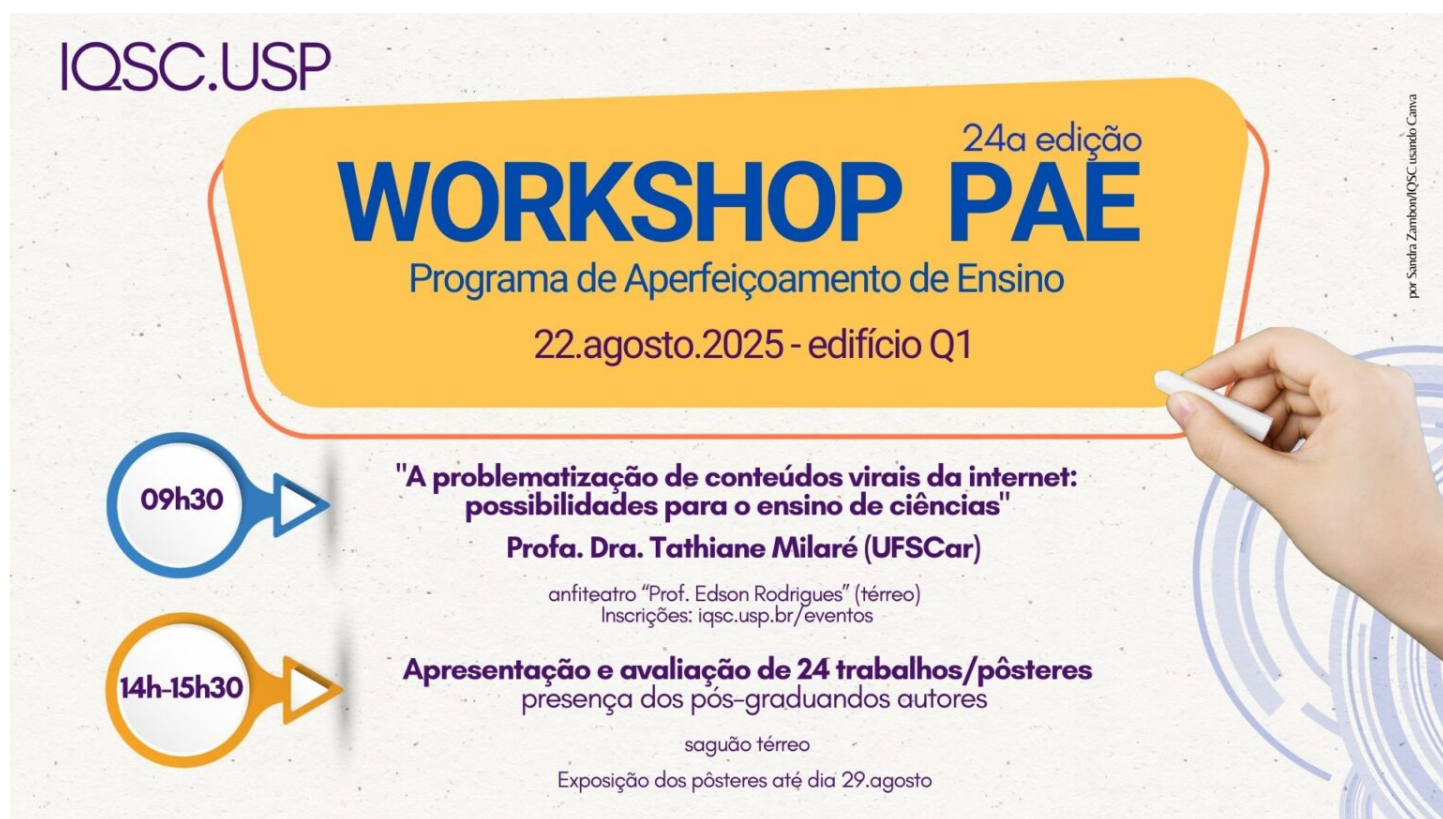


# Formação para a docência: alunos de pós-graduação compartilham experiências didáticas no Workshop PAE

O Instituto de Química de São Carlos (IQSC-USP) promove, no dia 22 de agosto de 2025, a 24ª edição do *Workshop PAE* – Programa de Aperfeiçoamento de Ensino, aberto a toda a comunidade acadêmica e ao público interessado.

O Programa PAE tem como objetivo preparar pós-graduandos para a docência no ensino superior. Após um semestre de formação pedagógica, os participantes vivenciam a prática didática em disciplinas de graduação, sob supervisão docente.

No workshop, os pós-graduandos apresentarão pôsteres com suas experiências práticas, vividas no primeiro semestre de 2025, discutindo os resultados com os avaliadores e o público interessado, trocando experiências que enriquecem o aprendizado e estimulam o debate sobre o ensino de graduação. Após o evento, os pôsteres permanecerão em exposição até o dia 29 de agosto.



**IQSC.USP**

**24ª edição**

# **WORKSHOP PAE**

Programa de Aperfeiçoamento de Ensino

22.agosto.2025 - edifício Q1

**09h30**

**"A problematização de conteúdos virais da internet: possibilidades para o ensino de ciências"**

**Profa. Dra. Tathiane Milaré (UFSCar)**

anfiteatro "Prof. Edson Rodrigues" (térreo)  
Inscrições: [iqsc.usp.br/eventos](https://iqsc.usp.br/eventos)

**14h-15h30**

**Apresentação e avaliação de 24 trabalhos/pôsteres**

presença dos pós-graduandos autores

saguão térreo

Exposição dos pôsteres até dia 29.agosto

por Sandra Zamboni/IQSC usando Canva

A programação inclui a presença da professora Dra. Tathiane Milaré (UFSCar – Araras), que abordará o tema “A problematização de conteúdos virais da internet: possibilidades para o ensino de ciências”. A pesquisadora tem experiência na área de Ensino, com ênfase em ensino de Química, atuando principalmente em temas relativos à alfabetização científica e tecnológica e o uso de ilhas interdisciplinares de racionalidade como metodologia de ensino.

## Pôsteres

Número do pôster	Título do trabalho	Estagiário
1	Jigsaw associado à PBL para o ensino de fenômenos de adsorção	Nadeem Khan
2	Aprendizagem significativa em Matemática para Químicos com ferramentas digitais e sala de aula invertida	Lucas Freitas Feitosa
3	Uso de fluxogramas como ferramenta de ensino no Laboratório de Química Geral	Júlia Faria Silva
4	Aprendizagem baseada em Problemas (ABP) aplicada como metodologia de ensino na disciplina de 7500044 - Química Inorgânica III para Bacharelado em Química	Alan Borges Pereira
5	Aplicação da técnica de escrita e leitura para a preparação prévia dos alunos em aulas práticas na disciplina 7500034 - Análises Quantitativas: Prática	Rafaela Garcia da Silva
6	Webquests como ferramentas de suporte ao desenvolvimento de busca em base de dados científicas	Caio Moralez de Figueiredo
7	Aprendizagem ativa na disciplina de Análise Instrumental I (7500043): Seleção de equipamentos com base nas características de uma amostra	Renato Cardoso Leal Netto
8	Aprendizagem Baseada em Problemas: ensinando a química além do bacharelado	Luana Figueiredo
9	O uso de estudos de caso e de atividades pré-relatório como maneira de contextualizar conceitos da disciplina Laboratório de Bioquímica (7500093) para o curso de Ciências Físicas e Biomoleculares	Lucas Augusto Aguiar das Neves
10	Aplicação de ferramentas computacionais (elaboração de infográfico e software Excel®) na disciplina de Química Geral Experimental 7500017	Maria Eduarda de Almeida Astolfo
11	Aprendizagem baseada em projetos na disciplina: Análises Quantitativas: prática	Beatriz Alves Fernandes
12	Ecotoxicologia e Gamificação: ferramenta para incentivo à aprendizagem teórica e suas aplicações	Marcus Augusto dos Santos Catali
13	Kahoot! como ferramenta de gamificação em Química de Alimentos II	Letícia Tagliavini de Assis

Número do pôster	Título do trabalho	Estagiário
14	Estudos de caso aplicados com auxílio de WebQuest na disciplina de Laboratório de Bioquímica: uma combinação de ferramentas de metodologias de ensino ativas, para um envolvimento profundo dos discentes com os conteúdos, integrando teoria e prática de forma significativa	Letícia Gaiola
15	Aprendizagem significativa na disciplina Química Analítica Quantitativa: utilizando estudo de caso	Caio Ribeiro de Barros
16	Utilização da técnica Gallery Walk como método de aprendizagem alternativa na disciplina de Química Inorgânica I (7500035)	Liane Miranda Carvalho
17	Gamificação na disciplina 7500026 - Introdução à Química	Winnie Evelyn Valeria Perez Vite
18	Uso de mapas conceituais na disciplina de Química Geral: proposta para incentivar a preparação dos estudantes e tornar os processos de ensino e aprendizagem mais ativos e significativos	Pedro Cardoso de Araujo
19	Elaboração e aplicação de quizzes em disciplina de Comunicação Científica	Pablo Abreu Alves
20	Aprendizagem baseada em problemas e utilização de estudos de caso na disciplina de "Química Quântica: uma abordagem prática"	José Luiz Felix Santos
21	Quizzes pré-laboratório na disciplina Química Orgânica Experimental	Elizabeth Aparecida Alves
22	Aprendizagem cooperativo em resolução de exercícios na disciplina de Química Geral - 7500012 (Engenharia Ambiental)	Claudia Soñia Nuñez Peñalva
23	Lógica de Algoritmos: Emprego de Fluxogramas de Processo em Estudos de Caso da Disciplina "Introdução à Gestão de Qualidade em Química"	Denise de Fátima Gonçalves
24	Complementações como ferramenta construtivista de aulas práticas	Thais Eugênio Gallina

Para acessar o **conteúdo** dos pôsters: [clique aqui](#).

**Inscrições para a palestra:** [no site do IQSC](#). Será emitido certificado aos participantes.

Esta atividade relaciona-se com os Objetivos do Desenvolvimento Sustentável (ODS): 4 – Educação de qualidade.

*Por Sandra Zambon/Comunicação IQSC*



## Aprendizagem baseada em problemas e utilização de estudos de caso na disciplina de "Química Quântica: uma abordagem prática"

**Autores: José Luiz Felix Santos, Roberto Luiz Andrade Haiduke**  
**Disciplina Química Quântica: Uma abordagem prática**  
**Aprendizagem baseada em problemas, estudos de caso, química quântica**

### Resumo

O presente projeto teve como principal objetivo investigar os efeitos da aplicação de estudos de caso na disciplina "Química Quântica: Uma abordagem prática".

### Introdução

A química quântica, campo que aplica os princípios da mecânica quântica a sistemas químicos, é notoriamente complexa, exigindo dos estudantes um elevado nível de abstração. Diante desse desafio, a busca por metodologias de ensino que tornem o aprendizado mais engajador e significativo tem se intensificado. Nesse contexto, a aprendizagem baseada em problemas (ABP) e os estudos de caso (EC) destacam-se como ferramentas eficazes para transformar o ensino de química quântica [1,2]

### Metodologia

- ❑ Aprendizagem baseada em problemas;
- ❑ Estudos de caso;

### Resultados

	Atividade 1	Atividade 2	Atividade 3	Atividade 4	Atividade 5	Atividade 6
Aluno 1	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue
Aluno 2	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue
Aluno 3	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue
Aluno 4	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue
Aluno 5	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue
Aluno 6	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue	Entregue

Figura 1: Relação de alunos e atividades entregues durante o projeto.

**Tabela 1.** Propriedades obtidas através do cálculo de otimização mais frequência e cálculo de scan: energia, entalpia e energia de gibbs.

Objeto de estudo	Energia (kcal/mol)	Entalpia (kcal/mol)	Energia de Gibbs (kcal/mol)
HCN	-93.323301	-93.322357	-93.345194
HNC	-93.301464	-93.30052	-93.32377
Estado de transição	-93.254383	-93.253438	-93.278205
$\Delta_{\text{trans}}$	13.70293587	13.70293587	13.44377424
Barreira (Cálculo de scan)	43.24673418	43.24736169	42.03626739

Fonte: Autoria própria.

A partir dos dados obtidos na Tabela 1, pode-se observar que a reação de isomerização  $\text{HCN} \rightarrow \text{HNC}$  é uma reação endotérmica, ou seja, demanda energia para que ocorra, já que a entalpia é positiva, além de não ser espontânea, visto que a variação de energia de gibbs também é positiva. Desse modo, também é possível verificar que tanto a energia, a entalpia e a energia de gibbs são menores para o isômero HCN, o que corrobora o que foi dito anteriormente.

Outro fator importante a ser observado é que a variação de energia obtida através do cálculo, 13.7029 kcal/mol está na faixa de variação de energia obtida experimentalmente, 14.8  $\pm$  2 kcal/mol. Também pode-se verificar que a barreira energética calculada para essa reação, 43.2467 kcal/mol é menor que o valor obtido experimentalmente, 47.8 kcal/mol, o que faz sentido, uma vez que o cálculo foi realizado utilizando DFT e essa abordagem tende a

Figura 2: Exemplo de atividade entregue pelos discentes.

#### CÁLCULO DAS FREQUÊNCIAS VIBRACIONAIS E DOS DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DAS MOLÉCULAS IMIDAZOL E BENZIMIDAZOL.

**DFT/PBEPBE/6-31G(d):** cálculo de estrutura eletrônica baseado na teoria do funcional da densidade (DFT), usando o funcional PBEPBE e o conjunto de base 6-31G com funções de polarização d em átomos não-hidrogênio. Todos os cálculos foram realizados a partir dessa mesma função de base.

#### 1) Frequências vibracionais

Após a otimização das moléculas imidazol e benzimidazol realizou-se a investigação para estudar as propriedades vibracionais dessas moléculas em fase gasosa, a partir do cálculo das frequências vibracionais fundamentais, relevantes em espectroscopia infravermelha. A tabela 1 apresenta as frequências e as intensidades das bandas de absorção no infravermelho para os 21 modos vibracionais apresentados pelo imidazol segundo os cálculos.

**Tabela 1.** Tabela contendo o número de modos vibracionais e as respectivas frequências e intensidades das bandas para a molécula de imidazol.

Imidazol	Freq (cm <sup>-1</sup> )	IR
1	405,5	87,0
2	627,2	16,7
3	666,6	2,2
4	679,7	14,4
5	749,4	48,9
6	813,0	9,5
7	870,6	9,2
8	913,5	1,7
9	1.085,9	24,4
10	1.085,8	24,1

Figura 3: Exemplo de estudos de cados entregues pelos discentes.

#### Atividade Final - 04/07/25

Otimização e Frequência e Cálculo de RMN das estruturas  $\text{C}_2\text{H}_2$  e  $\text{C}_2\text{H}_4$

Para realização desta atividade foi proposto pelo professor a escrita de um sistema que deveria ser calculado em aula, a fim de investigar algumas de suas propriedades físico-químicas. Dessa forma, escolheu-se investigar a quebra homolítica da ligação C-H no composto ciclopentadieno ( $\text{C}_5\text{H}_6$ ) para formação dos radicais  $\text{C}_5\text{H}_5$  e H. O ciclopentadieno é um composto orgânico caracterizado por um anel de 5 carbonos e 2 ligações duplas, de modo a apresentar uma massa molar igual a 66,10 g/mol [1].

Posto isso, o cálculo começou com a otimização e frequência dos sistemas envolvidos na reação 1, sendo realizada com o método DFT, e a base PBEPBE/6-31G com polarização no orbital d.



o que permitiu obter os dados termocquímicos de cada componente, os quais estão presentes na Tabela 1.

**Tabela 1.** Dados termocquímicos obtidos no cálculo: Energia E1, Energia de Gibbs G1 e Entalpia H1.

Sistemas	E1	G1	H1
$\text{C}_5\text{H}_6$	-130,74E	-103,77E	-103,74E
$\text{C}_5\text{H}_5$	-100,15E	-103,15E	-103,11E
H	-0,40E	-0,50E	-0,40E
Variação $\Delta$	78,75E	68,02E	73,59E

Fonte: Autoria própria.

Assim, com os dados apresentados na Tabela 1, pode-se perceber que a quebra homolítica da ligação C-H no composto investigado não é espontânea, o que fica nítido com a  $\Delta G > 0$ . Além disso, trata-se de uma reação endotérmica - demandando energia -, o que pode ser observado pela  $\Delta H > 0$ , já no que diz respeito a energia, verifica-se que os produtos, principalmente o radical  $\text{H}^\bullet$ , são mais instáveis que o ciclopentadieno, o qual possui a menor energia dentre os compostos envolvidos.

Posteriormente, fez-se o cálculo de RMN do composto  $\text{C}_5\text{H}_6$  e do radical  $\text{C}_5\text{H}_5$ , tendo o TMS a substância de referência. Por conseguinte, foram obtidas as blindagens de H e C para cada

### Conclusões

Conclui-se que a combinação de ABP e EC se mostrou uma abordagem eficaz para promover uma aprendizagem mais significativa e contextualizada em uma disciplina de alta complexidade. Os resultados reforçam a importância de adotar metodologias ativas alinhadas ao novo paradigma educacional, capazes de desenvolver competências essenciais como autonomia, pensamento crítico e capacidade de aplicação do conhecimento em contextos reais.

### Referências

- [1] Lilian Bacich and José Moran. Active methodologies for innovative education: a theoretical-practical approach. Porto Alegre: Penso, 2018
- [2] Daniel das Chagas de Azevedo Ribeiro, Ágatha Lottermann Selbach, Daniele Prestes Daniel, and Camila Greff Passos. 2021.