

## EXPLORANDO ORBITAIS MOLECULARES COM DFT: UMA PROPOSTA DIDÁTICA PARA A DISCIPLINA DE QUÍMICA INORGÂNICA PARA ENGENHARIA AMBIENTAL (7500024)

Autores: Renato Cardoso Leal Netto e Benedito dos Santos Lima Neto  
 Química Inorgânica para Engenharia Ambiental (7500024)  
 Teoria do Orbital Molecular; Aprendizagem Ativa; Química Computacional

### RESUMO

Este trabalho apresenta uma proposta didática que integra a Teoria do Orbital Molecular (TOM) e cálculos computacionais baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) como estratégia para o ensino de estrutura eletrônica na graduação. A atividade foi aplicada na disciplina Química Inorgânica para Engenharia Ambiental, utilizando Aprendizagem Baseada em Problemas. As ações envolveram discussão orientada de artigo científico, realização de cálculos no software Gaussian e seminários avaliativos. Os estudantes obtiveram estruturas otimizadas, espectros vibracionais e orbitais moleculares, permitindo correlacionar resultados computacionais com conceitos da TOM. Observou-se maior engajamento, melhor compreensão conceitual e maior autonomia na interpretação dos dados.

### INTRODUÇÃO

- A Teoria do Orbital Molecular (TOM) é fundamental para a compreensão da estrutura eletrônica e das propriedades químicas, porém apresenta elevado grau de abstração no ensino de graduação.
- Ferramentas de química computacional, especialmente cálculos baseados em Teoria do Funcional da Densidade (DFT), permitem visualizar orbitais moleculares, níveis de energia e distribuição eletrônica.
- A integração entre TOM e DFT pode tornar o processo de ensino-aprendizagem mais concreto, dinâmico e alinhado às práticas contemporâneas da química.

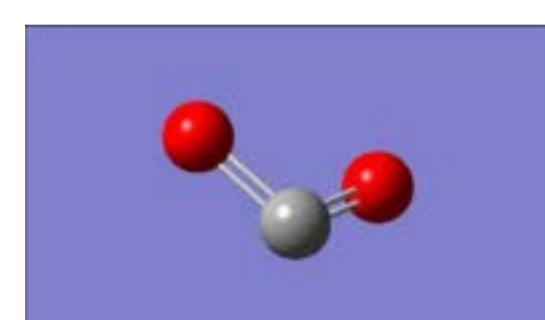
### METODOLOGIA



- Discussão orientada de artigo científico sobre DFT e estrutura eletrônica.
- Desenvolvimento de atividade prática, análise orientada dos resultados e discussão em sala.

### RESULTADOS

- Boa adesão e engajamento dos estudantes em todas as etapas da proposta didática, especialmente nas atividades práticas em laboratório de informática.
- Execução bem-sucedida de cálculos baseados em DFT para moléculas simples, como CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>, com obtenção de arquivos de saída completos.



- Geração de estruturas otimizadas, energias eletrônicas, espectros vibracionais e visualizações de orbitais moleculares.



- Análise dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), permitindo discutir distribuição eletrônica, natureza das interações químicas e possíveis implicações na reatividade molecular.
- Interpretação dos modos normais de vibração, relacionando frequências vibracionais, simetria molecular e tipos de ligação.
- Capacidade dos estudantes em correlacionar resultados computacionais com conceitos da Teoria do Orbital Molecular, como ordem de ligação, ocupação eletrônica, estabilidade e propriedades magnéticas.
- Seminários avaliativos evidenciaram melhora na argumentação científica, na comunicação oral e na integração entre teoria e prática.
- Desenvolvimento de maior autonomia dos estudantes na leitura de outputs computacionais e na construção de explicações fundamentadas.

### CONCLUSÃO

A integração entre a Teoria do Orbital Molecular e cálculos computacionais baseados em DFT mostrou-se uma estratégia eficaz para o ensino de estrutura eletrônica. O uso de ferramentas computacionais facilitou a visualização de orbitais e a compreensão de conceitos abstratos, promovendo aprendizagem ativa, maior engajamento e autonomia dos estudantes. Além disso, favoreceu a articulação entre teoria e prática, indicando potencial de expansão da proposta para outras disciplinas da graduação.

### REFERÊNCIAS

1. LAYEGH, M.; BENNETT, J. W. Open-Source DFT Calculations of Electronic Structure to Understand Bonding in Solids. *Journal of Chemical Education*, 2025.
2. RAQUEL, J.; DE OLIVEIRA, S. Estudo de caso no ensino de química. *Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências (Belo Horizonte)*, v. 12, n. 2, p. 279–280, ago. 2010.
3. MACHADO, A. R.; CRISTOVÃO, V. L. L. A construção de modelos didáticos de gêneros: aportes e questionamentos para o ensino de gêneros. *Linguagem em (Dis)curso*, v. 6, n. 3, p. 547–573, dez. 2006.