

## Artigo

## Termodinâmica: Uma Proposta de Ensino a partir da Química Computacional

Sá, E. R. A.;\* Nascimento, L. A; Lima, F. C. A.

Rev. Virtual Quim., 2020, 12 (3), 795-808. Data de publicação na Web: 29 de Maio de 2020

<http://rvq.s bq.org.br>

### Thermodynamics: A Teaching Proposal from Computational Chemistry

**Abstract:** The educational process has undergone major changes in recent decades, for example, through the use of tools that provide the visualization and reproduction of dynamic models. In this sense, simulation software and molecular modeling tools emerge with the purpose of developing conceptual understanding and minimizing the mechanical learning of students in Chemistry Teaching. This research seeks to promote a better understanding of concepts and calculations on the contents of Chemical Thermodynamics, addressed in the discipline of Physical Chemistry I of the Chemistry Degree course at the State University of Piauí. In this way, tutorials were produced and applied for the execution of molecular modeling software by students, in practical computational classes. The research method employed is a qualitative case study approach, and the data collection instruments used are subjective questionnaires and a five-point Likert scale. It can be seen that the use of these tools in teaching contributes to the deepening of thermodynamic knowledge, helps to establish a more realistic and symbolic view of the microscopic world, minimizes the mathematical limitations in obtaining calculations and improves students' interest and motivation for learning.

**Keywords:** Chemistry teaching; chemical thermodynamics; molecular modeling softwares; tutorials.

### Resumo

O processo educacional vem passando por grandes transformações nas últimas décadas, por exemplo, através da utilização de ferramentas que proporcionam a visualização e a reprodução de modelos dinâmicos. Neste sentido, os softwares de simulação e as ferramentas de modelagem molecular surgem com a finalidade de desenvolverem a compreensão conceitual e minimizarem o aprendizado mecânico dos estudantes no Ensino de Química. A presente pesquisa busca promover uma melhor compreensão de conceitos e cálculos sobre os conteúdos de Termodinâmica Química, abordados na disciplina de Físico-Química I do curso de Licenciatura em Química da Universidade Estadual do Piauí. Desta forma, foram produzidos e aplicados tutoriais para a execução dos softwares de modelagem molecular pelos estudantes, nas aulas práticas computacionais. O método de pesquisa empregado é uma abordagem qualitativa do tipo estudo de caso, e os instrumentos de coleta de dados utilizados são questionários subjetivos e escala do tipo Likert com cinco pontos. Pode-se perceber que o uso destas ferramentas no ensino contribui para o aprofundamento do conhecimento termodinâmico, ajudam a estabelecer uma visão mais realística e simbólica do mundo microscópico, minimizam as limitações matemáticas na obtenção dos cálculos e melhoram o interesse e a motivação dos estudantes pelo aprendizado.

**Palavras-chave:** Ensino de Química; termodinâmica química; softwares de modelagem molecular; tutoriais.

\* Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí, Campus Picos, Av Pedro Marques de Medeiros, s/n°, CEP 64605-500, Picos-PI, Brasil.

 [ezio.sa@ifpi.edu.br](mailto:ezio.sa@ifpi.edu.br)

DOI: [10.21577/1984-6835.20200062](https://doi.org/10.21577/1984-6835.20200062)

# Termodinâmica: Uma Proposta de Ensino a partir da Química Computacional

Ézio Raul A. de Sá,<sup>a,b,\*</sup> Lucas A. do Nascimento,<sup>b</sup> Francisco das Chagas A. Lima<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí, campus Picos, Av. Pedro Marques de Medeiros, s/n°, CEP 64605-500, Picos-PI, Brasil.

<sup>b</sup> Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Piauí, campus Universitário Ministro Petrônio Portella, Avenida Universitária, s/n°, CEP 64049-550, Teresina-PI, Brasil.

<sup>c</sup> Universidade Estadual do Piauí, Departamento de Química, campus Pirajá, R. João Cabral, s/n°, CEP 64002-150, Teresina-PI, Brasil.

\*[ezio.sa@ifpi.edu.br](mailto:ezio.sa@ifpi.edu.br)

*Recebido em 15 de Outubro de 2019. Aceito para publicação em 15 de Maio de 2020.*

## 1. Introdução

### 2. Estratégia Metodológica

2.1. Caracterização da pesquisa e coleta de dados

2.2. Natureza da pesquisa

2.3. Períodos de observação e aplicação das avaliações

2.4. Elaboração dos tutoriais

### 3. Resultados e Discussão

3.1. O uso dos tutoriais nas aulas práticas computacionais

3.2. A importância da visualização molecular

3.3. Cálculos termodinâmicos

### 4. Considerações Finais

## 1. Introdução

A educação vem passando por grandes mudanças em sua forma e conteúdo ao longo das últimas décadas, devido à introdução de uma série de novos fatores tecnológicos e comportamentais, em todo o cenário mundial. Muitas pesquisas estão sendo realizadas com o objetivo de adequar antigas técnicas de ensino às novas tecnologias e às recentes demandas surgidas nesse período.<sup>1</sup>

Dentro desse contexto, o uso da Química Computacional (QC) tem auxiliado na compreensão

dos conteúdos, como na aplicação a problemas de interesse industrial, contextualizando o Ensino de Química (EQ) e estimulando o interesse dos alunos em desenvolver atividades de pesquisa nessas áreas.<sup>2</sup>

Desta forma, o uso das simulações computacionais podem melhorar o entendimento dos estudantes em relação aos fenômenos químicos, nos seus níveis macroscópico (experimentos, observáveis e mensuráveis), microscópico (partículas, átomos, íons e moléculas), assim como simbólico, este representado por equações, coeficientes, gráficos, imagens e números.<sup>3</sup> Ao utilizar práticas computacionais em Química, o

aluno poderá observar e analisar certas situações difíceis de serem demonstradas em sala de aula, as quais são muitas vezes apenas teoricamente abordadas pelo professor, deixando a cargo dos discentes a difícil materialização do conteúdo.

As Diretrizes Curriculares Nacionais (DCNs) estabelecidas para os cursos de Licenciatura em Química (LC) recomendam que a formação docente do estudante proporcione o desenvolvimento de habilidades que o capacitem para a preparação e criação de recursos didáticos e instrucionais relativos à sua prática e avaliação da qualidade do material disponível no mercado, além de ser preparado para atuar como pesquisador e adquirir conhecimentos básicos do uso de computadores e as suas formas de aplicação no Ensino de Química.<sup>4</sup>

A termodinâmica faz parte da grade curricular dos cursos de graduação em Química, Física e Engenharias, sendo esta de grande importância para avaliar as capacidades de compreensão dos alunos em Físico-Química e os seus problemas através da aplicação dos princípios termodinâmicos no cotidiano, em termos de desenvolvimento industrial e humano.<sup>5</sup> O curso de Físico-Química, no qual os alunos veem conceitos avançados de termodinâmica e cinética, é considerado por muitos estudantes como um dos mais difíceis.<sup>6</sup>

Outro ponto relevante está relacionado às limitações matemáticas dos estudantes em solucionar as equações da Mecânica Quântica, em particular as relacionadas à equação de Schrödinger, fato esse característico desde o seu surgimento.<sup>7</sup> A aplicação e resolução de problemas termodinâmicos envolvendo essas equações, influenciam diretamente no desempenho dos alunos, pois muitos não conseguem utilizá-las ou compreendê-las, impossibilitando o aprendizado.

Até recentemente a inserção da QC nos cursos de graduação apresentava algumas dificuldades e limitações relacionadas aos softwares (programas) e hardwares (parte física) dos computadores. Porém, nos últimos anos ocorreram muitos avanços e aplicações nessa área, devido à grande disponibilidade de programas didáticos e à velocidade de processamento de dados, como mostram alguns trabalhos.<sup>8-16</sup> Nesse contexto, com a crescente utilização de técnicas computacionais em investigação química, é fundamental fornecer meios para a introdução efetiva de graduandos e professores nesta área, com a inserção de ferramentas computacionais no apoio e na melhoria da aprendizagem dos conteúdos.<sup>17</sup>

Assim, a utilização das ferramentas computacionais pode orientar o trabalho e criar condições de aprendizagem para os envolvidos no processo, através do desenvolvimento de atividades planejadas e estruturadas pelo professor, que deve assumir o papel de mediador entre o aluno e o computador. Para que o processo aconteça de forma significativa, é necessário que os docentes estejam aptos e qualificados o suficiente, a ponto de possuírem o domínio da tecnologia utilizada como suporte metodológico ou que estejam buscando qualificações em grupos de pesquisa na área de ensino voltados para profissionais da educação básica e/ou superior.<sup>2,18</sup>

Dentro deste contexto, o presente trabalho realiza um estudo de caso a partir da aplicação de tutoriais sobre o uso de softwares de modelagem molecular em aulas práticas computacionais, por graduandos do 5º (quinto) semestre do curso de Licenciatura em Química da Universidade Estadual do Piauí (UESPI), *campus* Poeta Torquato Neto, na cidade de Teresina, Piauí. Tem como finalidade, facilitar e melhorar a compreensão dos estudantes acerca dos conceitos e cálculos termodinâmicos presentes na disciplina de Físico-Química I (FQI).

## 2. Estratégia Metodológica

### 2.1. Caracterização da pesquisa e coleta de dados

A pesquisa foi realizada na Universidade Estadual do Piauí, *campus* Poeta Torquato Neto, localizado na Rua João Cabral, 2231, bairro Pirajá, zona Norte de Teresina - PI. O universo da pesquisa é composto por 14 (quatorze) alunos do curso de LQ, matriculados no quinto período, e que cursam a disciplina de FQI em dois turnos. As turmas possuíam aulas em horários diferentes, sendo uma no turno matutino, com a participação de 10 (dez) alunos, e outra no turno vespertino, com a participação de 04 (quatro) alunos, os quais se fizeram presentes em todas as etapas da pesquisa.

Após a aprovação e autorização do projeto de pesquisa pelo Comitê de Ética em Pesquisa (CEP) da UESPI, e o respectivo cadastro na Plataforma Brasil, sob nº 49617315.3.0000.5209, realizou-se as reuniões periódicas com as turmas para o esclarecimento das etapas e do período de execução da pesquisa. A partir disso, iniciou-se o período de observação das turmas ao longo do

semestre letivo, sendo possível a aplicação de 03 (três) práticas computacionais.

Os estudantes voluntários participantes da pesquisa concordaram em assinar o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE) como critério de inclusão, e como critério de exclusão, optou-se pela eliminação dos sujeitos que não participassem de todas as etapas da pesquisa. Antes de cada aula prática, aplicou-se uma Avaliação Diagnóstica (AD) com os estudantes. As avaliações tiveram como objetivo verificar o nível de conhecimento acerca dos conteúdos abordados e adequar os tutoriais de acordo com as limitações dos estudantes em relação aos conteúdos termodinâmicos.

As aulas práticas foram executadas, no laboratório de informática da instituição, com o auxílio dos computadores que possuíam os softwares (GuassView 5.0 e o Gaussian 09W)<sup>19</sup> instalados e disponíveis para o uso dos graduandos. A aplicação se deu com o auxílio dos tutoriais e da coleta de dados por meio dos questionários subjetivos e da escala do tipo LIKERT<sup>20</sup> com cinco pontos (concordo totalmente, concordo, indiferente, discordo e discordo totalmente). O motivo para o uso dessa escala de opinião é por nos permite mensurar as atitudes e conhecer o grau de concordância do entrevistado a respeito das afirmações propostas.<sup>20</sup> Nos questionários, as falas dos estudantes foram selecionadas através de sorteio, sendo identificadas por letras maiúsculas e numeradas, com o propósito de resguardar a identidade do participante.

Para a efetivação dos cálculos termodinâmicos, aplicou-se o método computacional *ab initio* (Hartree Fock)<sup>21-23</sup> e o conjunto de base 3-21G<sup>24</sup> (função de base de Pople), com a finalidade de ilustrar rapidamente a execução, a obtenção e a análise dos resultados. Anteriormente a cada prática, abordou-se os conceitos e aplicações das ferramentas e dos métodos computacionais, visto que os estudantes não tinham conhecimentos a respeito.

Na execução das práticas computacionais, utilizou-se 14 (quatorze) computadores *desktop* com processadores *Intel(R) Core(TM) i5-4590T CPU @ 2.00 GHz, 8,00 GB* de memória RAM com interface *Windows 7 professional* para a obtenção das propriedades termodinâmicas das moléculas.

## 2.2 Natureza da Pesquisa

O procedimento investigativo é norteado por meio de uma abordagem qualitativa, do

tipo estudo de caso, e quantitativa, de natureza interpretativa e discursiva, com manipulação e controle de variáveis, o qual privilegia de modo geral, a análise construtivista.

Assim, na educação científica, a concepção construtivista defende a integral participação do aprendiz no processo, pois ele é visto como o construtor, o responsável pelo seu próprio conhecimento, o formulador de representações e opiniões, dentro do meio social em que está inserido, utilizando-as na interpretação das novas situações e na orientação das próximas ações.<sup>25</sup> Como metodologia de ensino, esse método leva em consideração a bagagem de conhecimento do aprendiz, o seu compromisso com a própria aprendizagem, a responsabilidade por um ensino significativo e a valorização da aprendizagem em grupos através das interações e investigações entre os membros.<sup>26</sup>

Dessa forma, a finalidade de um estudo de caso é reunir informações detalhadas e sistemáticas sobre um fenômeno, consistindo em uma metodologia que enfatiza compreensões contextuais, sem esquecer-se da representatividade, centrando-se no entendimento dinâmico do contexto real e envolvendo-se num estudo intenso e exaustivo de um ou poucos objetos, de maneira que permita um conhecimento detalhado.<sup>27-31</sup>

## 2.3 Períodos de observação e aplicação das avaliações

O período de observação das aulas da disciplina de FQI (Figura 1) iniciou-se após a assinatura do TCLE e finalizou com o término da disciplina, de acordo com o semestre letivo, sendo possível observar a desenvoltura, a metodologia, o interesse e a motivação dos alunos e dos professores.

Com a finalidade de mapear as dificuldades e as limitações enfrentadas pelos estudantes com os conteúdos de Termodinâmica Química (TQ), aplicaram-se ADs (Figura 2), que abordaram questões objetivas e subjetivas sobre os conteúdos de ligações químicas, geometria molecular, leis da TQ, softwares de modelagem molecular e métodos computacionais. Colaborando, assim, para a construção dos tutoriais na execução das aulas práticas computacionais.

Na Tabela 1 são apresentados os objetivos das avaliações diagnósticas aplicadas aos estudantes no decorrer da pesquisa.



**Figura 1.** Observação das aulas teóricas da disciplina de FQI



**Figura 2.** Aplicação das avaliações diagnósticas

**Tabela 1.** Objetivos das avaliações diagnósticas

Avaliações Diagnósticas	Objetivos
AD1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Observar se os estudantes têm conhecimento sobre o uso de softwares de modelagem molecular no EQ, assim como acerca dos conteúdos de ligações químicas e geometria molecular.</li> </ul>
AD2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Verificar o nível de compreensão a respeito dos conteúdos de TQ (calor, trabalho, energia interna, capacidade calorífica, entalpia, etc.), além de conhecimentos sobre os métodos quânticos computacionais e as extensões usadas para os arquivos.</li> </ul>
AD3	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Analisar o entendimento sobre os cálculos das variações de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs para reações químicas, e investigar quais são os métodos computacionais mais utilizados.</li> </ul>

#### 2.4 Elaboração dos tutoriais

Os tutoriais são desenvolvidos e aplicados com o intuito de facilitar a sequência de execução das ferramentas dos programas durante a aprendizagem dos discentes. A produção dos

tutoriais aconteceu, de acordo com as dificuldades observadas, no decorrer das aulas teóricas e dos relatos dos estudantes através das ADs.

Produziram-se 03 (três) tutoriais no formato de textos em tópicos, abordando detalhadamente todos os passos a serem seguidos para o

desenvolvimento das tarefas, como pode ser observado a seguir:

**TUTORIAL 1 (T1)** – Aplica as funcionalidades do software de modelagem molecular GaussView 5.0, levando-se em conta que os estudantes não têm habilidades ou desconhecem as ferramentas. Neste tutorial, são abordadas todas as funções da barra de menus (Figura 1S) e da barra de ferramentas (Figura 2S), os modos de construção e de visualização das moléculas, as otimizações das estruturas, as propriedades moleculares e as opções de como salvar os arquivos de entrada. Ao final, mostra-se como ter acesso aos arquivos salvos e como fechar as janelas do programa;

**TUTORIAL 2 (T2)** – Aborda como obter as propriedades termodinâmicas das moléculas, sendo estas inicialmente construídas no T1, a partir da Tabela 1S. Em seguida, são submetidas aos cálculos quânticos no software Gaussian 09W (Figura 3S). Este tutorial mostra como realizar os cálculos para a obtenção da energia térmica interna, energia vibracional no ponto zero, capacidade calorífica a volume constante ( $C_v$ ), entalpias e energias cinética translacional, rotacional e vibracional das moléculas em diferentes temperaturas (Tabelas 2S, 3S, 4S e Figura 4S). Com os resultados, é possível visualizar todos os valores das frequências e os modos vibracionais das moléculas (Figura 5S), mostrando as animações ocasionadas por cada modo. A partir desses dados, pôde-se obter teoricamente os espectros de Infravermelho (IV) e Raman do composto, compará-los com os dados experimentais e visualizar as geometrias intermediárias do composto, desde a de maior energia potencial (menos estável) até a de menor energia potencial (mais estável), podendo salvá-los e exportá-los para outros programas, de acordo com as extensões disponíveis para a construção de tabelas, histogramas e gráficos;

**TUTORIAL 3 (T3)** – Demonstra o passo a passo para a obtenção e análise dos dados termodinâmicos para moléculas em reações químicas, utilizando o pacote computacional Gaussian 09W. Neste tutorial, são fornecidas algumas substâncias com nomes, fórmulas moleculares e modelos paus e bolas (*ball and sticks*) construídas pelo software GaussView 5.0 (Tabela 5S). Em seguida, o arquivo de entrada (*input*) é submetido aos cálculos (Figura 6S) para ser gerado um arquivo de saída (*output*) com os valores de entalpias (H), entropias (S) e energias livres de Gibbs (G) para cada sistema (Tabela 6S). Com isso, podem-se calcular as variações de entalpia ( $\Delta H$ ), entropia ( $\Delta S$ ) e energia livre de Gibbs

( $\Delta G$ ), levando-se em consideração os coeficientes estequiométricos balanceados na equação, para a reação de combustão do metano, e confrontá-lo com o valor experimental definido (Tabela 7S). Também são analisados os valores de entalpia e entropia durante a variação da temperatura (Figura 7S e Tabela 8S), sendo os valores de entropias comparados para diferentes substâncias no estado sólido, líquido e gasoso (Tabela 9S).

### 3. Resultados e Discussão

Este trabalho apresenta uma descrição detalhada para a construção dos tutoriais e sua aplicação aos softwares de modelagem molecular, buscando atender aos objetivos propostos pela disciplina de FQI, facilitando o acesso aos conhecimentos da área pelos estudantes, abordando conceitos e cálculos utilizados na TQ, a partir das ferramentas propostas pela QC.

#### 3.1. O uso dos tutoriais nas aulas práticas computacionais

A produção dos tutoriais, a partir das observações e ADs realizadas em sala de aula, durante a disciplina de FQI, aborda os principais problemas enfrentados pelos alunos nos conteúdos de TQ. Através do diagnóstico, percebeu-se que os graduandos sentem muitas dificuldades na obtenção e compreensão dos cálculos das propriedades termodinâmicas como entalpia, capacidade calorífica (C), entropia e energia livre de Gibbs. Com isso, a confecção dos tutoriais traz como foco a pretensão de reduzir as limitações matemáticas do conteúdo e facilitar a execução das práticas computacionais.

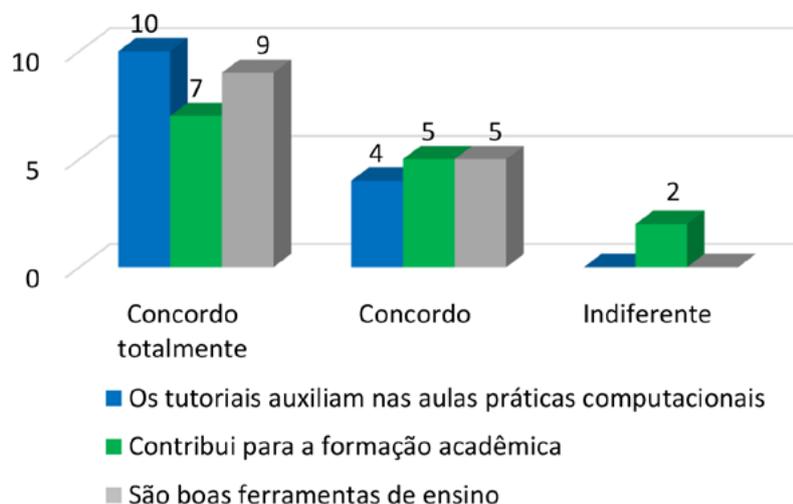
Os tutoriais foram desenvolvidos com base no nível de compreensão sobre o assunto dos estudantes investigados, destinando-se cada um deles a uma finalidade de aplicação, como mostra a Tabela 2.

Ao final das aulas práticas computacionais, aplicou-se a escala de Likert com cinco pontos, a fim de analisar as opiniões dos estudantes sobre a utilização dos tutoriais associados aos softwares computacionais.

Na Figura 3, os alunos relatam as contribuições da aplicação da atividade na formação acadêmica a partir da inserção da proposta no plano de disciplina, demonstrando ser uma ferramenta útil na compreensão dos conteúdos termodinâmicos.

**Tabela 2.** Finalidades das aplicações dos tutoriais

Tutoriais	Finalidades
T1	• Mostrar as ferramentas de construção e visualização de moléculas utilizando o GausView 5.0.
T2	• Calcular e analisar as contribuições energéticas e as propriedades térmicas das moléculas, em diferentes temperaturas, com o Guassian 09W.
T3	• Calcular e analisar as propriedades termodinâmicas e as variações de energias para as reações químicas, como o Gaussian 09W.

**Figura 3.** Argumentação dos estudantes acerca dos tutoriais associados às aulas práticas computacionais

Os tutoriais e os recursos computacionais são disponibilizados para o uso dos estudantes, a fim de ajudá-los a compreender melhor os conteúdos termodinâmicos estudados e complementar os assuntos abordados de forma teórica. Segundo Dallacosta *et al.*<sup>32</sup>, os tutoriais e as simulações auxiliam em muito os estudantes de Química Geral e Orgânica, uma vez que permitem que o material seja estudado, conforme seus ritmos apropriados de aprendizagem, sendo essa uma das maiores vantagens de seu uso.

### 3.2. A importância da visualização molecular

Para a construção do T1, analisou-se os relatos dos estudantes na AD1, os quais descrevem possuir habilidades com as funcionalidades dos programas básicos de um computador, ao afirmar usarem os softwares educacionais voltados ao EQ em algum momento. Boa parte destes, não conhecem os softwares de modelagem molecular por ausência de iniciativa docente, falta de informação e/ou desinteresse pessoal. Contudo, mostram ter conhecimentos sobre alguns conceitos aplicados de Química, tais como

ligações químicas, geometrias moleculares e polaridades de moléculas.

Com base nos relatos, confeccionou-se o T1, adequando-o às necessidades dos estudantes e, buscando orientá-los no uso das ferramentas para a construção e visualização das moléculas (Figura 4). No T1 é observado as formas de exibição molecular, os ângulos e os comprimentos das ligações, as otimizações das estruturas e as propriedades moleculares pelo software GaussView 5.0.

A realização do cálculo para a obtenção das propriedades moleculares é uma das funções mais simples de qualquer programa de QC, porém não é um cálculo fácil, devido ao formalismo matemático aplicado. Esses cálculos são realizados de forma que as energias e os gradientes de energia encontrem a geometria molecular que corresponda ao menor nível energético. A energia do Ponto Zero (EPZ ou ZPE do inglês) é determinada através das frequências vibracionais e adicionada com uma correção à energia interna (U).<sup>33</sup>

Após a execução da primeira aula prática, aplicou-se um questionário com 05 (cinco) questões subjetivas e a escala do tipo Likert com cinco afirmações, sendo as opiniões dos estudantes



**Figura 4.** Construção e visualização das moléculas com o software GaussView 5.0

analisadas acerca da prática realizada. Ao indagar os estudantes sobre a contribuição das funcionalidades do software GaussView 5.0 para o aprofundamento do conhecimento, 13 (treze) dos alunos pesquisados responderam sim, argumentando que melhorou a relação entre a teoria e a prática, por meio do aprendizado mais dinâmico, interativo e atrativo. Podendo ser observado nos relatos dos alunos como, por exemplo, em:

*“(...) Ampliando minha visão e os meus conhecimentos sobre química computacional. Promovendo uma desmistificação de conceitos pré-estabelecidos.”* (Aluno A2)

*“(...) Pois ajuda a perceber detalhes que em uma aula tradicional, por exemplo, geometria não fica tão evidente, os ângulos, conformações dentre outros aspectos da molécula.”* (Aluno A14)

Os softwares de visualização, construção e simulação de modelos dinâmicos como ferramentas metodológicas, têm auxiliado os alunos de maneira significativa, conforme mostram as pesquisas na área da Educação Química.<sup>17,34,35,5,18</sup> Eles possuem múltiplas representações, promovendo uma conexão com o nível macroscópico, possibilitando a transformação das representações bidimensionais em tridimensionais e usando informações precisas.<sup>34</sup> As opiniões dos estudantes confirmam o que as pesquisas têm relatado sobre o uso desses programas quando inseridos no EQ visando a complementação dos conteúdos.

Outros questionamentos referiram-se à construção das moléculas com os softwares, à formulação de uma melhor interpretação do mundo microscópico da matéria, e da maneira pela qual o aprendizado dos estudantes havia sido facilitado a partir do seu uso. Tornando-se, assim,

possível observar que houve um entendimento mais claro, acessível, tecnológico e realístico, como é apresentado nas falas a seguir:

*“(...) Nos tira do mundo de abstração que é a química e nos faz visualizar aquilo, que na maioria das vezes em sala de aula fica apenas no campo da imaginação.”* (Aluno A6)

*“(...) Através dos softwares adquirir uma visão tridimensional da molécula podendo enxergar melhor o mundo microscópico.”* (Aluno A12)

Diante disso, constatou-se que a aplicação de diferentes estratégias no EQ desenvolve habilidades visuoespaciais e colabora para a formação das competências representativas, através dos modelos tridimensionais, facilitando o entendimento das propriedades estruturais das moléculas pelos estudantes. Tal habilidade de visualização é descrita como “a habilidade necessária para transitar entre os níveis representacionais, sendo chamada de habilidade visuoespacial, derivada do conceito visualização espacial”.<sup>36-37</sup> O seu desenvolvimento proporciona um avanço na consolidação de imagens mentais de rotações moleculares no formato tridimensional (3D). A visualização e a interpretação dessas imagens, reproduzidas pelos estudantes, são uma boa estratégia metodológica para melhorar o entendimento sobre o assunto.<sup>36-37</sup>

Na Figura 5, são observados os relatos obtidos a partir do primeiro questionário, demonstrando que os alunos, em sua maioria, concordam que algumas características e habilidades podem ser desenvolvidas ao se trabalhar com os softwares de modelagem no EQ, tais como: motivação, curiosidade, interesse, capacidade de reprodução e um sentido mais realístico e concreto dos

conteúdos. Essas competências e habilidades são necessárias e fundamentais à aprendizagem do conhecimento químico, uma vez que dão suporte à compreensão de conceitos abstratos, tais como: átomos, moléculas, ligações químicas, geometrias moleculares, orbitais moleculares, cálculos de energias, vibrações moleculares, etc.

### 3.3. Cálculos termodinâmicos

Após a aplicação da AD2 com os estudantes das turmas de FQI, analisaram-se as respostas para a construção do T2, buscando coletar informações relacionadas aos conceitos e aplicações dos termos: calor, trabalho, energia interna, capacidade calorífica, entalpia e métodos quânticos computacionais. Entretanto, os graduandos não apresentaram bons resultados na avaliação, mostrando dificuldades, deficiências ou desconhecimento destes termos abordados.

Para a execução da segunda e terceira aulas práticas (Tutoriais 2 e 3), introduziu-se, anteriormente, aos estudantes um pouco dos conceitos da QC, tendo em vista que a grande maioria desconhecia a sua importância, uso e/ou aplicação. Então, para a realização dos cálculos termodinâmicos no programa Gaussian 09W, utilizou-se o método *ab initio* (Hartree Fock) associado ao conjunto de base 3-21G. Nesta etapa, os cálculos de otimização e frequência (opt+freq) foram realizados, bem como o uso das extensões: (.gjf) para os arquivos de entrada e (.log e .out) para os arquivos de saída. Esse modelo quântico utilizado tem apenas finalidade ilustrativa e acadêmica para a obtenção dos resultados termodinâmicos, pois para obtenção

de resultados mais precisos, aconselha-se o uso de métodos mais avançados e funções de bases maiores.

Assim, a partir do T2 pode-se calcular e analisar as contribuições energéticas e as propriedades térmicas, tais como: o ZPE, energia térmica interna, capacidade calorífica a volume constante, entalpia e energia cinética (translacional, rotacional e vibracional), em diferentes temperaturas (298, 600, 900, 1200 e 1500 K), para as moléculas (monoatômicas, diatômicas e poliatômicas lineares e não lineares) através do Gaussian 09W.

Para a execução dos cálculos quânticos, foram selecionadas pequenas moléculas (com 12 ou menos átomos) para a realização de um estudo preliminar dos métodos aplicados. Devido a uma menor complexidade na sua estrutura (poucos átomos e elétrons), requererem um menor custo (tempo) computacional para a realização dos cálculos, e possuem um maior acervo de dados experimentais (entalpia de formação, entropia molar, capacidade calorífica, frequências e comprimentos e ângulos de ligações) na temperatura de 298 K, os quais possibilitam a comparação com os valores teóricos. As moléculas selecionadas foram o gás oxigênio ( $O_2$ ), gás hidrogênio ( $H_2$ ), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), amônia ( $NH_3$ ), metano ( $CH_4$ ), metanol ( $CH_4O$ ), ácido etanoico ( $C_2H_4O_2$ ), benzeno ( $C_6H_6$ ) e os átomos de hélio (He) e argônio (Ar).

Inicialmente, as grandezas calculadas foram ZPE, H,  $\Delta U$  e  $C_v$ , além do número de modos vibracionais para as moléculas lineares e não lineares. Posteriormente, analisaram-se os valores individuais de  $\Delta U$  e  $C_v$  para os movimentos de translação, rotação e vibração, assim como os espectros de IV e Raman dos compostos.

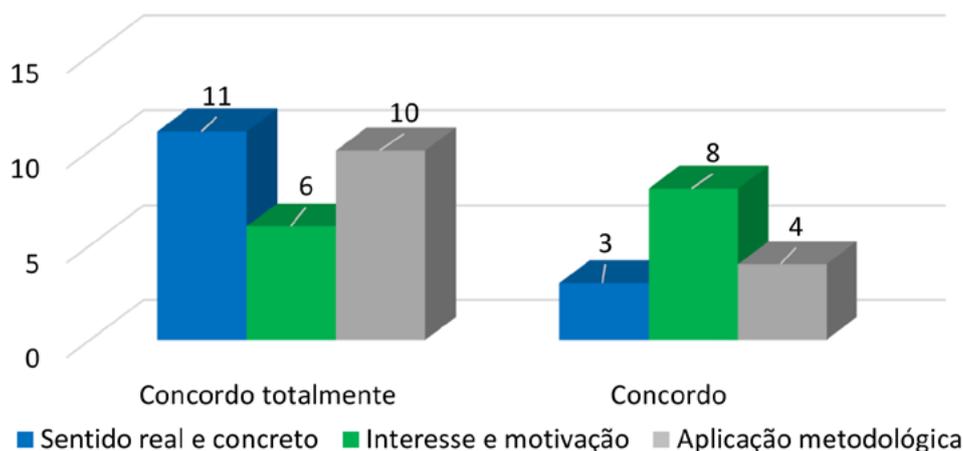


Figura 5. Habilidades desenvolvidas pelos discentes com o uso dos softwares GaussView 5.0

Ao final da prática, aplicou-se o segundo questionário com 05 (cinco) questões subjetivas e uma escala do tipo Likert com cinco afirmações, que analisou os pontos de vista dos estudantes sobre a aula prática. Ao perguntar sobre a relação das energias internas e as capacidades caloríficas totais das moléculas, quando submetidas a diferentes temperaturas, 11 (onze) estudantes afirmam observar uma relação diretamente proporcional com a temperatura. Isso mostra que os discentes compreendem as relações estabelecidas entre as variáveis, conseguem analisar e organizar os dados em tabelas disponíveis no próprio tutorial.

Ao relatarem os pontos positivos e negativos da aula prática, com a utilização dos softwares GaussView 5.0 e Gaussian 09W, os alunos afirmam que os programas são de fácil entendimento, autoexplicativos, ajudam na compreensão dos conteúdos, despertam a curiosidade, realizam cálculos rapidamente, apresentam uma boa visualização gráfica, como também são de acesso restrito, por não serem gratuitos, e necessitam de conhecimentos teóricos sobre o assunto. Como mostra os trechos a seguir:

*“(...) O programa Gaussian 09W, não é um programa gratuito, isso dificulta o acesso desse programa.”* (Aluno A3)

*“(...) Os programas trabalhados são de grande importância para os cálculos termoquímicos de moléculas.”* (Aluno A9)

*“(...) Os alunos devem está por dentro dos conteúdos, porque se não será uma dificuldade na hora de usar e entender os programas.”* (Aluno A10)

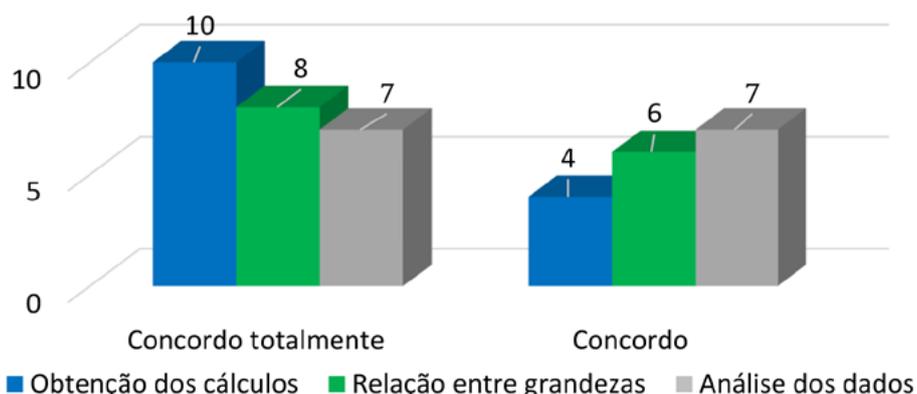
*“(...) Consegui ter uma aprendizagem mais ampla sobre termoquímica, alinhando a teoria a prática.”* (Aluno A13)

Os argumentos dos alunos sobre o uso dos programas mostram as possíveis contribuições para o ensino da TQ, contrariando o que geralmente é discutido em trabalhos sobre o tema, que relatam as dificuldades conceituais dos estudantes ao discutirem alguns temas fundamentais da termodinâmica, tais como: calor, temperatura, equilíbrio químico, termoquímica e entropia, os quais são demonstrados como obstáculos na aprendizagem dos alunos.<sup>38-41</sup>

A partir dos questionamentos, os estudantes afirmam ter facilitado à forma de execução dos cálculos de energia, reduzindo os obstáculos impostos pelas relações e deduções matemáticas, mostrando a importância destas ferramentas para o ensino e aprendizado dos conteúdos. Dentre as opções presentes na escala de Likert, todos os participantes responderam que concordam ou concordam totalmente com as vantagens em utilizar o Gaussian 09W para os conteúdos termodinâmicos, como mostra a Figura 6 a seguir.

Quando se utiliza um programa computacional que resolve problemas básicos de termodinâmica é vantajoso para os estudantes que não possuem afinidades com as relações matemáticas. Embora pré-requisitos sejam aplicados, cada aluno difere em nível de compreensão, especialmente, quando enfrenta a aplicação desses conceitos a um sistema químico. No entanto, a incorporação dos softwares computacionais na disciplina de FQ faz com que os estudantes ao trabalharem com a matemática sejam capazes de visualizar relações teóricas, sem ter que superar a barreira do cálculo.<sup>35</sup>

Para a construção do T3, os graduandos são submetidos a AD3, o qual busca determinar os



**Figura 6.** Argumentação dos graduandos acerca da obtenção, análise e interpretação dos dados termodinâmicos a partir do software Gaussian 09W

valores das variações de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs para algumas reações químicas. Percebe-se que os estudantes não obtiveram um bom desempenho nessa avaliação, mostrando dificuldades, deficiências e/ou desinteresse com o conteúdo trabalhado em sala de aula.

Com o auxílio do T3, na aula prática, determinou-se os valores de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs, assim como as suas variações ( $\Delta_r H^\circ$ ,  $\Delta_r S^\circ$  e  $\Delta_r G^\circ$ ) para as reações de combustão do metano, benzeno, síntese da amônia e decomposição da água. Utilizaram-se diferentes temperaturas (298, 600, 900, 1200 e 1500 K) para determinar as propriedades termodinâmicas das substâncias (Dióxido de silício, Benzeno, Gás hidrogênio, Gás oxigênio e Água). Ao final das aulas práticas, os estudantes convertem os valores teóricos de entalpia de formação obtidos em Hartree, para a unidade de medida  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ , e no caso das entropias molares, convertem de  $\text{cal}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$  para  $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ . A partir disso, é possível compará-los com os dados experimentais disponíveis na literatura e através das bases de dados *Nist WebBook Chemistry* e CCCBDB.<sup>42-43</sup>

Os valores de entalpias e entropias totais do sistema podem sofrer alterações de acordo com as contribuições dos movimentos vibracionais, translacionais, rotacionais e das energias eletrônicas das moléculas. Esses resultados são geralmente mostrados após os cálculos de frequência dos programas computacionais, determinando-se em seguida as propriedades termodinâmicas das substâncias.<sup>33</sup>

A fim de verificar as contribuições que o pacote computacional Gaussian 09W proporciona ao realizar os cálculos computacionais, os estudantes são submetidos no terceiro questionário a 07 (sete) questionamentos subjetivos e a escala do tipo Likert com cinco afirmações. Ao pergunta-los se concordam com a afirmação de que os softwares resolvem todas as equações matemáticas para os cálculos termoquímicos, facilitando a obtenção dos resultados, sem ter que superar as limitações matemáticas, eles respondem que o trabalho tornou-se mais simplificado, obtiveram resultados mais rápidos e precisos, reduziram as dificuldades na realização dos cálculos, sendo consideradas ferramentas úteis e eficazes.

É importante ressaltar que, quando se abordou os pontos positivos e negativos da aula prática sobre os cálculos termodinâmicos, os alunos

argumentam que os softwares são didáticos, dinâmicos e melhoram o aprendizado, porém eles apresentaram dificuldades na conversão das unidades e problemas com os computadores, conforme mostra as seguintes falas:

*"(...) Conversão de unidade, alguns pontos confusos em interpretar."* (Aluno A1)

*"(...) O software facilitou os cálculos e estimulou o interesse."* (Aluno A7)

*"(...) Problemas nos computadores."* (Aluno A11)

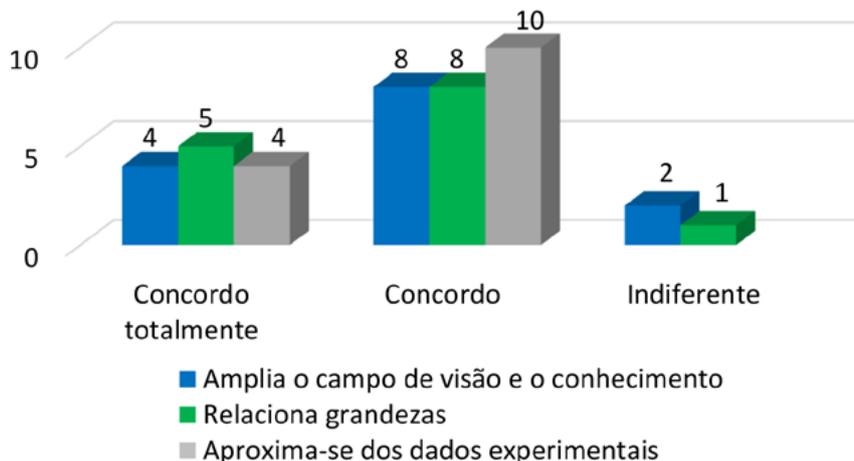
*"(...) Melhor compreensão e mais facilidade para obtenção de cálculos termodinâmicos."* (Aluno A12)

Durante a pesquisa, os estudantes relatam que as aulas práticas possibilitam um melhor entendimento sobre o assunto, como exemplo, em determinar a espontaneidade de uma reação a partir da obtenção da energia livre de Gibbs da reação. Ao observar a Figura 7, nota-se que 12 (doze) alunos afirmam que os softwares ajudam a ampliar o conhecimento e o entendimento a respeito das leis da termodinâmica. Ao comparar os dados teóricos obtidos com os valores experimentais a 298 K nas bases de dados, é observada uma boa aproximação entre os resultados. Os alunos verificam um aumento nos valores de entropias, quando submetidas às temperaturas de 298, 600, 900, 1200 e 1500 K, respectivamente, mostrando a relação prática dos conteúdos teóricos trabalhados em sala pelo professor. Ao final do T3 (no passo 6), é sugerida uma atividade a ser realizada pelos estudantes, de forma a exercitar e colocar em prática parte dos conhecimentos adquiridos, ao longo das aulas práticas computacionais auxiliadas pelo uso dos tutoriais.

Estes resultados demonstram a importância da aplicação dos cálculos computacionais, coincidindo com os dados da literatura que mostram a vasta aplicação da QC à TQ, nos últimos anos, como uma ferramenta importantíssima para a obtenção de valores de entalpias e energias de Gibbs de formação de compostos orgânicos, entre outros.<sup>44-45</sup>

#### 4. Considerações Finais

Os graduandos relatam que a inserção dessa proposta de ensino no plano da disciplina de FQI, colabora positivamente para o aprendizado dos conteúdos termodinâmicos, complementando aspectos normalmente não discutidos em sala



**Figura 7.** Diagnóstico dos estudantes após análise dos dados gerados pelo software Gaussian 09W

de aula. Além de desenvolver habilidades de visualização espacial molecular, melhorando a compreensão dos níveis microscópico e simbólico.

Por oportuno, destaca-se que, durante o desenvolvimento das aulas práticas computacionais, os estudantes não tiveram maiores problemas em operar os softwares de modelagem molecular, especialmente em função dos tutoriais previamente fornecidos e detalhados. Os problemas relatados por alguns alunos são relativos às dificuldades que sentem com o inglês, utilizado na linguagem para execução dos programas, e aos imprevistos técnicos com os computadores.

A análise dos resultados comprova uma melhor compreensão dos conceitos e dos cálculos por parte dos alunos, após a realização das atividades de simulação computacional, assim como uma melhoria na interpretação dos dados teóricos, ao compará-los com os experimentais. Os resultados apresentados trazem evidências de que o uso dos programas de modelagem molecular, como ferramentas no EQ, contribuem para a aprendizagem dos conteúdos termodinâmicos.

Constatou-se, também, através das observações, que os estudantes obtiveram um melhor desempenho acerca dos conhecimentos termodinâmicos nas avaliações realizadas na disciplina de FQI. Porém, não se pode generalizar e afirmar que outras pesquisas obterão os mesmos resultados, levando-se em consideração a heterogeneidade dos indivíduos e do meio em que estão inseridos, em relação aos conhecimentos e aprendizagens.

Dessa forma, evidenciou-se que a utilização dos tutoriais e as aulas práticas computacionais, associados às aulas teóricas da disciplina de FQI, seguem as orientações das DCNs, contribuem para o aprofundamento dos conhecimentos em TQ, ajudam a estabelecer uma visão mais concreta do mundo microscópico, minimizam as limitações matemáticas para a resolução dos cálculos termoquímicos e estimulam o interesse e a motivação dos estudantes pelo aprendizado.

## Agradecimentos

Agradecemos ao apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Piauí (UFPI), ao suporte da Universidade Estadual do Piauí (UESPI), em nome do Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima, e ao apoio do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí (IFPI), *campus Picos*.

## Material Suplementar

Seguem os Tutoriais (T1, T2 e T3), as Avaliações Diagnósticas (AD1, AD2 e AD3) e os Questionários (1, 2 e 3) com as escalas de Likert, a fim de demonstrar, detalhadamente, a sequência de passos reproduzidos pelos estudantes durante cada aplicação prática, e como foram realizadas as coletas de informações e dados para o desenvolvimento da pesquisa.

## Referências Bibliográficas

- <sup>1</sup> Melo, E. S.; Melo, J. R.; Softwares de simulação no ensino de química: uma representação social na prática docente. *Educação Temática Digital* **2005**, *6*, 51. [CrossRef]
- <sup>2</sup> Arroio, A.; Honório, K. M.; Weber, K. C.; Mello, P. H.; Silva, A. B.; O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. *Química Nova* **2005**, *28*, 360. [CrossRef]
- <sup>3</sup> Carobin, C.; Neto, A. S. A.; *Resumos do IV Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências*, Bauru, Brasil, **2003**. [Link]
- <sup>4</sup> Brasil. Ministério da Educação. *Diretrizes Curriculares Nacionais para os Cursos de Química*. Parecer CES/CNE 1.303/2001, homologação publicada no DOU 07/12/2001, Seção 1, p. 25. Resolução CES/CNE 08/2002, publicada no DOU 26/03/2002, Seção 1, p. 13. [Link]
- <sup>5</sup> Tamani, S; Talbi, M.; Radid, M.; The teaching of chemical thermodynamics at moroccan university: obstacles and areas for improvement. *Procedia - Social and Behavioral Sciences* **2015**, *191*, 2612. [CrossRef]
- <sup>6</sup> Thomas, P. L; Schwenz, R. W.; College physical chemistry students' conceptions of equilibrium and fundamental thermodynamics. *Journal of Research in Science Teaching* **1998**, *35*, 1151. [CrossRef]
- <sup>7</sup> Freitas, L. C.; Prêmio Nobel de Química 1998. *Química Nova na Escola* **1998**, *8*, 3. [Link]
- <sup>8</sup> Linenberger, K. J.; Cole, R. S.; Sarkar, S.; Looking beyond lewis structures: a general chemistry molecular modeling experiment focusing on physical properties and geometry. *Journal of Chemical Education* **2011**, *88*, 962. [CrossRef]
- <sup>9</sup> Clauss, A. D.; Nelsen, S. F.; Integrating computational molecular modeling into the undergraduate organic chemistry curriculum. *Journal of Chemical Education* **2009**, *86*, 955. [CrossRef]
- <sup>10</sup> McNaught, I. J.; Testing and Extending VSEPR with WebMO and MOPAC or GAMESS. *Journal of Chemical Education* **2011**, *88*, 421. [CrossRef]
- <sup>11</sup> Johnson, L. E.; Engel, T.; Integrating computational chemistry into the physical chemistry curriculum. *Journal of Chemical Education* **2011**, *88*, 569. [CrossRef]
- <sup>12</sup> Rowley, C. N.; Woo, T. K.; Mosey, N. J.; A computational experiment of the endo versus exo preference in a diels-alder reaction. *Journal of Chemical Education* **2009**, *86*, 199. [CrossRef]
- <sup>13</sup> Clausen, T. P.; Combining a standard fischer esterification experiment with stereochemical and molecular-modeling concepts. *Journal of Chemical Education* **2011**, *88*, 1007. [CrossRef]
- <sup>14</sup> [Pi]  $\pi$  Montgomery, C. D.; Backbonding in carbonyl complexes and carbon-oxygen stretching frequencies: a molecular modeling exercise. *Journal of Chemical Education* **2007**, *84*, 102. [CrossRef]
- <sup>15</sup> Wang, L.; Using molecular modeling in teaching group theory analysis of the infrared spectra of organometallic compounds. *Journal of Chemical Education* **2012**, *89*, 360. [CrossRef]
- <sup>16</sup> Salter, C.; Foresman, J. B.; Naphthalene and azulene: semimicro bomb calorimetry and quantum mechanical calculations. *Journal of Chemical Education* **1998**, *75*, 1341. [CrossRef]
- <sup>17</sup> Esselman, B. J.; Hill, N. J.; Integration of computational chemistry into the undergraduate organic chemistry laboratory curriculum. *Journal of Chemical Education* **2016**, *93*, 932. [CrossRef]
- <sup>18</sup> Vasconcelos, F. C. G. C.; Arroio A. Explorando as percepções de professores em serviço sobre as visualizações no ensino de química. *Química Nova* **2013**, *36*, 1242. [CrossRef]
- <sup>19</sup> Frisch, M. J. et al.; *Gaussian 09*. Revision A.1. Gaussian, Inc. Wallingford. EUA, 2009. Disponível em: <http://www.surfchem.fudan.edu.cn/teacher/lizh/Usefull\_Files/g09/g\_prod/g09.htm>. Acesso em: 2 maio 2019. [Link]
- <sup>20</sup> Likert, R.; A Technique for the Measurement of Attitudes. *Archives of Psychology* **1932**, *140*, 1. [Link]
- <sup>21</sup> Hartree, D. R.; The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **1928a**, *24*, 89. [CrossRef]
- <sup>22</sup> The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part II. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **1928b**, *24*, 111. [CrossRef]
- <sup>23</sup> The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **1928c**, *24*, 426. [CrossRef]
- <sup>24</sup> Binkley, J. S.; Pople, J. A.; Hehre, W. J. Self-consistent molecular orbital methods. 21. Small split-valence basis sets for first-row elements. *Journal of the American Chemical Society* **1980**, *102*, 939. [CrossRef]
- <sup>25</sup> Driver, R. Students conceptions and the learning of science. *International Journal of Science Education* **1989**, *11*, 481. [CrossRef]
- <sup>26</sup> Laburú, C. E.; Carvalho, M.; Batista, I. L. Controvérsias Construtivistas. *Caderno Catarinense de Ensino de Física* **2001**, *18*, 152. [CrossRef]

- <sup>27</sup> Moreira, M.; *Subsídios teóricos para o professor pesquisador em ensino de ciências: a teoria da aprendizagem significativa*, 2a ed. Universidade Federal do Rio Grande do Sul: Porto Alegre, 2016. [\[Link\]](#)
- <sup>28</sup> Patton, M.; *Qualitative research and evaluation methods*, 3a ed. Thousand Oaks: Sage Publications: Londres, 2003.
- <sup>29</sup> Llewellyn, S.; Northcott, D.; The “singular view” in management case studies. *Qualitative Research in Organizations and Management: An International Journal* **2007**, *2*, 194. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>30</sup> Eisenhardt, K. M.; Building theories from case study research. *Academy of Management Review* **1989**, *14*, 532. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>31</sup> Gil, A. C.; *Métodos e técnicas de pesquisa social*, 6a ed, Atlas S.A.: São Paulo, 2008.
- <sup>32</sup> Dallacosta, A; Fernandes, A. M. R; Bastos, R. C.; *Resumos do IV Congresso Ibero-Americano de Informática na Educação*, Brasília, Brasil, 1998. [\[Link\]](#)
- <sup>33</sup> Young, D. C.; *Chemistry computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real-world problems*, 9a ed, John Wiley & Sons: New York, 2001. [\[Link\]](#)
- <sup>34</sup> Leal, R. C.; Neto, J. M. M.; Lima, F. D. C. A.; Feitosa, C. M.; A química quântica na compreensão de teorias de química orgânica. *Química Nova* **2010**, *33*, 1211. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>35</sup> Martini, S. R.; Hartzell, C. J.; Integrating computational chemistry into a course in classical thermodynamics. *Journal of Chemical Education* **2015**, *92*, 1201. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>36</sup> Raupp, D.; Serrano, A.; Moreira, M. A.; Desenvolvendo habilidades visuoespaciais: uso de software de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica em química. *Experiências Em Ensino de Ciências* **2009**, *4*, 65. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>37</sup> Moreira, L. P. B.; Serrano, A.; Representações mentais de concepções espontâneas dos estudantes após utilização de softwares. *Revista Novas Tecnologias na Educação* **2013**, *11*, 1. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>38</sup> Sözbilir, M.; A review of selected literature on students’ misconceptions of heat and temperature. *Journal of Education* **2003a**, *20*, 25. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>39</sup> What students’ understand from entropy?: A review of selected literature. *Journal of Baltic Science Education* **2003b**, *1*, 21. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>40</sup> Driel, J. V.; Gräber, W.; In: Gilbert, J. K.; *Chemical Education: Towards research-based practice*. Kluwer Academic Publishers: Berlim, 2002, cap. 12. [\[Link\]](#)
- <sup>41</sup> Goedhart, M. J.; Kaper, W.; In: Gilbert, J. K.; *Chemical Education: Towards Research-based Practice*. Kluwer Academic Publishers: Berlim, 2003, cap. 15. [\[Link\]](#)
- <sup>42</sup> Nist.; Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database. NIST Standard Reference Database Number 101. EUA, 2016a. Editor: Russell D. Johnson III. Disponível em: < <http://cccbdb.nist.gov/>>. Acesso em: 10 junho 2019. [\[Link\]](#)
- <sup>43</sup> Livro de Química na Web. Base de dados de Referência padrão do NIST número 69. EUA, 2016b. *Secretary of Commerce on behalf of the United States of America*. Disponível em: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>>. Acesso em: 12 junho 2019. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>44</sup> Burk, P.; Koppel, I. A.; Koppel, I.; Leito, I.; Travnikova, O.; Critical test of performance of B3LYP functional for prediction of gas-phase acidities and basicities. *Chemical Physics Letters* **2000**, *323*, 482. [\[CrossRef\]](#)
- <sup>45</sup> Aue, D. H.; Guidoni, M.; Betowski, L. D.; *Ab initio calculated gas-phase basicities of polynuclear aromatic hydrocarbons*. *International Journal of Mass Spectrometry* **2000**, *201*, 283. [\[CrossRef\]](#)