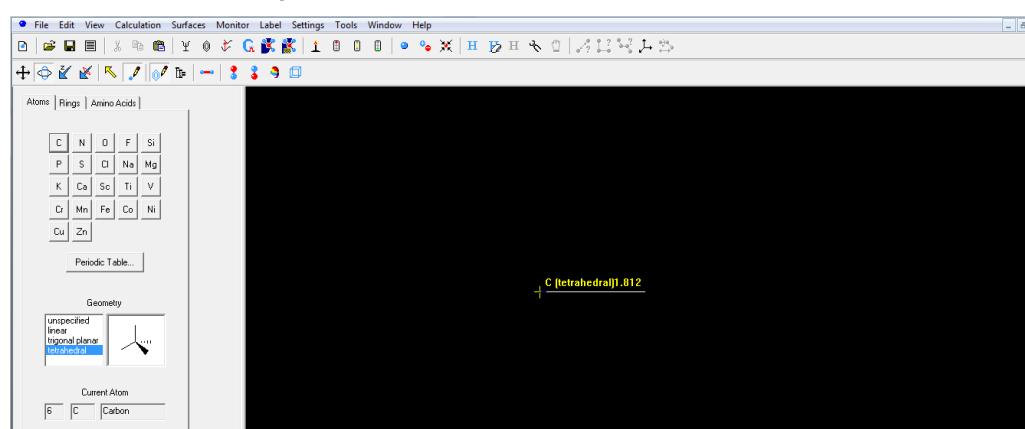
Data:

Construindo a molécula do Nitrobenzeno no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

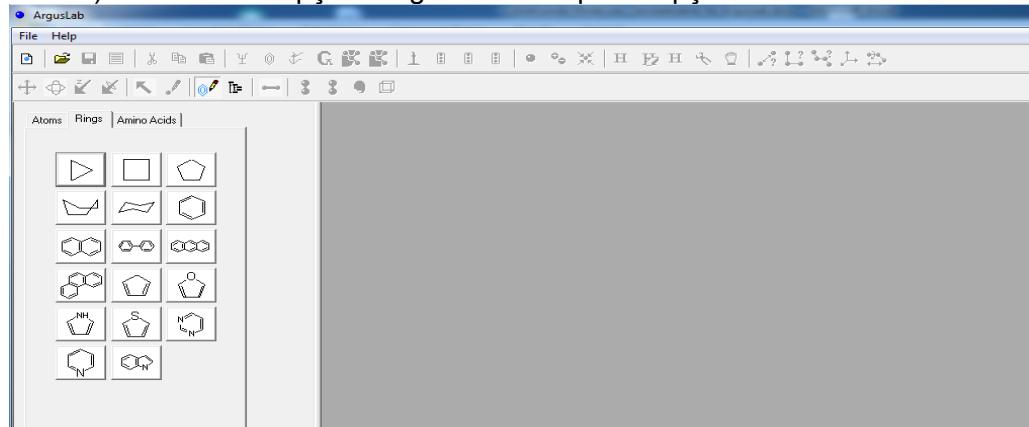


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

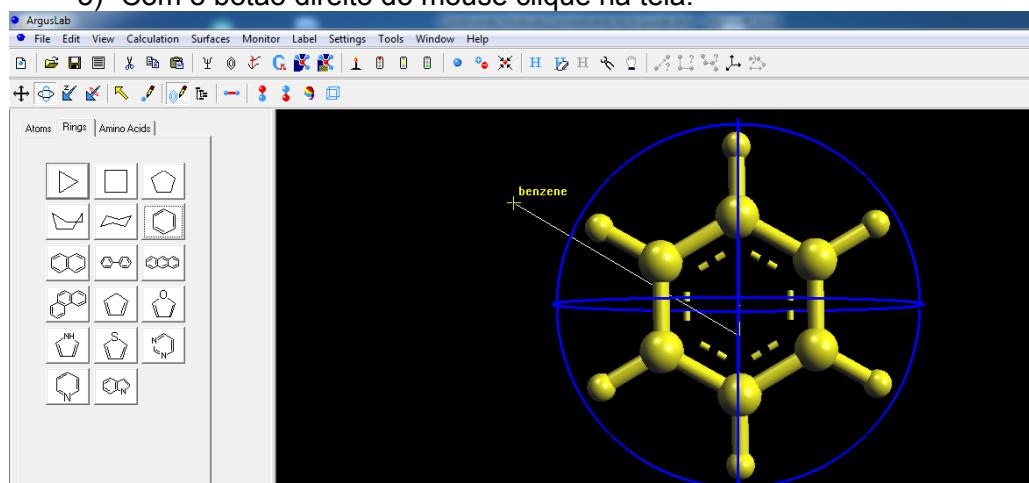


3) Clicar no botão na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

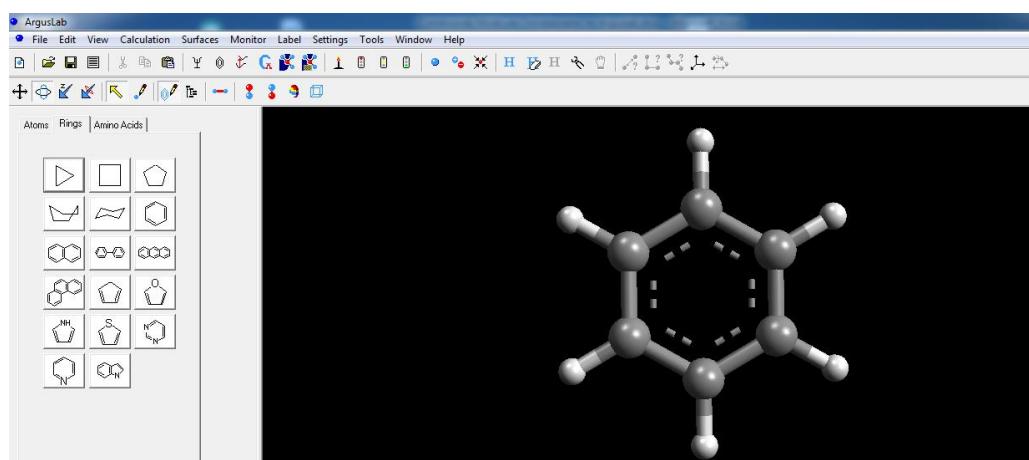
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



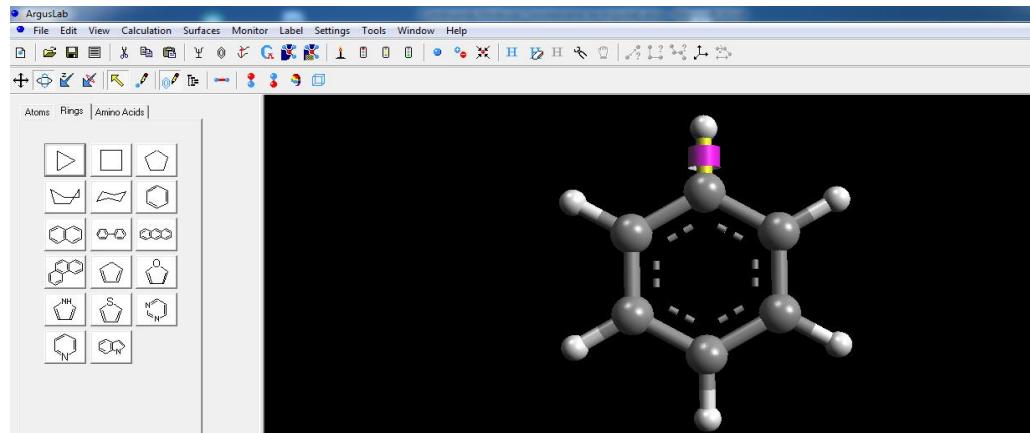
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



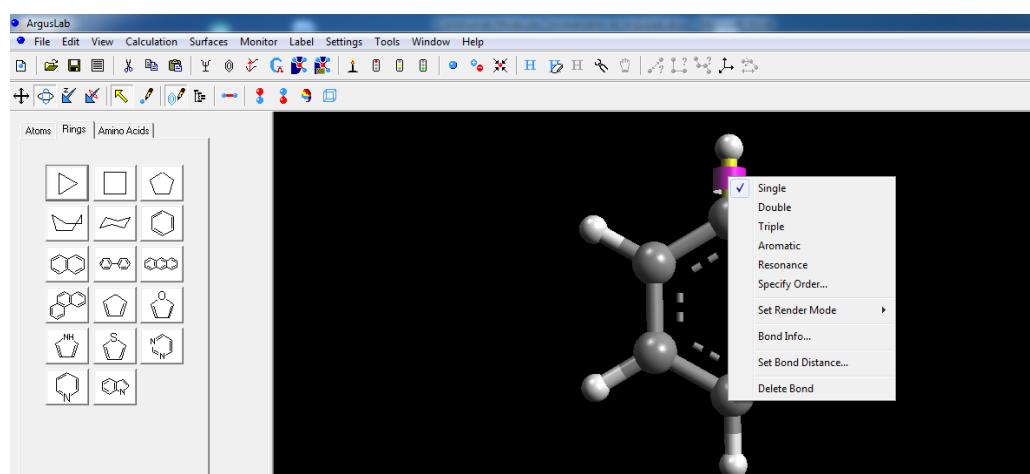
6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



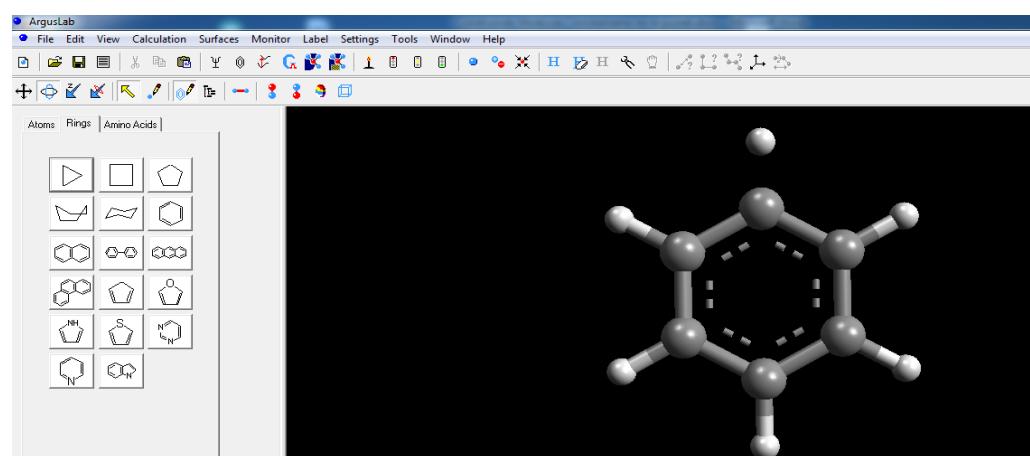
7) Com o botão esquerdo do mouse clique na ligação Carbono - Hidrogênio:



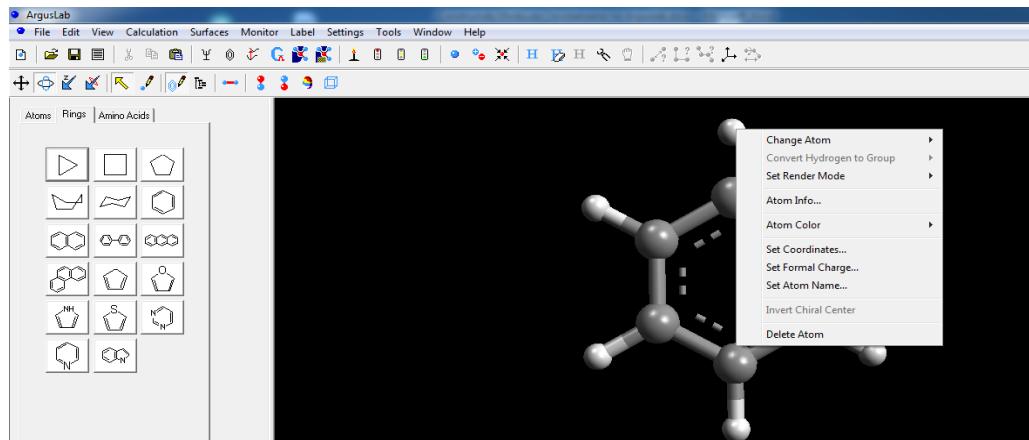
8) Clique com o botão direito do mouse sobre a ligação selecionada:



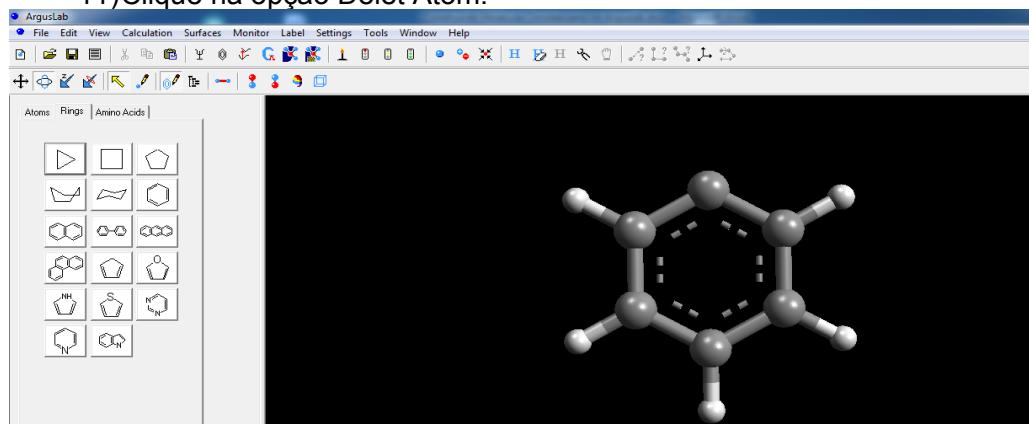
9) Clique na opção Delete Bond:



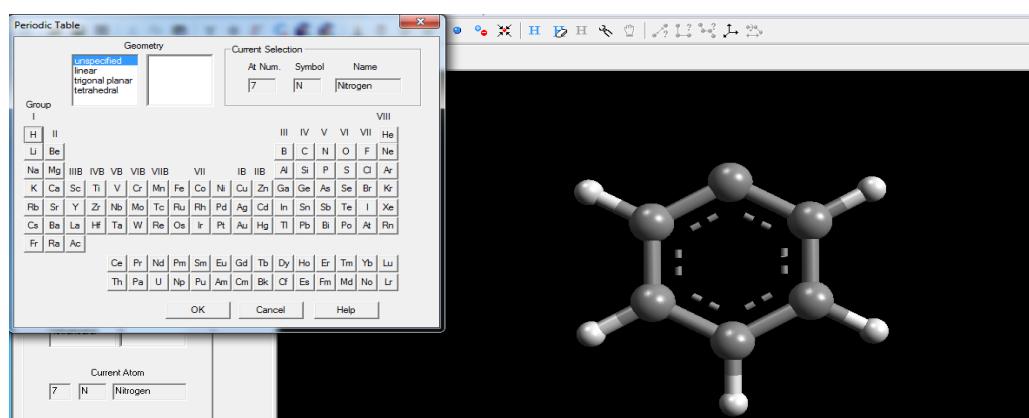
10) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo de Hidrogênio selecionado:



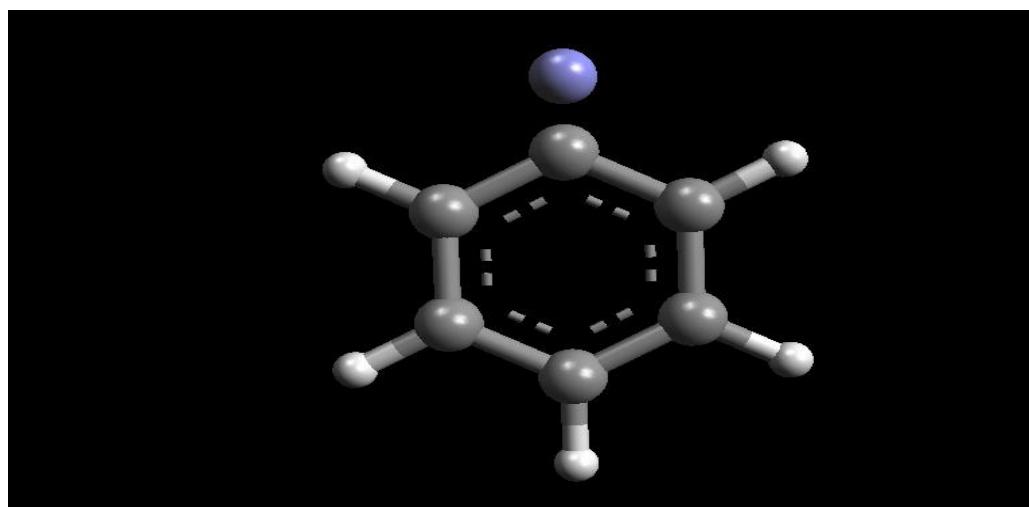
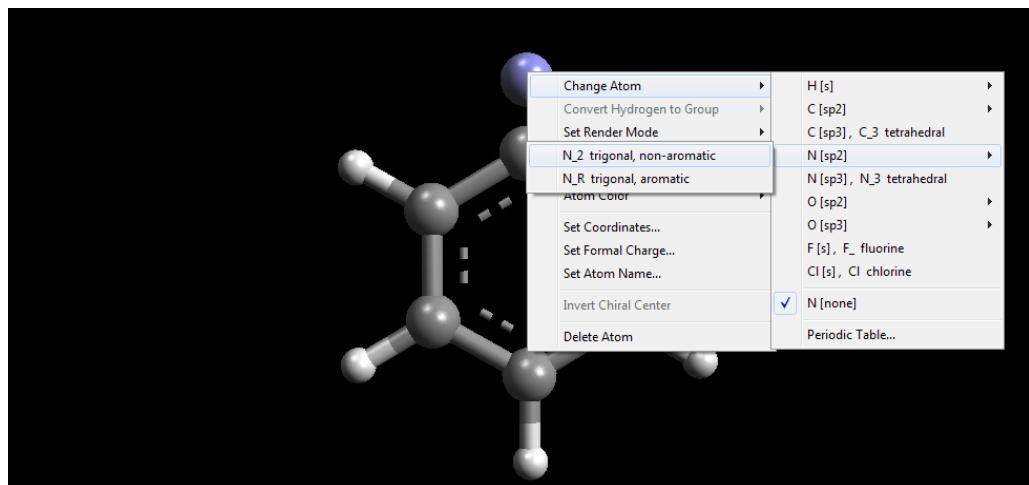
11) Clique na opção Delete Atom:



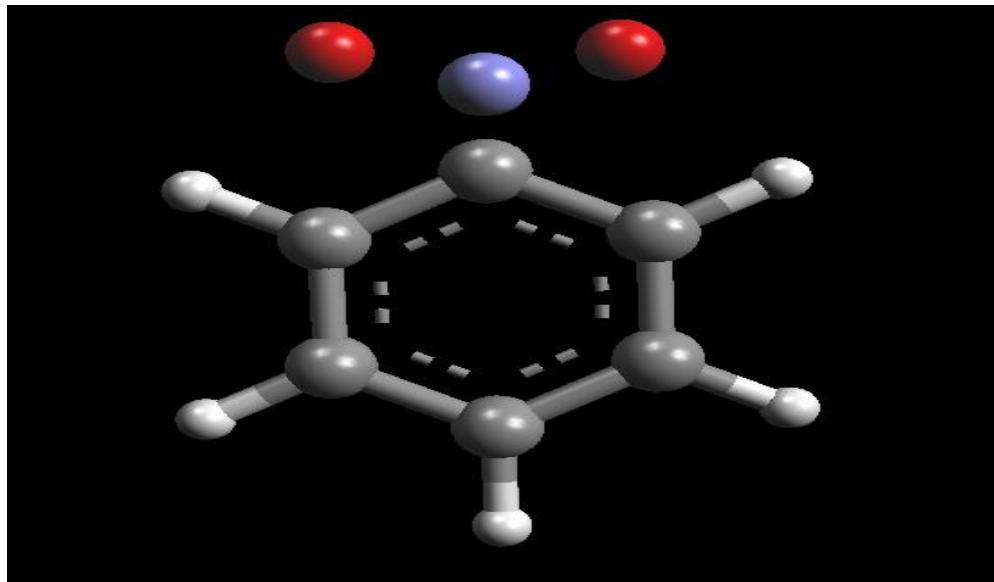
12) Selecione novamente na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela periódica, e após clique no átomo de Nitrogênio com a opção unspecified e clique em OK:



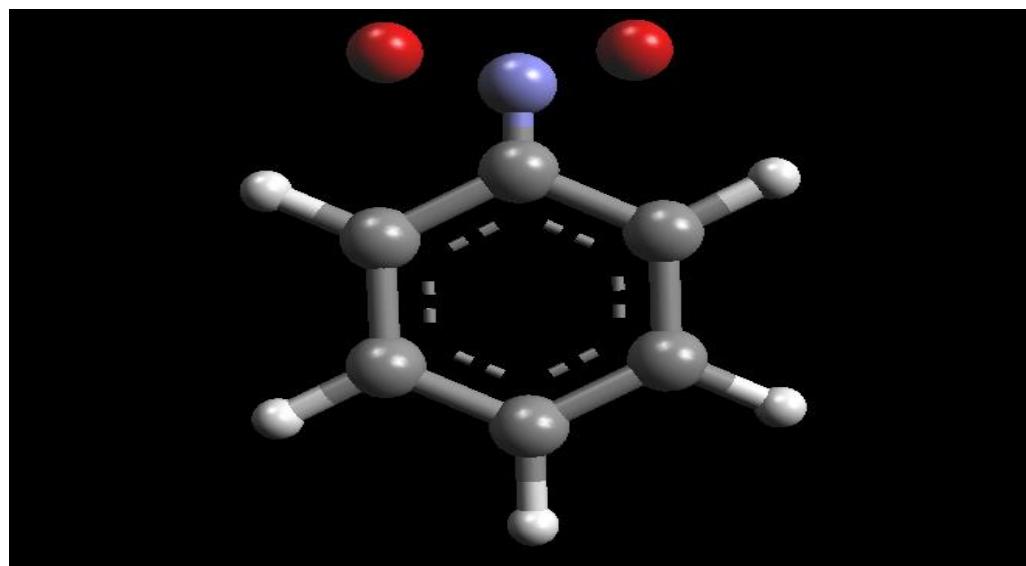
13) Com o botão direito do mouse clique no local do átomo de Hidrogênio que foi deletado. Ainda com o botão direito do mouse clique no átomo de Nitrogênio, escolha a opção Chang Atom, clique em N (sp²) e após clique em N₂ trigonal non-aromatic:



14) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas. Escolha a opção Tabela Periódica, clique no Átomo de Oxigênio, selecione a opção unspecified e clique em OK. Na tela dê dois cliques para inserir dois Oxigênios e formar o grupo nitro (NO²):

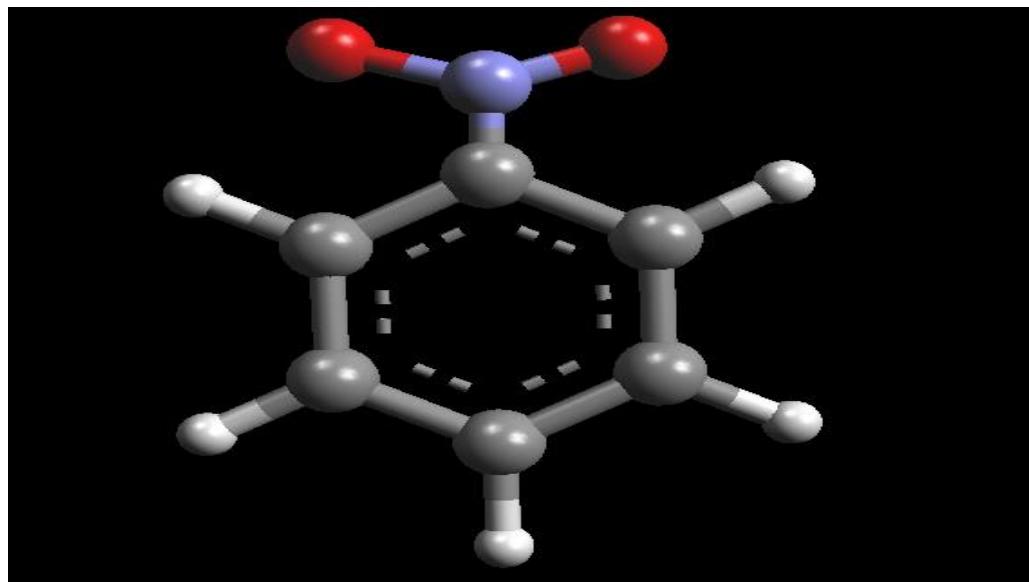


15) Para inserir a ligação entre o átomo de Nitrogênio e o Carbono: selecione a opção e clique na opção vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo de Nitrogênio e Carbono, a ligação é inserida:



16) Para inserir a ligação entre o átomo de Nitrogênio e os de Oxigênio:

selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo de Nitrogênio e Oxigênio, a ligação é inserida:

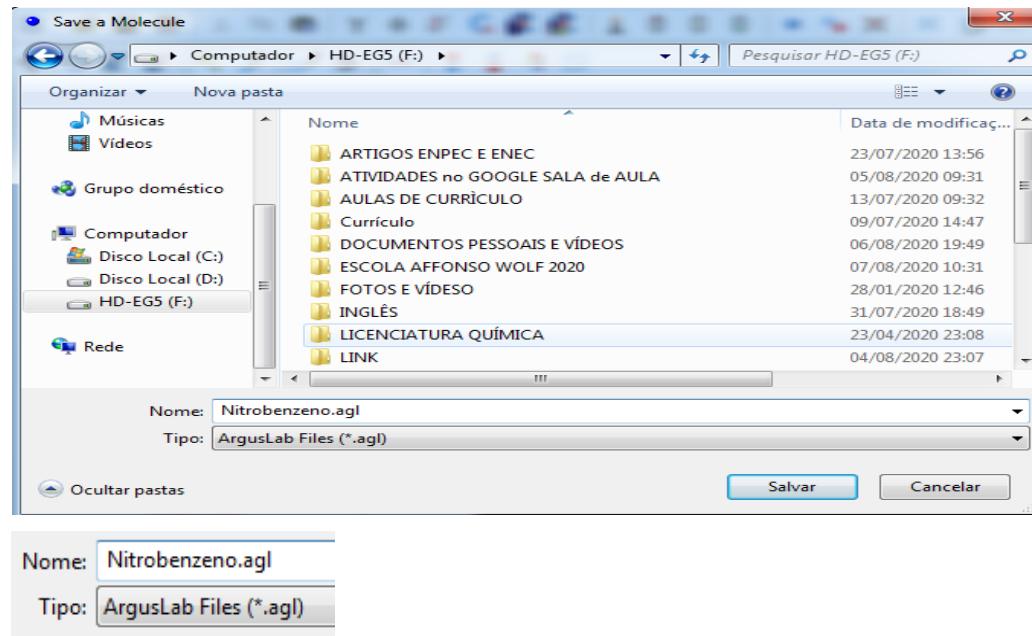


17) Feche o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save As

18) Dê o nome para o arquivo de Nitrobenzeno.agl

19) Escolha a pasta

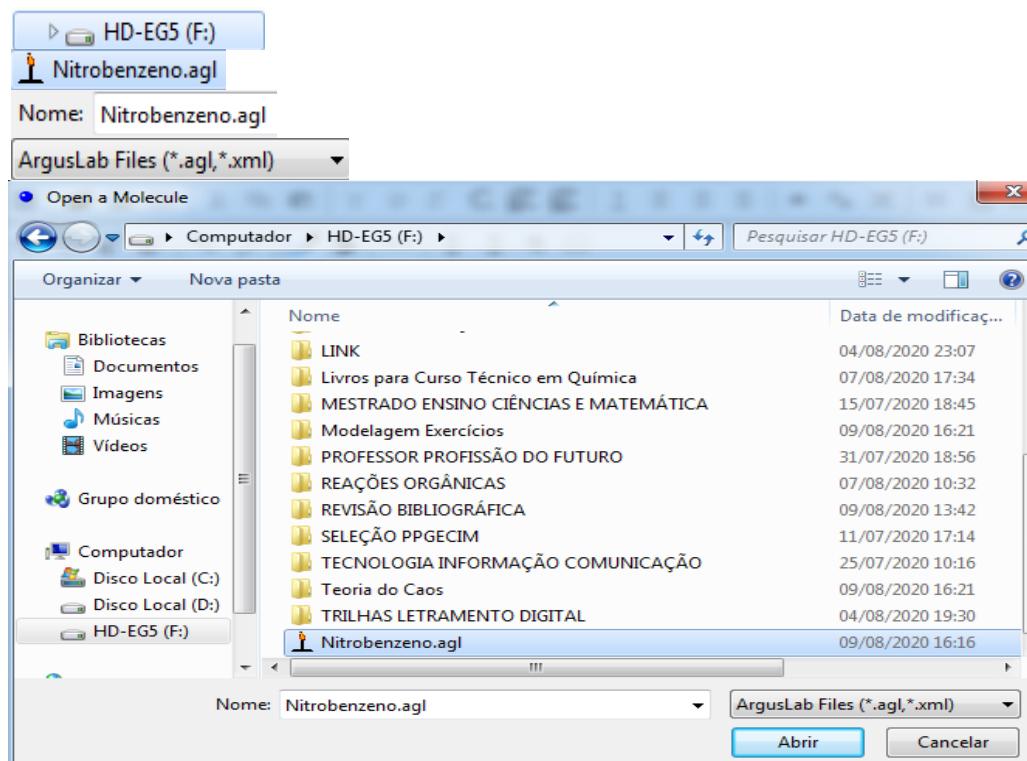
20) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



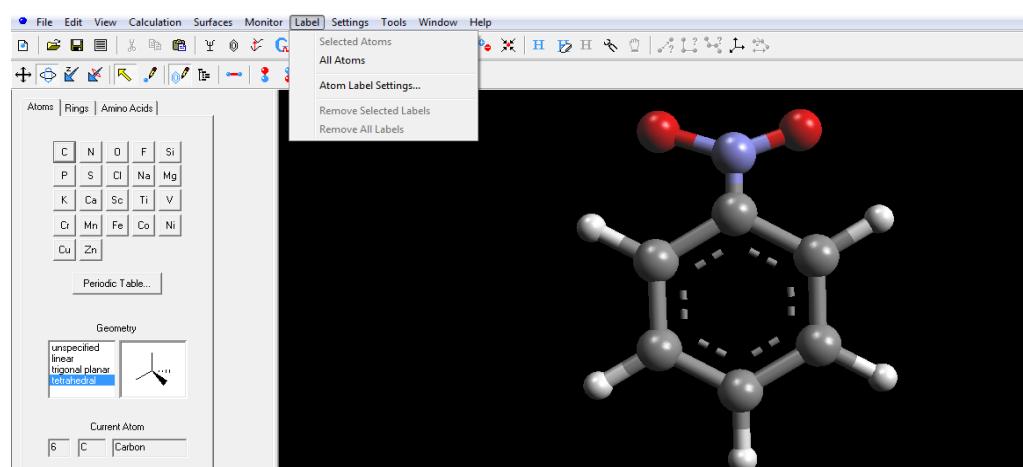
Exercício 2

Otimizar a Geometria da molécula do Nitrobenzenono Arguslab

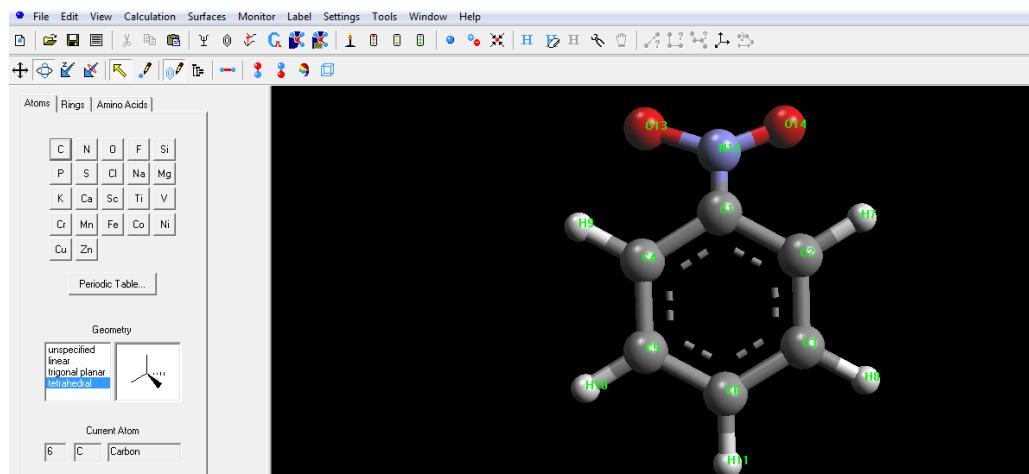
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



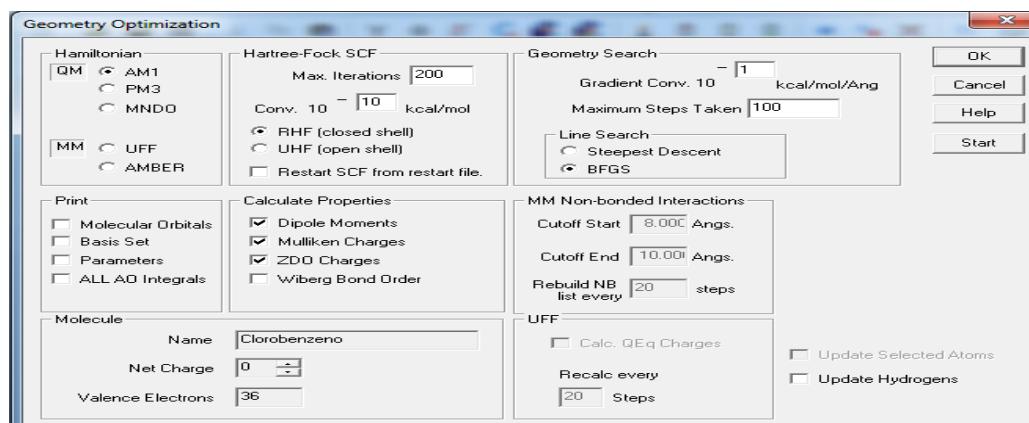
- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:



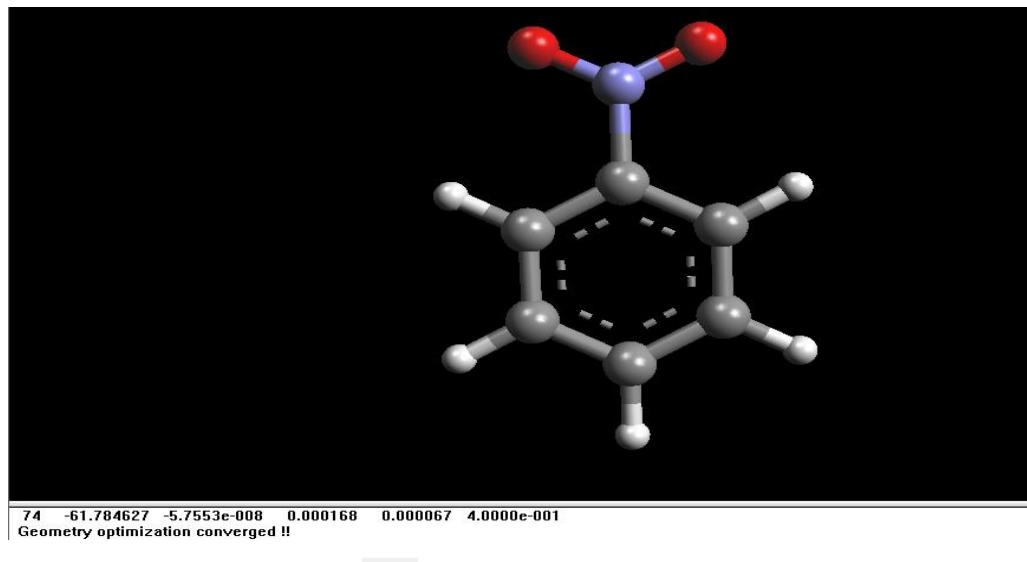
4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



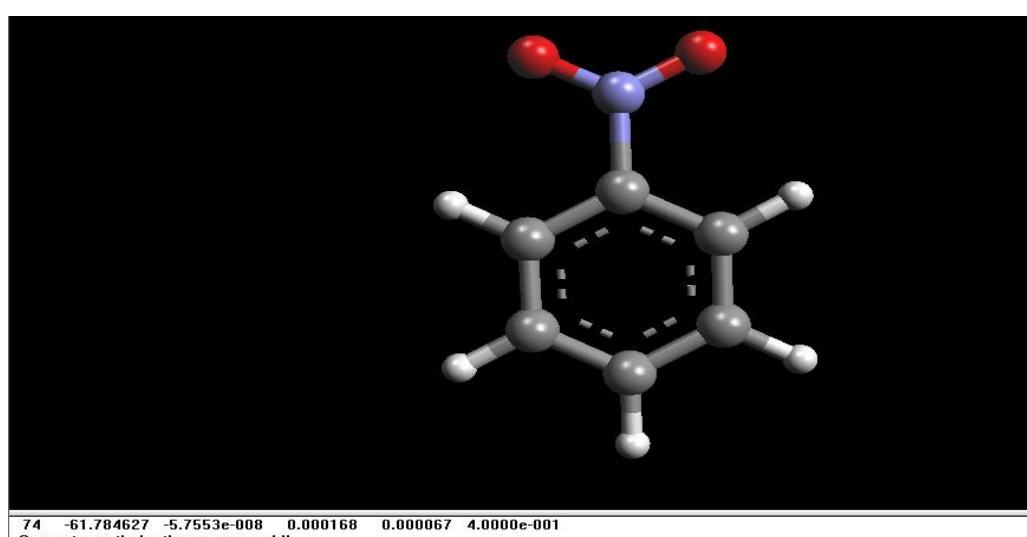
5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



- 7) Selecione a opção Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Nitrobenzeno.out.txt.
- 8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção na Barra de Ferramentas:



- 9) Clique no botão Save na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

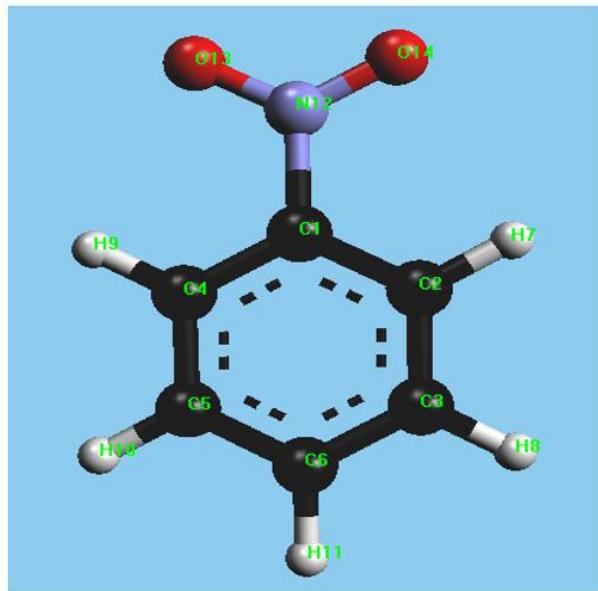
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Nitrobenzeno

- 1) Abra o arquivo texto Nitrobenzeno.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Mulliken, faça um Print Scren da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic Charges

1	C	-0.1256
2	C	-0.1255
3	C	-0.2033
4	C	-0.1255
5	C	-0.2033
6	C	-0.1532
7	H	0.2434
8	H	0.2147
9	H	0.2434
10	H	0.2147
11	H	0.2095
12	N	0.5122
13	O	-0.3508
14	O	-0.3508

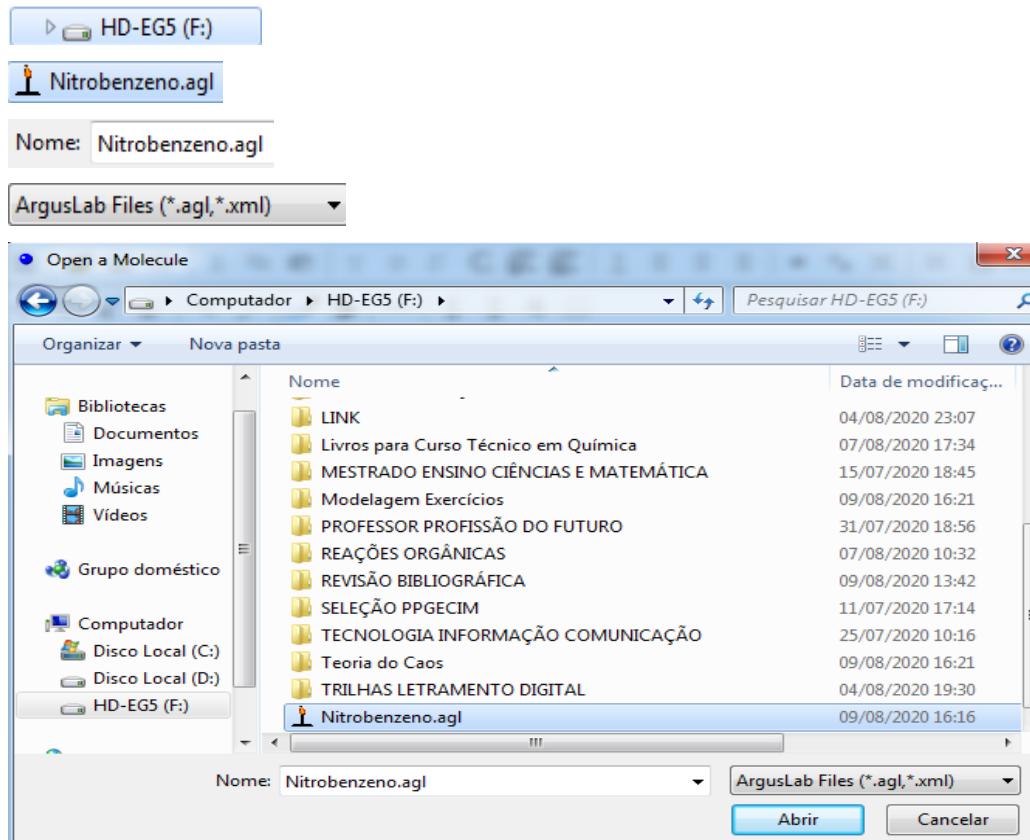
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



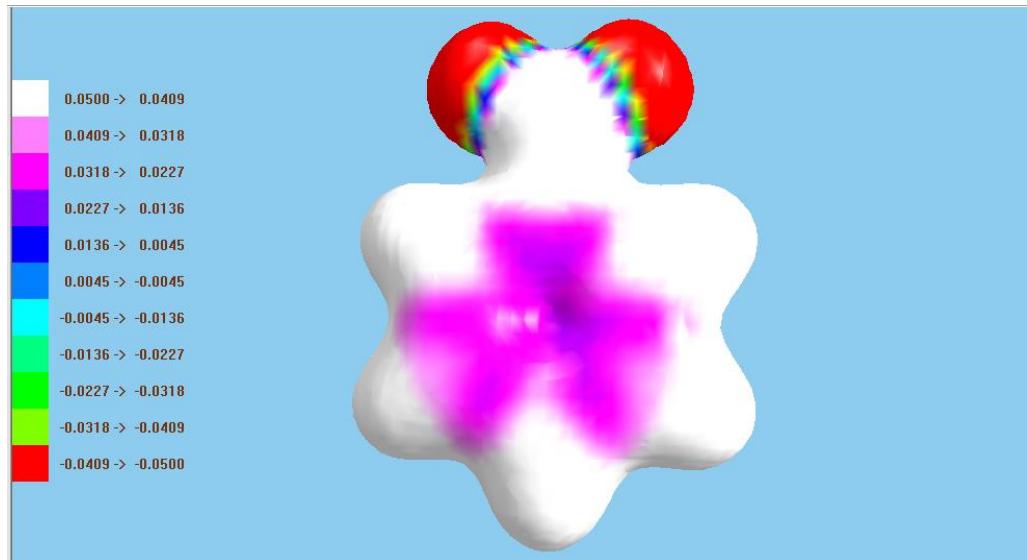
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Nitrobenzeno no Arguslab

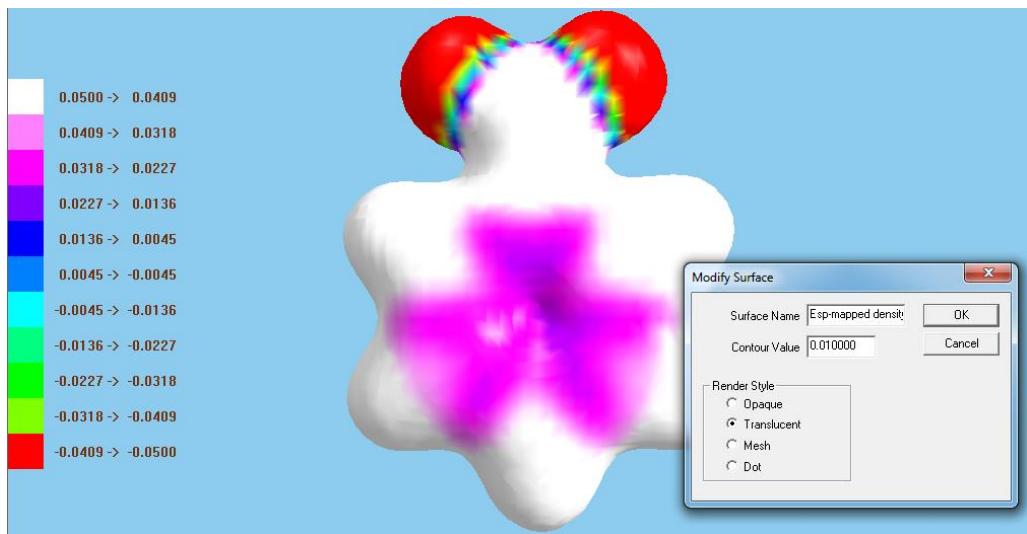
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

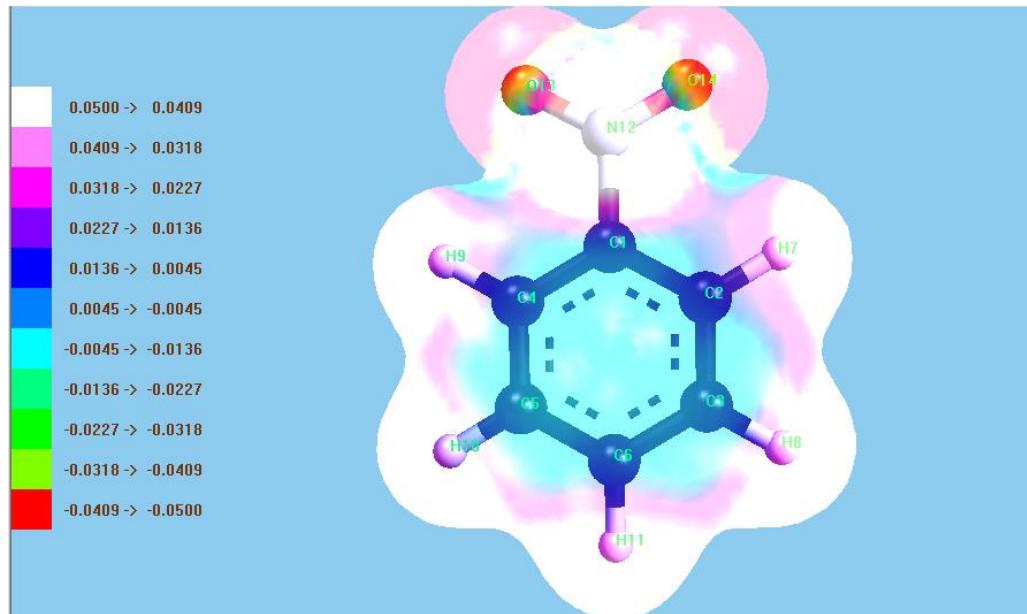


- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula de Nitrobenzenobenzeno ficará com o seguinte aspecto:

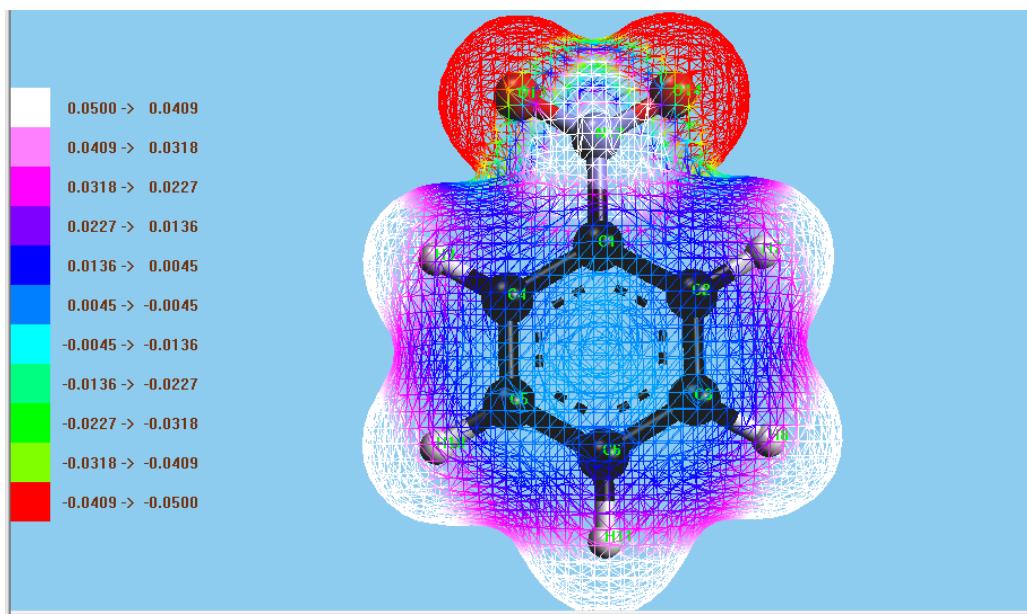


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:
- 5) Altere o valor de contorno para 0.010000 e escolha a opção Translucent:





- 6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:
- 7) Selecione a opção Mesh:



- 8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.