



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

Centro Acadêmico do Agreste
Núcleo de Formação Docente
Curso de Química - Licenciatura



MARCIO MARCOS DA SILVA

**ESTUDO DE CASO PARA O ENSINO DE CINÉTICA QUÍMICA:
QUIMIOSSELETIVIDADE EM REAÇÕES DE OXIDAÇÃO
PROMOVIDAS POR COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO DO TIPO
OXO-DIPEROXO**

**Caruaru-PE
2017**

MARCIO MARCOS DA SILVA

**ESTUDO DE CASO PARA O ENSINO DE CINÉTICA QUÍMICA:
QUIMIOSSELETIVIDADE EM REAÇÕES DE OXIDAÇÃO
PROMOVIDAS POR COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO DO TIPO
OXO-DIPEROXO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Colegiado de Química-Licenciatura do Centro Acadêmico do Agreste da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Química.

**Orientadora: Profa. Dra. Juliana Angeiras Batista
da Silva**
**Co-Orientador: Prof. Dr. Marcus Vinicius Pereira
dos Santos**

**CARUARU
2017**

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Simone Xavier CRB/4 - 1242

S586e Silva, Marcio Marcos da.
Estudo de caso para o estudo de cinética química: quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo. / Marcio Marcos da Silva. – 2017.
63f. ; il. : 30 cm.

Orientadora: Juliana Angeiras Batista da Silva.
Coorientador: Marcus Vinícius Pereira dos Santos
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, licenciatura em Química, 2017.
Inclui Referências.

1. Química – Estudo e ensino. 2. Cinética química. 3. Estudo de casos. I. Silva, Juliana Angeiras Batista da (Orientadora). II. Santos, Marcus Vinícius Pereira dos (Coorientador). III. Título.

371.12 CDD (23. ed.)

UFPE (CAA 2017-428)



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE DO CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
COLEGIADO DO CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA**

FOLHA DE APROVAÇÃO DO TCC

MARCIO MARCOS DA SILVA

**“ESTUDO DE CASO PARA O ENSINO DE CINÉTICA QUÍMICA:
QUIMIOSSELETIVIDADE EM REAÇÕES DE OXIDAÇÃO PROMOVIDAS POR
COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO DO TIPO OXO-DIPEROXO”**

Relatório final, apresentado a Universidade Federal de Pernambuco, como parte das exigências para a obtenção do título de graduado em Química-Licenciatura.

Caruaru, 20 de Dezembro de 2017.

BANCA EXAMINADORA:

Profa. Dra. Juliana Angeiras Batista da Silva (NICEN-CAA)
(Orientadora)

Profa. Dra. Ana Paula Freitas da Silva (NICEN-CAA)
(Examinadora 1)

Profa. Dra. Ana Paula de Souza de Freitas (NFD-CAA)
(Examinadora 2)

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à minha família: Aos meus pais, o Sr. José Marcos da Silva e a Sra. Zuleide Tenorio da Silva e minha irmã Maíra Tainan da Silva, por me incentivar em cada etapa da minha vida acadêmica.

AGRADECIMENTOS

Agradeço priemiramente a Deus por me conceder paciência, força e perseverança durante cada conquista.

Agradeço aos meus pais, por todo o amor, o carinho, os conselhos e o apoio que me deram, e por serem o exemplo de pessoas que são, onde me fizeram ser o homem sou hoje. E a minha irmã, pelas risadas e por me descontrair em momentos de estresse.

Agradeço a minha namorada Francieli Dias, que sempre esteve ao meu lado mesmo antes de ser minha namorada, por está comigo em qualquer circunstância, pelo apoio, e pelas broncas em momentos de procrastinação.

Agradeço especialmente aos professores meus Juliana Angeiras e Marcus Vinícius, por todo o ensinamento que me proporcionaram, pelas experiências únicas vivenciadas na pesquisa e no curso, e por serem excelentes profissionais, obrigado por tudo.

Por fim, agradeço a todos os meus professores, que no decorrer do curso tornaram-se verdadeiros ídolos e exemplos de profissionais, a qual desejo me tornar.

RESUMO

O uso de metais de transição em reações de oxidação de uma variedade de substratos orgânicos é bastante vasto, e ainda podem resolver problemas antigos em síntese, tais como dificuldade de manuseio de agentes oxidantes e das condições severas para a realização das reações, produção de subprodutos, baixos rendimentos e seletividades, problemas ambientais etc. Em particular, as reações de oxidação promovidas por complexos do tipo oxo-diperoxo de metais de transição (Mo, W e Re) tem se mostrado bastante quimiosseletivas. Por exemplo, substratos orgânicos que contém grupos sulfeto e alquenos são oxidados seletivamente produzindo apenas sulfóxidos, mesmo embora os alquenos sejam suscetíveis à oxidação, visto que tais complexos foram primeiramente propostos para a oxidação de epóxidos. Além disso, a oxidação de tais substratos é moderada ao ponto de não ser registrada oxidações sucessivas para o nível sulfona, o que normalmente acontece com os agentes oxidantes utilizados nestas reações. Assim, motivados por tais sistemas, este trabalho de pesquisa buscou analisar quais as contribuições da Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC) na aprendizagem de cinética química dos discentes do curso de graduação em Química-Licenciatura, por meio do caso intitulado “Os medicamentos da minha avó”, que envolve a quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de metal de transição. Inicialmente foram analisadas as dificuldades enfrentadas pelos discentes na aprendizagem de cinética química e as dificuldades enfrentadas pelo professor no ensino de tal conteúdo. Os resultados mostram que a EEEC proposta promoveu tanto uma percepção por parte dos discentes de que a disciplina Físico-Química não se trata de uma disciplina de difícil compreensão, quanto o aumento da percepção quanto aos conteúdos de cinética química estarem presentes em seus dia a dia e, possivelmente, na atuação deles como profissional no mercado de trabalho. Além disso, quanto à estratégias diferenciadas de ensino, pode ser constatado um aumento do número de discentes que concordaram que a contextualização promove a aprendizagem dos conteúdos de cinética química e que a EEEC caso promove aprendizagem desses conteúdos. De modo geral, o total de acertos na escala Likert referente ao bloco de afirmações acerca dos conteúdos de cinética teve um crescimento de 114,29% em relação ao total de acertos antes do estudo do caso. Entretanto, observou-se que mesmo após um período de tempo relativamente curto após o término da disciplina de Físico-Química II, os estudantes não lembram ou ainda não compreendem conceitos básicos e apresentam dificuldades de aprender conceitos novos relativos ao conteúdo em questão e que, mesmo os estudantes avaliados, que estão no final do curso, a maioria deles ainda não possuem uma autonomia para a resolução de problemas. Assim, espera-se que esse trabalho possa contribuir para que as estratégias de ensino atualmente adotadas possam ser melhoradas ou que novas estratégias de ensino possam contribuir para melhorar tal cenário. Além disso, espera-se despertar o interesse dos licenciados que participaram da atividade para a utilização de metodologias como a Estratégia de Ensino Estudo de Caso, que pode promover uma aprendizagem mais efetiva.

Palavras-chave: Estudo de Casos. Ensino de Cinética Química. Quimiosseletividade.

ABSTRACT

The use of transition metals in oxidation reactions of a variety of organic substrates is quite extensive, and may still solve old problems in synthesis, such as difficulty in handling oxidizing agents and the harsh conditions for carrying out the reactions, production of by-products, low yields and selectivities, environmental problems, etc. In particular, oxidation reactions promoted by oxo-diperoxo type transition metal complexes (Mo, W and Re) have been shown to be highly chemoselectivity. For example, organic substrates containing sulfide group and alkenes are selectively oxidized to produce only sulfoxides, although alkenes are also susceptible to oxidation, since such complexes were first proposed for the oxidation of epoxides. In addition, the oxidation of such substrates is moderate to the point of not be registering of the next level of the oxidation, sulfone product, which normally happens with the oxidizing agents used in these reactions. Thus, motivated by such systems, this research aimed to analyze the contributions of the Teaching Strategy Case Study (TSCS) in the learning of kinetics chemistry of students of the undergraduate course in Chemistry, through the case entitled "My grandmother's medicines", which involves chemoselectivity in oxidation reactions promoted by oxo-diperoxo type coordination compounds of transition metal. Initially the difficulties faced by the students in the learning of kinetics chemistry and the difficulties faced by the teacher in the teaching of such content were analyzed. The results show that the proposed TSCS promoted both a perception on the part of the students that the Physical-Chemistry discipline is not hard to understand, as well as the increase in the perception regarding the contents of chemical kinetics are present in their day life and, possibly, in their performance as a professional. In addition, with regard to differentiated teaching strategies, we have observed an increase in the number of students who agreed that contextualization promotes the learning of chemical kinetics contents, and that the TSCS promotes learning of these contents. Overall, the total number of hits on the Likert scale for the block of statements about kinetics content grew by 114,29% in relation to the total of hits before the case study. However, it is still observed that even after a relatively short period of time after the end of the discipline of Physical Chemistry II, students do not remember or still do not understand basic concepts and present difficulties to learn new concepts related to the content in question and, even the evaluated students, who are at the end of the course, and most of them still do not have autonomy to solve problems. Thus, it is expected that this work can contribute to the improvement of the teaching strategies currently adopted or that new teaching strategies can contribute to improve this scenario. In addition, it is hoped to arouse the interest of the graduates who participated in the activity for the use of methodologies such as the Teaching Strategy Case Study, which can promote more effective learning.

Keywords: Cases Study. Chemical kinetics teaching. Chemoselectivity

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.	Representação geral de um perfil de reação: variação de energia potencial no decorrer da reação	25
Figura 2.	Representação dos Complexos de Mimuon	26
Figura 3.	Representação dos processos reacionais dos complexos de Oxo Diperoxo de Mo com os sete substratos	27
Figura 4.	Ilustração de um típico perfil da energia de reação da oxidação de substratos organosulfetos instaturados por complexos do tipo [MoO(O ₂) ₂ L] via mecanismo de Sharples.....	29
Figura 5.	Gráfico referente às respostas do primeiro bloco de afirmações da escala de Likert	38
Figura 6.	Gráfico referente às respostas do segundo bloco de afirmações da escala de Likert	39
Figura 7.	Gráfico referente às respostas do terceiro bloco de afirmações da escala de Likert	40
Figura 8.	Gráfico referente às respostas do quarto bloco de afirmações da escala de Likert	41
Figura 9.	Gráfico referente às respostas do primeiro bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.	46
Figura 10.	Gráfico referente às respostas do segundo bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.	47
Figura 11.	Gráfico referente às respostas do terceiro bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.	48
Figura 12.	Gráfico referente às respostas do quarto bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.	49

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Resultados obtidos com o nível de teoria B3LYP/6-311+G(2df,2p)/dhf-SVP. Em parênteses, estão as diferenças obtidas com relação aos valores obtidos por Sensato et al. (2005) utilizando outro nível de cálculo.....	28
Tabela 2	1º Bloco de afirmações da escala de Likert	37
Tabela 3	2º Bloco de afirmações da escala de Likert	38
Tabela 4	3º Bloco de afirmações da escala de Likert	39
Tabela 5	4º Bloco de afirmações da escala de Likert	41
Tabela 6	Análise das habilidades presentes nas resoluções casos.....	45
Tabela 7	Quantitativo de acertos referente aos níveis de concordância na escala Likert, antes e após a aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC).....	50

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CAA - Centro Acadêmico do Agreste

CRI - Coordenadas de Reação Intrínseca (*intrinsic reaction coordinate* – IRC)

DMF - Dimetilformamida.

E_A – Energia de Ativação

EC - Estudo de Casos.

EEEC - Estratégia de Ensino Estudo de Casos.

EPEC - Estratégia de Pesquisa Estudo de Casos.

GQCA - Grupo de Química Computacional do Agreste

HMPA - Hexametilfosforamida.

HMPT - Hexametilfosfotriamida.

Mol – Quantidade de Matéria

ET1 – Estado de Transição - 1 (numeração de 1–7)

UFPE - Universidade Federal de Pernambuco

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	12
2	OBJETIVOS.....	15
	2.1 Objetivo Geral.....	15
	2.2 Objetivos Específicos.....	15
3	REVISÃO DE LITERATURA.....	16
	3.1 Ensino de Química.....	16
	3.2 Estratégia de Ensino Estudo de Casos.....	17
	3.3 Fundamentos da Cinética Química.....	20
	3.3.1 Cinética Química.....	20
	3.3.2 Lei de Velocidade Integradas.....	21
	3.3.3 Temperatura	23
	3.3.5 Teoria do Estado de Transição	24
	3.4 O problema: Quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de metal de transição.....	25
4	METODOLOGIA.....	30
	4.1 Tipo de Pesquisa	30
	4.2 O Campo e os Sujeitos	30
	4.3 Coleta de Dados	30
	4.4 O caso: Os medicamentos da minha avó	31
	4.5 A elaboração do caso que foi utilizado na EEEC	32
	4.6 Descrição da Pesquisa e Análise dos Resultados Obtidos.....	33
5	RESULTADOS E DISCUSÃO.....	35
	5.1 Análises do questionário respondido por professores.....	35
	5.2 Pré-análise: Antes da aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso	37
	5.3 Análise da forma de aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso.	44
	5.4 Pós-análise: Depois da aplicação da Estratégia de Ensino de Estudo de Caso.....	46
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	52
	REFERÊNCIAS	53
	APÊNDICE A – Questionário – Professores.....	56
	APÊNDICE B – Questionário – Alunos	57
	APÊNDICE C – Estudo do Caso: Os medicamentos da minha avó	58
	APÊNDICE D – Anotações e Observações	63

1 INTRODUÇÃO

Em vários momentos vivenciados no decorrer do curso de Química-Licenciatura, principalmente em práticas de estágios e aulas, pôde-se perceber que o ensino de ciências, em particular o ensino de química, vem apresentando uma defasagem crescente nos anos iniciais da rede básica de ensino, e que, assim, acabam refletindo no ensino superior. Um dos principais fatores que contribuem para isso é o fato de que as metodologias utilizadas estabelecem uma relação entre os professores e alunos meramente por meio de transmissão de conhecimento e absorção dos mesmos, para depois reproduzir. A relação mencionada anteriormente nos remete à relação descrita por Freire, em que, em qualquer nível de ensino, o professor encontra-se atuando como um narrador e os alunos como simples ouvintes (FREIRE, 2005).

Segundo Freire, esse tipo de relação entre o professor e o aluno, concretiza uma concepção de educação “bancária”, como se o conhecimento fosse algo a ser depositado, e alunos, por sua vez, são apenas recipientes a receber os depósitos. Na maioria dos casos isso resulta em um ensino memorizador, como se o aluno fosse capaz de contribuir para sua própria aprendizagem, e que o professor é a única fonte de conhecimento, sendo incapaz de aprender com seus alunos (2005).

Com essa concepção de educação bancária e com utilização de metodologias focadas na memorização dos alunos, os conceitos de química e de outras ciências ficam cada vez mais abstratos, nos quais, por exemplo, a utilização de fórmulas para cálculos, que leva os alunos à terem uma visão de que esses conceitos nunca serão usados por eles. Diante desses obstáculos, o profissional da educação precisa inovar e buscar incluir os conceitos por meio de exemplos práticos. Uma forma de se fazer isso é por meio da utilização da Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC).

Segundo Sá, Francisco e Queiroz (2007) há um crescimento na utilização da Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC), para o ensino de ciências, antes restrita a outras áreas, tal como medicina, direito e administração. Essa estratégia tem se demonstrado como uma prática educativa que proporciona um grande envolvimento dos discentes, com o cotidiano e com a parte conceitual das disciplinas. Ainda segundo as autoras, até o ano de 2007 houve um número significativo de trabalhos publicados em revistas internacionais, voltados para o ensino de ciências, como por exemplo, o *Journal of Chemical Education*, que criou uma seção exclusiva voltada para o assunto, que foi chamada de *Teaching With Problems and Case Studie*, pois na época de sua criação existiam poucos casos elaborados,

assim o principal objetivo era propagar a utilização da EEEEC em toda a comunidade (SÁ et al., 2007)

Ao longo da minha formação como Químico-Licenciado, foi desenvolvido projeto de pesquisa científica, realizado sob orientação dos professores orientadores desse trabalho, cujo foco foi a quimiosseletividade de compostos de coordenação oxo-diperoxo de Molibdênio em reações de oxidação de sulfetos. O desenvolvimento de tal projeto de iniciação científica proporcionou uma compreensão geral e aplicada de conteúdos de cinética química, enriquecendo o conhecimento em tal área. Além disso, conteúdos de catálise e química orgânica também foram estudados, visto que o tema da pesquisa permeia também essas subáreas da química.

Outros fatos, tais como, o alto nível de abstração, dificuldades associadas à resolução de problemas que envolvam matemática, falta de contextualização e de conexão com outros conteúdos da química, vivenciadas por mim e frequentemente relatadas pela maioria dos discentes do curso de química relativas mostram uma grande complexidade das problemáticas de aprendizado que o docente se depara.

Assim, motivados pelos relatos acima, este trabalho propôs um estudo de caso que associa química inorgânica, catálise e química orgânica para a compreensão da cinética química, intitulado “Quimiosseletividade em Reações de Oxidação Promovidas por Compostos de Coordenação do Tipo Oxo-Diperoxo”.

As reações de oxidação promovidas por complexos do tipo oxo-diperoxo de metais de transição (Molibdênio – Mo, Tungstênio – W e Rênio – Re) tem se mostrado bastante quimiosseletivas. Como exemplo, podemos citar os compostos orgânicos que apresentam sulfeto e alqueno, na mesma molécula, que são oxidados seletivamente por complexos deste tipo e produzem apenas sulfóxidos, mesmo embora os alquenos também sejam suscetíveis à oxidação. Contudo, a oxidação de tais substratos é moderada ao ponto de não ser registrada oxidações sucessivas para o nível sulfona, o que normalmente acontece quando se utiliza a maioria dos agentes oxidantes normalmente utilizados para esse fim.

Assim, espera-se, com o desenvolvimento deste trabalho, melhorar a aprendizagem de cinética química de forma contextualizada com outras subáreas da química, complementando de forma aplicada a abordagem dada em sala de aula no estudo de cinética química, visto que as reações abordadas no estudo de caso em questão são de fundamental importância para, entre outros, a síntese de medicamentos. Além disso, espera-se despertar nos discentes o interesse para o conhecimento e para a participação em projetos de pesquisa desenvolvidos nesta instituição, o que poderá contribuir para a melhoria de sua formação como profissional e contribuir para o desenvolvimento da ciência no País.

No próximo capítulo serão descritos os objetivos desse trabalho. O capítulo 3 consta de uma breve fundamentação teórica, que aborda as principais dificuldades no processo de ensino e aprendizagem de química, a estratégia de ensino estudo de caso, os conceitos de cinética química necessários para o entendimento do estudo de caso e a descrição detalhada do problema a ser abordado no estudo de caso: A quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo. No capítulo 4 está descrita a metodologia do trabalho. No capítulo 5, os principais resultados são apresentados e discutidos. Por fim, no capítulo 6, estão resumidas as principais conclusões desse trabalho e as perspectivas.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Analisar quais as contribuições da Estratégia de Ensino Estudo de Caso na aprendizagem de cinética química dos discentes em um curso de graduação em Química-Licenciatura.

2.2 Objetivos Específicos

2.2.1 Identificar as principais dificuldades enfrentadas pelos discentes na compreensão do conteúdo de Cinética Química.

2.2.2 Propor o estudo de caso sobre a Quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de metal de transição para o estudo do conteúdo de Cinética Química.

2.2.3 Verificar como esta estratégia contribui para aprendizagem de tal conteúdo.

3 REVISÃO DE LITERATURA

3.1 Ensino de Química

A ciência está diretamente relacionada com as vidas de cada um de nós. Embora muitos acreditem ou pensem que ela não passa dos livros ou só interferem nas vidas de quem trabalha fazendo ciências, o conhecimento científico é de fundamental importância para uma vida em sociedade, pois, segunda Conferência Mundial sobre a Ciência para o século XXI (1999), a alfabetização científica é necessária ao de ponto de “[...] melhorar a participação dos cidadãos na tomada de decisões relativas à aplicação dos novos conhecimentos” (CONFERÊNCIA MUNDIAL SOBRE LA CIÊNCIA, 1999).

Porém, o ensino de ciências e, em particular, o ensino de química está marcado no decorrer dos tempos como algo de difícil entendimento e aprendizagem. Esse fato é compreensível, pois as práticas educacionais estão voltadas para a memorização de fórmulas e a resoluções de equações, e, assim, torna o processo de ensino e aprendizagem complexos (SCHNETZLER, 2004). Segundo Driver e colaboradores (1999), o ensino de ciências é ou deveria ser a introdução dos alunos numa forma de interpretar o mundo e suas inquietações, um processo que envolve relações pessoais e sociais (DRIVER et al., 1999, p.36).

Há um crescimento importante nos últimos anos nas pesquisas relacionadas ao ensino de química, as quais demonstram um crescente interesse dos professores da área de ciências quanto ao ensino e aprendizagem de conceitos químicos, quanto à forma na qual é transmitido o conhecimento para os alunos diante da velocidade do surgimento das inovações científicas e tecnológicas no decorrer dos tempos. (RODRIGUES; DA-SILVA; QUADROS, p. 1840-1845, 2011).

Assim, as propostas de ensino devem ser tais que promovam a valorização da aprendizagem do indivíduo, que não valorize a mera memorização de conteúdos. Ausubel (2003) acredita em uma aprendizagem significativa, a qual deve criar uma relação entre o novo material a ser aprendido com o conhecimento teórico, mas que não seja de forma aleatória e nem exatamente igual aos conceitos estabelecidos. Assim, o conhecimento deve ser visto como um conjunto de ideias relevantes que aproxime o aluno à aprendizagem mais efetiva, com uma linguagem sinônima e atual, sem mesmo precisar do uso de um vocabulário antiquado (AUSUBEL, 2003), que proporcione uma aprendizagem mais efetiva para os alunos.

A disciplina de físico-química relaciona conceitos teóricos muitas vezes abstratos e cálculos matemáticos, o que a torna complexa para a maioria dos estudantes. Em particular, a

cinética química, que trata do estudo das velocidades de reação, muitas vezes é ensinada a partir de conceitos e teorias sem que haja uma contextualização, com aulas meramente expositivas, desconsiderando o conhecimento já existente dos estudantes e seu cotidiano, tornando algo desinteressante e desmotivador para os mesmos (LIMA et al., 2000).

Assim, na tentativa de buscar aperfeiçoar suas práticas educacionais a fim de proporcionar aos seus alunos uma experiência mais agradável e que torne o ensino de ciências de fácil compreensão, várias metodologias diferenciadas, cujo foco é sempre a aprendizagem do aluno, tem sido propostas. Uma delas, a Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC), é o foco deste trabalho e está brevemente discutida na seção seguinte.

3.2 Estratégia de Ensino Estudo de Casos

A busca pela construção de conhecimento significativo dos alunos, sejam eles do nível do Ensino fundamental, Médio ou Superior, é um assunto sempre recorrente em temas de pesquisas na área de Educação. Entretanto, nos últimos anos, o ensino de ciências tem sofrido modificações para atender às necessidades de aprendizado voltadas para a realidade dos alunos, para que os mesmos possam correlacionar suas vivências em sala de aula com o cotidiano.

Um método que possibilita relacionar os conhecimentos construídos com casos concretos, em ambientes formais ou informais de ensino, é a Estratégia de Ensino Estudo de Casos (EEEC), ou apenas Estudo de Casos. O Estudo de Casos surgiu na Escola de Medicina da Universidade de McMaster, Ontário, e, por muito tempo, ficou restrito às atividades dos profissionais do curso de medicina, pois possibilitava ao aluno vivenciar seus conhecimentos construídos com as aulas teóricas, com problemas medicinais reais (SÁ et al., 2007).

A Estratégia de Ensino Estudo de Casos tem como objetivo colocar o aluno numa situação em que o mesmo deve se familiarizar com o caso proposto, pelo professor ou pelo palestrante, e seguir suas orientações a fim de tomar decisões, sugerindo hipóteses que possam solucionar esses casos, levando-o a colocar em prática tudo aquilo que foi aprendido no decorrer da construção de seus conhecimentos, em aulas expositivas dos conceitos (SÁ et al., 2007).

O papel do professor na EEEEC é de orientador, sendo de grande importância para que o trabalho exercido pelos alunos tenha êxito, pois o professor/orientador guia os passos dos alunos para que os mesmos não percam o foco da estratégia. A cada decisão tomada dos alunos, o professor/orientador acompanha e faz suas observações a fim de investigar se o

objetivo está sendo alcançado, caso contrário, ele levanta outras questões para que os alunos criem mais hipóteses e voltem a tomar novas decisões coerentes com os assuntos abordados.

Há mais de um tipo de Estudo de Casos. Entretanto, deve-se diferenciar Estratégia de Ensino Estudo de Casos e a Estratégia de Pesquisa Estudo de Caso. Esse último é utilizado quando o foco do estudo é a pesquisa, e não a prática de ensino, cuja motivação para as pesquisas deve-se estar em responder pelo menos duas perguntas básicas: “Como?” e “Por quê?” como diz Robert K. Yin “faz-se um questionamento do tipo “como” ou “por quê” sobre um conjunto contemporâneo de acontecimentos, sobre o qual o pesquisador tem pouco ou nenhum controle.” (Yin, 2006, p. 28). Um estudo de um fenômeno ocorrido em uma determinada região ou ocasião, é um exemplo de Estratégia de Pesquisa Estudo de Caso. Enquanto, a Estratégia de Ensino Estudo de Casos diferencia-se do Estudo de casos como prática de pesquisa, pois seu foco é a construção do conhecimento do aluno através de suas inquietações e de suas tentativas de resolução dos casos, quando são levantados os questionamentos do professor/orientador. Assim, a principal diferença entre os dois tipos de casos é que um tem como objetivo a resolução do caso sem preocupação de como o indivíduo está se relacionando com os obstáculos, apenas busca as respostas para sua inquietação, enquanto o outro tipo se preocupa com o sujeito que está solucionando o caso, como enfrenta cada obstáculo proposto e como a teoria se relaciona com a vivência de cada um deles.

A Estratégia de Ensino Estudo de Casos, segundo Herreid (1998), pode ser classificada de acordo com a forma de aplicação:

- De atribuição individual: na qual o aluno se encontra sozinho frente ao caso, tendo que resolver e, posteriormente, deverá elaborar uma estória para explicar como chegou à resolução.
- De aula expositiva: neste formato, o caso é apresentado pelo professor ou palestrante, em forma de história ou uma estória, na qual o professor começa a questionar pontos da narrativa, a fim de levantar argumentos, permitindo que diálogos sejam feitos e debatidos entre os alunos e professor.
- De discussão: esse formato é o mais usado para solucionar casos e são usados principalmente em empresas e em cursos de direito. Nele é apresentado um caso em forma de dilema, no qual, após apresentação, uma decisão deve ser tomada. Os alunos são questionados quanto às suas sugestões e perspectivas para a resolução do caso.
- De pequeno grupo: inicialmente os alunos são distribuídos em grupos pequenos. O professor, então, entrega o caso ao grupo, que deverá estar situado no contexto social, profissional ou educacional em que os mesmos estão

inseridos. A resolução do caso não está direcionada apenas a um pequeno grupo, mas com as contribuições de cada grupo, nos quais eles buscam a resolução na literatura, em aulas teóricas e no compartilhamento de informações e sugestões. O papel do professor é de facilitador durante as discussões e, portanto, ele deixa de ser a única fonte de informação dos alunos.

Desde o seu surgimento na Universidade de McMaster, a aplicação da EEEEC cresceu e mostrou ser uma ferramenta confiável para sua aplicação no ensino, demonstrando também ser possível cessar o individualismo que ocorre nos currículos dos cursos de graduação em química e incentivar a autonomia dos alunos (SÁ et al., 2007).

Na literatura constam trabalhos EEEEC relacionados com o ensino de química. Em particular, o trabalho publicado por Sá e colaboradores (2007) apresentam resultados significativos em relação à aplicação da estratégia. As autoras apresentaram uma análise de casos elaborados para o ensino de química voltado para o ensino superior.

Também merecem ser destacados os trabalhos voltados para o ensino médio de áreas específicas da química. Por exemplo, Macedo e colaboradores (2012) aplicaram a EEEEC para alunos do 2º ano do ensino médio, abordando o conteúdo de cinética química, e o mesmo mostrou pontos positivos em relação à prática: os alunos mostraram-se capazes de solucionar problemas, e a EEEEC possibilitou a introdução de conteúdos ao mesmo tempo em que o professor estimulou os alunos a tomarem decisões, a trabalhar em grupo, e a apresentar seus resultados de forma oral e escrita (MACEDO et al., 2012).

Outro exemplo é o trabalho intitulado “SOS Mogi-Guaçu: contribuições de um Estudo de Caso para a educação química no nível médio” cidadania (SILVA; OLIVEIRA; QUEIROZ, 2011), no qual as contribuições da EEEEC para o ensino de química voltada para uma educação para a cidadania e para a sustentabilidade levou os alunos a buscarem informações e mais conhecimento em outros temas como poluição, saúde, derramamento de esgotos, dentre outros. Segundo a análise dos autores, o estudo de casos possibilitou o desenvolvimento para a tomada de decisões e o exercício da cidadania.

Outro trabalho que buscou adotar a Estratégia de Ensino Estudo de Casos no ensino médio foi o relatado por Freitas-Reis e Farias (2015), cuja aplicação do estudo de caso em química estava entrelaçada com um tema social e de saúde pública: o uso de aditivos alimentares. Foi possível perceber o envolvimento dos estudantes com conhecimentos químicos nas tentativas de solucionar a problemática, sendo uma proposta de ensino aberta, que aumentou o nível de aprendizagem em sala de aula (FREITAS-REIS; FARIAS, 2015).

Os trabalhos mencionados acima utilizaram a EEEEC para promover uma aprendizagem mais efetiva para determinados conceitos. Tal estratégia se demonstra como uma boa ferramenta para ensino e aprendizagem de química. Assim a EEEEC pode ser uma alternativa para propor o ensinamento do conceito de cinética química.

3.3 Fundamentos da Cinética Química

Desde o início de estudos químicos envolvendo moléculas, sabe-se que uma dada molécula precisa se chocar com outra para que haja uma reação química. Durante o choque, ligações são quebradas e formadas, levando à formação dos produtos. O papel da cinética química é fornecer a cinética da reação, ou seja, fornecer o mecanismo no qual a reação se processa, sua velocidade e os fatores que a influenciam (BALL, D. W, 2014). Nesta seção serão descritos conceitos fundamentais ao estudo da cinética química.

3.3.1 Cinética Química

A cinética química permite a previsão da composição de uma mistura reacional em qualquer momento, em nível macroscópico, e em nível microscópico (atômico e molecular), permite a determinação da natureza e mecanismos das reações.

A velocidade de uma reação química é um dos dados mais importantes da cinética química. Ela informa qual a taxa temporal na qual estão sendo consumidos os reagentes ou formados os produtos. Entretanto, a velocidade de uma reação química nem sempre é fácil de ser determinada, embora muitas vezes ela possa ser determinada experimentalmente (BALL, D. W., 2014).

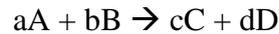
Como a velocidade de uma reação é a variação da quantidade de matéria (normalmente expressa em termos da concentração dada em mol/L) em um determinado intervalo de tempo, pode-se expressá-la da seguinte forma:

$$v_{m\acute{e}dia} = -\frac{\Delta[R]}{\Delta t} \quad \text{Eq. 01}$$

$$v_{m\acute{e}dia} = \frac{\Delta[P]}{\Delta t} ,$$

em que *R* e *P* representam espécies reagentes ou produtos, respectivamente.

Para reações químicas balanceadas, a relação entre as velocidades de consumo dos reagentes e de formação dos produtos de uma reação hipotética,



é dada por

$$v_{\text{média da reação}} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}. \quad \text{Eq. 02}$$

No limite de variações infinitesimais de concentração e de tempo, deve-se usar o diferencial (d) em vez do Δ :

$$v \text{ da reação} = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}. \quad \text{Eq. 03}$$

Para a maioria das reações, as velocidades estão relacionadas com a quantidade inicial de matéria envolvida, cuja relação entre a velocidade e concentração dos reagentes é dada por expressões do tipo (BALL, D. W., 2014).

$$\text{Velocidade} \propto [A]^m \cdot [B]^n, \quad \text{Eq. 04}$$

cujos expoentes m e n são ajustados a partir de dados experimentais e são chamados de *ordens* da reação com relação àquele determinado reagente. A igualdade é dada a partir da introdução de uma constante de proporcionalidade, k, a constante de velocidade da reação, que independe da concentração dos reagentes, mas depende da temperatura. Assim, a equação que relaciona a velocidade com as concentrações dessas espécies é chamada de lei de velocidade e é dada, genericamente, por:

$$\text{Velocidade} = k \cdot [A]^m \cdot [B]^n \quad \text{Eq. 05}$$

As ordens podem ser números inteiros, negativos, zero ou frações, e a soma total das ordens envolvidas em uma lei de velocidade, é chamada de “ordem global da reação”.

3.3.2 Leis de Velocidade Integradas

A lei de velocidade integrada de uma reação permite obter como a concentração de determinada espécie varia com o tempo, sendo útil, por exemplo, na determinação da

quantidade de medicamento existente após certo tempo de reação, quanto de uma determinada substância pode ser produzida em uma hora de processo industrial, do tempo que um determinado poluente irá decair. O decaimento radioativo de núcleos, por exemplo, são processos de 1º ordem (BALL, D. W., 2014).

Cada reação possui uma lei de velocidade que está relacionada com seu mecanismo de reação particular. A lei de velocidade mais simples é aquela que não depende da concentração de nenhuma das espécies reagentes, ou seja, de ordem zero, contanto que estejam presentes no meio reacional,

$$\text{Velocidade} = k \quad \text{Eq. 06}$$

Um exemplo de reação de cinética de ordem zero é a reação de decomposição da amônia, na presença de fios de platina aquecidos,

$$\text{velocidade de consumo de } \text{NH}_3 = k \quad \text{Eq. 07}$$

$$-\frac{d[\text{NH}_3]}{dt} = k$$

$$\begin{aligned} -([\text{NH}_3] - [\text{NH}_3]_0) &= kt \\ [\text{NH}_3] &= [\text{NH}_3]_0 - kt \end{aligned}$$

ou seja, a concentração de amônia $[\text{NH}_3]$ em um tempo qualquer decai linearmente com tempo.

As reações que seguem uma cinética de primeira ordem, possuem decaimento exponencial. Exemplo de reação desse tipo é a reação de decomposição do pentóxido de dinitrogênio em dióxido de nitrogênio e gás oxigênio,

$$\text{velocidade de consumo de } [\text{N}_2\text{O}_5] = k[\text{N}_2\text{O}_5] \quad \text{Eq. 08}$$

$$-\frac{d[\text{N}_2\text{O}_5]}{dt} = k[\text{N}_2\text{O}_5]$$

$$\int_{[\text{A}]_0}^{[\text{A}]_t} \frac{d[\text{N}_2\text{O}_5]}{[\text{N}_2\text{O}_5]} = - \int_{t=0}^t k dt$$

$$\ln[\text{N}_2\text{O}_5]_t - \ln[\text{N}_2\text{O}_5]_0 = -kt$$

$$\ln[\text{N}_2\text{O}_5]_t = \ln[\text{N}_2\text{O}_5]_0 - kt$$

$$\ln \frac{[\text{N}_2\text{O}_5]_t}{[\text{N}_2\text{O}_5]_0} = -kt$$

que na forma exponencial é dada por

$$\begin{aligned} \ln \frac{[\text{N}_2\text{O}_5]_t}{[\text{N}_2\text{O}_5]_0} &= -kt && \text{Eq. 09} \\ \frac{[\text{N}_2\text{O}_5]_t}{[\text{N}_2\text{O}_5]_0} &= e^{-kt} \\ [\text{N}_2\text{O}_5]_t &= [\text{N}_2\text{O}_5]_0 e^{-kt} \end{aligned}$$

Muitos processos de metabólicos do corpo humano e processos radioativos espontâneos são de primeira ordem (BALL, D. W., 2014).

Alguns fatores contribuem para cinética química das reações, como superfície de contato, pressão, concentração de reagentes, incidência de luz, catalisadores e temperatura. Entretanto, neste trabalho, será destacada a seguir apenas a influência da temperatura.

3.3.3 Temperatura

A temperatura é um dos fatores determinantes para a variação da velocidade das reações químicas. Isso se dá pelo fato de que para haver propriamente uma reação, é necessário que haja choques e transferências de energia entre as partículas interagentes, proporcionados por meio da energia cinética das partículas. Assim, quanto maior for a temperatura, proporcionalmente mais calor será transferido, e maior será a agitação das partículas interagentes (MORTIMER; AMARAL, 1998).

Qualitativamente, para a maioria das reações, o aumento da temperatura aumenta a velocidade da reação. Por isso que os alimentos são cozidos ou refrigerados. Svante Arrhenius em 1889, sugeriu que a relação entre temperatura e a constante de velocidade de reação (k) era dada por

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT} \quad \text{Eq. 10}$$

ou, na forma exponencial,

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}} \quad \text{Eq. 11}$$

em que A (fator pré-exponencial) e E_a (energia de ativação) são parâmetros de Arrhenius. Na interpretação de Arrhenius, uma colisão binária é necessária para que ocorra uma reação química. Entretanto, apenas uma fração das partículas envolvidas em tal colisão leva à reação química. Essas partículas são aquelas que possuem energia acima da energia mínima necessária, ou seja, a energia de ativação. Esses parâmetros podem ser determinados experimentalmente ou por meio, por exemplo, da teoria do estado de transição, a ser brevemente discutida a seguir.

Reações que fornecem uma linha reta quando $\ln k$ é plotado versus $1/T$ são ditas que tem um comportamento de Arrhenius. Uma ampla faixa de reações, não apenas reações em fase gasosa, mostram tal comportamento.

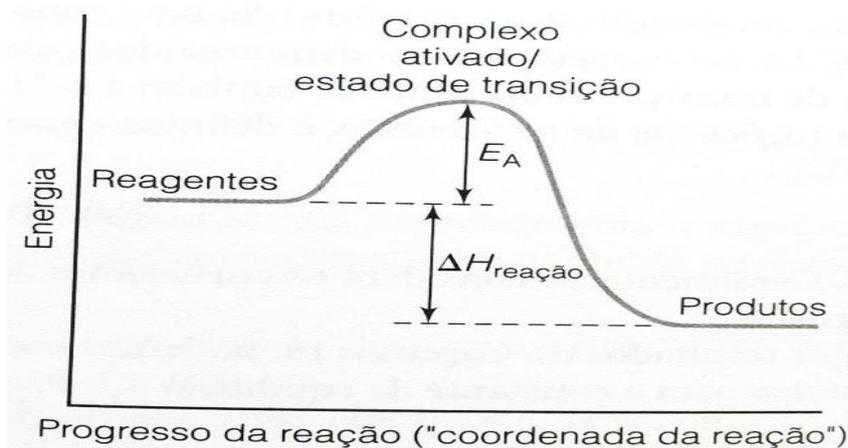
3.3.5 Teoria do Estado de Transição

A teoria mais geral que a teoria das colisões é a teoria do estado de transição (também conhecida como teoria do complexo ativado). Esta teoria tem a vantagem sobre a teoria das colisões, pois sugere uma forma de calcular a constante de velocidade mesmo em condições de impedimento estérico significativo.

A teoria do estado de transição parte do pressuposto que duas moléculas se aproximam uma da outra e se distorcem. Assim, a aproximação deve ser próxima o suficiente para afetar cada uma. Na fase gás, esse “encontro” ou “distorção” é equivalente à “colisão” na teoria das colisões. Em solução, é uma caminhada em zigue zague de “puxa-empura” entre as moléculas de solvente e tal distorção deve ocorrer se a aproximação e o “empurrão” das moléculas de solvente forem suficientes. Neste encontro, as moléculas não são imediatamente separadas após esse evento, mas resulta na formação de um complexo ativado ou estado de transição, que pode levar aos produtos ou aos reagentes não modificados (BALL, D. W., 2014).

No estado de transição, as ligações químicas, principalmente aquelas que serão quebradas para a formação dos produtos, estão mais distendidas e enfraquecidas e as novas ligações parcialmente formadas. A energia de ativação, nesta teoria, é uma medida da energia do complexo ativado em relação aos reagentes. A Figura 1 mostra como varia a energia potencial ao longo de uma coordenada de reação, desde quando os reagentes se “encontram”, formam o complexo ativado e levam à formação dos produtos. Vale ressaltar que a energia potencial se origina da posição relativa dos reagentes mais do que de suas velocidades, mas devendo ter energia suficiente para ultrapassar a barreira de energia potencial, ou energia de ativação, que leva à formação dos produtos.

Figura 1. Representação geral de um perfil de reação: variação da energia potencial no decorrer da reação.



Fonte: (BALL, D. W., 2014)

Como na teoria das colisões, a taxa da reação depende da taxa na qual os reagentes podem passar pelo topo da barreira e formar o complexo ativado. A expressão para a constante de velocidade obtida pela teoria do estado de transição é similar às equações 10 e 11 (Equação de Arrhenius).

Esta teoria é bastante útil e simples de utilizar, desde que conheçamos as geometrias dos reagentes e do estado de transição, suas frequências vibracionais e energia de ativação, que podem ser obtidos por programas de química computacional, dependendo do tamanho do sistema e da exatidão desejada. Além disso, a seletividade de uma reação pode ser modelada melhorando o rendimento de um produto específico, se for conhecido como o estado de transição pode ser afetado para obter o produto desejado. Assim, essa teoria foi escolhida para o estudo da quimiosseletividade de complexos oxo-diperoxo de molibdênio em reações de oxidação de sulfetos, visto que os produtos formados em tais reações indicam controle cinético.

3.4 O problema: Quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de metal de transição.

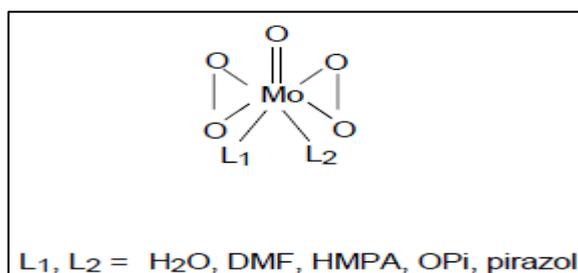
Na química é comum falar ou ouvir falar em quimiosseletividade para designar quando um determinado elemento químico, grupo funcional ou molécula, tem uma capacidade seletiva em reagir com outros elementos, grupos funcionais ou molécula específica, por causa de suas características físico-químicas.

O interesse de utilizar os complexos de metais de transição nas reações de oxidação de sulfetos como oxidantes moderados, seletivos e “verdes” vem aumentando. Um dos metais de

transição que vem chamando a atenção de muitos pesquisadores é o Molibdênio (Mo), visto que este metal tem mostrado propriedades mais oxidativas (BATIGALHIA et al., 2004).

O Molibdênio é o elemento que ocupa o 5º período e o grupo 6 da tabela periódica. Assim como os outros elementos deste grupo, possui vários estados de valência, mas o estado de maior interesse é o +6, visto que é a forma mais estável do metal e por ele possuir a camada “d” vazia, possibilitando-o formar complexos com elementos doadores de elétrons, como por exemplo, o oxigênio e o nitrogênio. Dentre os complexos com atividade oxidante, destacam-se os complexos do tipo oxo-diperoxo de Molibdênio, $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}_1\text{L}_2]$ (Figura 2), visto que esses complexos são oxidantes moderados, apresentam rendimentos mais elevados e condições mais brandas de manuseio e de aplicação em reações que os procedimentos mais tradicionais, minimizam a produção de subprodutos, são seletivos e “verdes” (CARVALHO et al., 2017). Comumente são encontrados complexos deste tipo coordenados com ligantes (L) básicos, tais como HMPA (Hexametilfosforamida), DMF (Dimetilformamida), piridina, N-óxido de piridina, HMPT (Hexametilfosfotriamida), pirazol e água, conhecidos como complexos de Mimoun (BATIGALHIA et al., 2004).

Figura 2. Representação dos Complexos de Mimoun



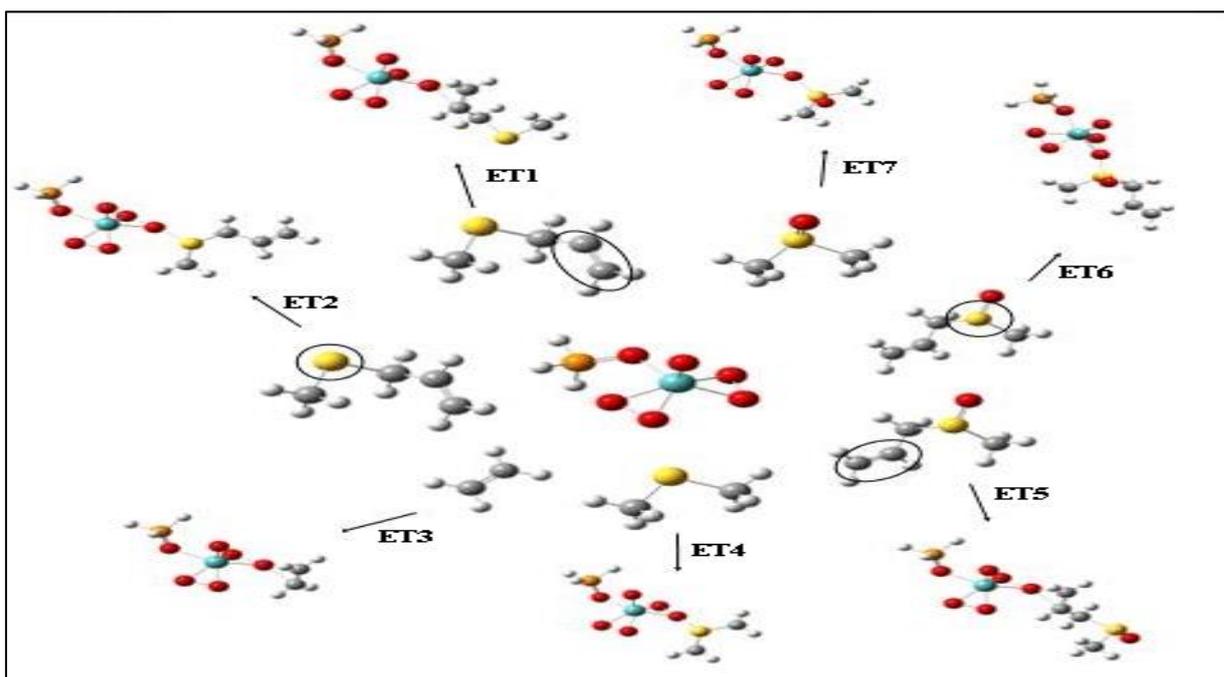
Fonte: (Batigalhia et al., 2004)

Os complexos oxo-diperoxo de Molibdênio vem sendo utilizados para oxidar seletivamente sulfetos a sulfóxidos, sem a formação de sulfonas (próximo nível de oxidação destes produtos) (SENSATO et al., 2005). Em um trabalho utilizando métodos de Química Computacional publicado por Fabrício Sensato e colaboradores (2005), foi observado que os complexos do tipo oxo-diperoxo de Molibdênio apresentam quimiosseletividade em reações de oxidação em direção ao enxofre, contribuindo para formação de sulfóxidos. Vale ressaltar que mesmo embora tais substratos apresentem grupos funcionais como alquenos, que também são bastante suscetíveis à oxidação, visto que os complexos de Mimoun foram propostos inicialmente para tal, a reação ainda foi seletiva à oxidação do grupo sulfeto, fato também observado experimentalmente (BATIGALHIA et al., 2004).

Estudos realizados pelo Grupo de Química Computacional do Agreste (GQCA) da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE) no campus acadêmico do Agreste (CAA), cujo proponente deste projeto de pesquisa é membro, mostram que compostos de coordenação desse tipo são quimiosseletivos frente à uma variedade de substratos orgânicos, mesmo com o uso de diferentes metais de transição, tais como Molibdênio, Tungstênio, e Rênio.

Os métodos de estrutura eletrônica podem ser úteis para entender o comportamento da transferência de oxigênio em reações de oxidação e fornecer informações relevantes para a otimização racional de tais processos. No estudo de caso, os dados obtidos na investigação da oxidação de vários substratos, que possuem grupos suscetíveis à oxidação, tal como os grupos sulfeto, alqueno (dupla ligação) e sulfóxido, foram discutidos com base na quimiosseletividade do agentes oxidante $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{OPH}_3)]$ (Tabela 1), nos quais foram investigados 7 estados de transição (Figura 3). Todos os cálculos foram realizados com o funcional da densidade B3LYP e os conjuntos de base 6-311+G(2df,2p) para todos os átomos, exceto para o Molibdênio, que foi utilizado o conjunto de base e pseudo potencial de caroço dhf-SVP. Todos os cálculos foram realizados com o programa Gaussian 09 (Rev. D.01). As análises de coordenadas de reação intrínseca (*intrinsic reaction coordinate – IRC*) foram realizadas para garantir que o estado de transição (ET) conectava os reagentes e produtos em questão. Todas as estruturas do ET foram caracterizadas por suas matrizes Hessianas.

Figura 3. Representação das reações de oxidação dos complexos oxodiperoxo de molibdênio frente ao metilvinil-sulfeto (ET1 – oxidação à dupla ligação e ET2 – oxidação do sulfeto), eteno (ET3), dimetil-sulfeto (ET4), metilvinil-sulfóxido (ET5 – oxidação à dupla ligação e ET6 – oxidação do sulfóxido) e dimetil-sulfóxido (ET7).



Fonte: O autor

Para cada reação investigada, a oxidação foi promovida pelo oxigênio peróxido, de acordo com dados da literatura (SENSATO et al., 2005). As reações que passaram pela formação dos estados de transição ET1, ET3 e ET5, o ataque ocorreu na dupla ligação dos substratos, formando, portanto, os respectivos produtos epóxidos; as reações que passaram pelo ET2 e ET4, o ataque ocorre no enxofre, formando os respectivos produtos sulfóxidos; por fim, as reações que se processaram via ET6 e ET7, os grupos sulfetos sofreram oxidação, formando as respectivas sulfonas.

Os resultados obtidos estão mostrados na Tabela 1 e sugerem que a barreira de ativação, ou seja, o valor de $\Delta^\ddagger G$, é menor para a oxidação do grupo sulfeto que para a oxidação do alqueno, mesmo embora a oxidação da dupla reação seja mais espontânea ($\Delta_r G$).

Tabela 1. Resultados obtidos com o nível de teoria B3LYP/6-311+G(2df,2p)/dhf-SVP. Em parênteses, estão as diferenças obtidas com relação aos valores obtidos por Sensato et al. (2005) utilizando outro nível de cálculo.

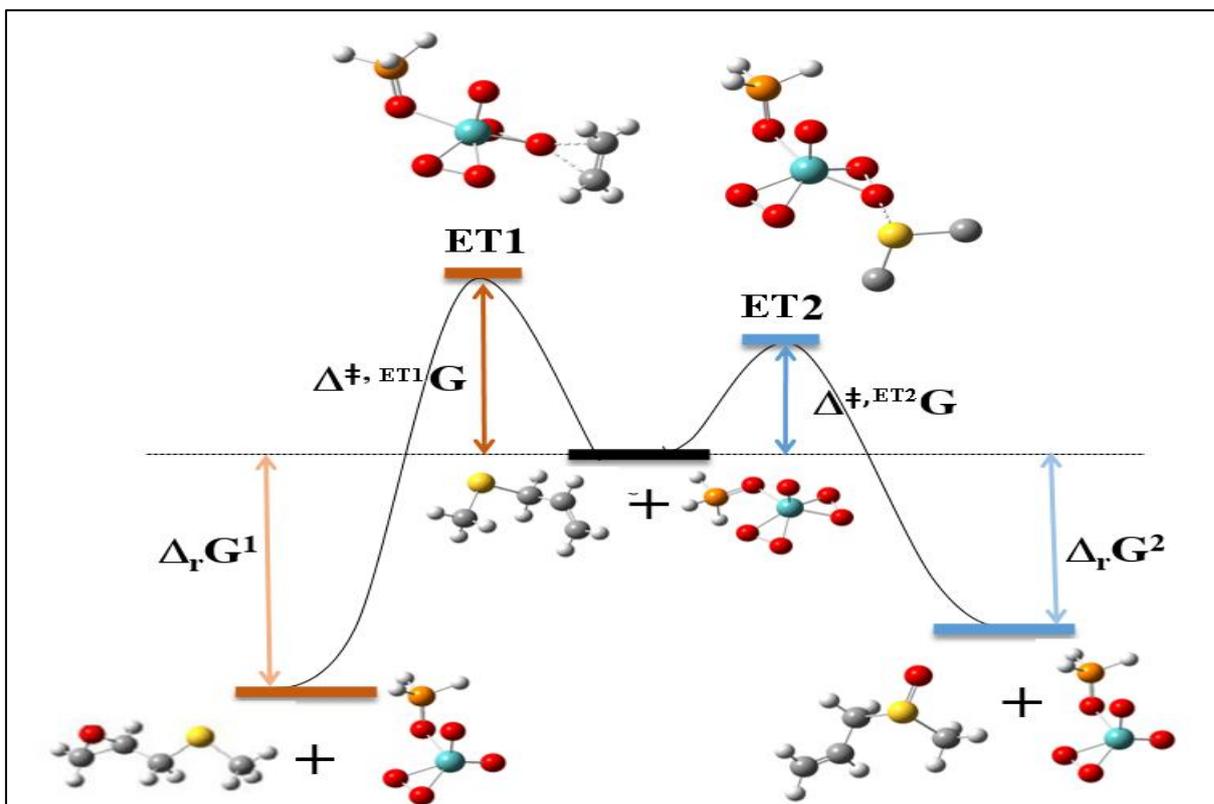
ET	$\Delta^\ddagger G$	$\Delta_r G$
I	27,3 (-0,9)	-33,3 (-1,1)
II	17,9 (1,1)	-32,9 (-0,6)
III	28,7 (-0,5)	-33,1 (-0,9)
IV	17,9 (0,5)	-32,5 (-1,1)
V	27,7 (0,0)	-32,3 (-2,1)
VI	20,3 (1,2)	-52,5 (-0,3)
VII	20,2 (0,4)	-52,8 (-0,3)

Fonte: O autor

A Figura 4 mostra uma representação esquemática desse comportamento. Essas reações experimentalmente mostram que o produto sulfóxido é formado em detrimento do produto epóxido (BATIGALHIA et al., 2001). Assim, a reação apresenta controle cinético e, portanto, a quimiosseletividade é governada pela cinética de reação.

Comportamento similar é observado na reação de oxidação sucessiva, ou seja, na reação de oxidação do metil-vinil-sulfóxido, ou seja, menor barreira de ativação foi obtida para oxidação do sulfóxido que para a oxidação da dupla ligação. Além disso, o produto sulfona é favorecido termodinamicamente (processo mais espontâneo, $\Delta_r G$ mais negativo) que o produto epóxido.

Figura 4. Ilustração de um típico perfil da energia de reação da oxidação de substratos organosulfetos instaurados por complexos do tipo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}]$ via mecanismo de Sharples. A reação de $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{OPH}_3)] + \text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2=\text{CH}_2$ via ET1 (oxidação da dupla ligação) produz o epóxido 2-((metiltio)metil)-oxirano e via ET2 (oxidação do sulfeto) produz o metil-vinil-sulfóxido.



Fonte: Adaptado da referência CARVALHO et al., 2017.

4 METODOLOGIA

4.1 Tipo de Pesquisa

A pesquisa possui uma abordagem qualitativa, pois o objetivo é analisar a contribuição da EEEC no ensino e aprendizagem dos alunos. Com este tipo de pesquisa, o foco está na contribuição para a aprendizagem que a estratégia utilizada proporcionou para os discentes. Silveira e Córdova (2009) definem pesquisas qualitativas como aquelas cujo foco são os aspectos da realidade, que por sua vez não podem ser quantificados.

4.2 O Campo e os Sujeitos

O campo de aplicação da pesquisa foi a Universidade Federal de Pernambuco, no Centro Acadêmico do Agreste, localizado na cidade de Caruaru, região do agreste de Pernambuco. Os sujeitos da pesquisa foram os alunos/discentes matriculados na disciplina Laboratório de Físico-química, do 8º período do curso de Química-Licenciatura, referente ao semestre letivo 2017.2. O quantitativo de alunos envolvidos nesta pesquisa foi de 18, e o de professores, 3.

4.3 Coleta de Dados

A coleta de dados teve início a partir da aplicação de questionários para o professor (APÊNDICE – A) e para os alunos (APÊNDICE – B) antes e depois da aplicação da EEEC.

Os questionários foram úteis para a coleta de informações e dados estatísticos, de um fato ou tema específico, podendo atingir um determinado público-alvo, que, neste caso, foram os alunos e o professor(a) (AMARO; PÓVOA; MACEDO, 2005).

O questionário do professor foi do tipo aberto, pois, segundo Amaro e colaboradores, citado anteriormente, “Este tipo de questionário proporciona respostas de maior profundidade, ou seja, dá ao sujeito uma maior liberdade de resposta, podendo esta ser redigida pelo próprio.” (2005, P. 06). Assim, os dados tiveram um maior grau de relevância a respeito da prática aplicada. A aplicação dos questionários com os professores de Físico-Química, foi realizada com três professores, a fim de investigar se os mesmos utilizam a EEEC ou outro tipo de metodologia, e para que eles pudessem relatar quais as dificuldades dos alunos em cinética que eles identificaram ao longo de suas carreiras como docentes.

O questionário aplicado para os alunos (APÊNDICE – B) foi útil para a coleta de informações a respeito de seus conhecimentos relacionados à cinética química, de forma geral e especificamente de quimiosseletividade. Também aspectos gerais quanto ao ensino de Físico-Química e da EEEC também foram abordados.

O questionário foi elaborado contendo questões fechadas, apresentadas em forma de escala de Likert, cujas respostas poderiam ser dadas de acordo com uma escala de concordância: concordo completamente, concordo, sem opinião ou neutra, discordo e discordo completamente. As respostas nessa escala podem ser representadas por uma escala numérica de +2 até -2 ou de 1 até 5. Este tipo de escala foi criada por Rensis Likert em 1932, para que os sujeitos sejam levados à refletir sobre questões, sendo suas impressões quanto às afirmações apresentadas transformadas em medidas de concordâncias (SILVA JÚNIOR; COSTA, 2014). Segundo Costa (2011), uma vantagem apresentada por essa escala é o fato de proporcionar ao pesquisador a possibilidade de transcrever o nível de concordância, do entrevistado a respeito de uma afirmação qualquer.

A análise dos questionários antes da aplicação da EEEC guiou a construção da metodologia de aplicação dessa estratégia, pois, assim, foi possível partir das dificuldades observadas dos alunos com relação aos conceitos de cinética química e também da visão dos professores para a proposição da forma de aplicação e do que deve ser abordado para complementar e/ou melhorar a aprendizagem.

Após a aplicação da EEEC, o mesmo questionário foi aplicado e também foram recebidas as anotações contendo as soluções apresentadas pelos discentes ao problema exposto no estudo de caso. Com relação à essa última questão, além de verificar se os discentes conseguiam, de fato, solucionar o caso, questões como esta prezam a originalidade das respostas e permite que o investigado tenha um pensamento livre e expresse seus pensamentos (AMARO; PÓVOA; MACEDO, 2005), podendo fornecer informações complementares à análise. A análise realizada depois da aplicação da estratégia de ensino estudo de caso (pós-análise) foi realizada com o objetivo de verificar os diversos aspectos da contribuição dessa estratégia.

4.4 O caso: Os medicamentos da minha avó.

O problema descrito na seção 3.5 foi proposto para ser trabalhado por meio da Estratégia de Ensino Estudo de Caso, cujo caso foi intitulado: “Os medicamentos da minha avó”, e a aplicação se deu no formato de pequeno grupo, no qual inicialmente os alunos foram distribuídos em grupos de 3 estudantes. Foi entregue o caso, que nessa proposta, o caso foi

relatado por meio de um texto (APÊNDICE - C), tendo que resolver e, posteriormente, elaborar um texto para explicar como chegou à resolução. O relato se baseou em uma estória na qual um químico muito curioso, após observar os medicamentos que a avó toma regularmente, resolve pesquisar sobre os mesmos em sua pesquisa de iniciação científica. Alguns dados obtidos na pesquisa, como já discutidos na seção 3.4 (O problema), foram fornecidos neste texto, de forma a levar o aluno a responder às seguintes perguntas:

Se esses complexos oxidam tanto duplas ligações quanto grupos sulfetos, se eu estiver interessado na oxidação de substrato que contenha esses dois grupos funcionais, tal como o metil-vinil-sulfeto, qual dos dois sítios, ambos suscetíveis à oxidação, será oxidado por tais complexos?

Os complexos oxo-diperoxo de molibdênio são quimiosseletivos à oxidação do sulfeto, mesmo em substratos que contenham grupos alquenos, também suscetíveis à oxidação?

de forma a responder o questionamento inicial:

Essas reações poderiam ser úteis para na síntese seletiva de sulfóxidos?

4.5 A Elaboração do Caso que foi Utilizado na EEEC

O caso intitulado “Os medicamentos da minha avó” foi preparado a partir dos resultados obtidos durante os projetos vinculados à bolsa de manutenção acadêmica PROAES/UFPE “A Aplicação da metodologia PICVib em cálculos de espectros de infravermelho e Raman para Complexos Oxo-Diperoxo de Molibdênio” (concluído em 2015) e de Iniciação Científica PIBIC/PROPESQ/UFPE “Influência das energias de complexação na estrutura molecular e nas propriedades termodinâmicas de complexos oxodiperoxo de Mo, W e Re”) (concluído em 2016) em que ambos os projetos foram orientados pela professora orientadora desse trabalho e pelo pesquisador DCR/FACEPE/CNPq Marcus Vinicius Pereira dos Santos, bem como pela motivação de utilizar os dados obtidos e os conhecimentos adquiridos no desenvolvimento desses trabalhos em estratégias que pudessem promover a aprendizagem efetiva de conceitos de Cinética Química. Além disso, como já discutido na seção 5.1, mesmo a utilização de estratégias diferenciadas devem ser propostas de modo que o interesse do estudante possa ser eficientemente despertado.

Assim, foi pensando para esse trabalho uma estória que pudesse ser contada de forma que o conceito fosse contextualizado para uma situação cotidiana que poderia ser vivenciada ao mesmo tempo na casa dos estudantes e no meio acadêmico, nesse caso, na Universidade, o que poderia contribuir para um pensamento mais investigativo.

No APÊNDICE - C encontra-se o referido caso, que ao relatar sobre os problemas de saúde da avó do narrador e sobre a natureza química dos compostos ativos dos remédios diariamente ingeridos por ela, mostrou que o perfil investigador do narrador o levou a realizar pesquisas científicas sobre a síntese de tais compostos, culminando no desenvolvimento de trabalhos de Iniciação Científica na área de Química Computacional.

A partir daí, o narrador cita que a professora proponente e orientadora do trabalho sugeriu o estudo de complexos oxo-diperoxo de molibdênio, em que vários trabalhos recentes da literatura mostravam que compostos desse tipo vinham sendo testados quanto à síntese seletiva de sulfóxidos, os principais compostos ativos dos medicamentos de sua avó. Esses complexos foram inicialmente propostos para síntese de epóxidos e, portanto, quando existem dois grupos funcionais suscetíveis à oxidação por tais complexos, tais como sulfetos e alquenos, em um mesmo substrato, foi observado que esses complexos são quimiosseletivos.

O narrador conta, então, que foi levado à realizar várias pesquisas bibliográficas, e a utilizar técnicas de Química Computacional para prever propriedades físico-químicas das reações de oxidação propostas.

Ao longo do texto, conceitos tais como velocidade de reação, energia de ativação, estado de transição, energia de Gibbs de reação, espontaneidade de reação são utilizados e vários dados obtidos durante a pesquisa são mostrados para auxiliar na compreensão do problema e para que sejam respondidas perguntas, tais como “*os complexos oxo-diperoxo de molibdênio são quimiosseletivos à oxidação do sulfeto, mesmo em substratos que contenham grupos alquenos, também suscetíveis à oxidação? Essas reações poderiam ser úteis para síntese seletiva de sulfóxidos?*”

4.6 Descrição da Pesquisa e Análise dos Resultados Obtidos

De início, a pesquisa foi apresentada ao professor(a) da disciplina. Após a sua aceitação, deu-se início ao levantamento dos dados. Após o preenchimento do questionário (antes da aplicação da EEEEC) pelos alunos, foi elaborado o caso (APÊNDICE – C), a partir das informações obtidas na análise de tais questionários (levantamento de dados). O caso foi apresentado na forma de texto (APÊNDICE – C), junto com uma folha, para anotações e observações (APÊNDICE – D), e distribuído, entre os grupos de alunos que compõem a

turma. Após a entrega do material, foi solicitado que os estudantes buscassem uma resolução para o caso. Eles foram informados que poderiam buscar fontes externas de conhecimento, tais como consulta à literatura científica e acadêmica, por meio de internet, livros, colegas ou até de outros grupos, a fim de levantar possíveis hipóteses que solucionasse o caso.

Os estudantes tiveram o período de duas semanas para que buscassem solucionar o caso. Após esse período, foi marcada uma aula para apresentação e discussão dos resultados e aplicação do questionário final (APÊNDICE – B).

Todos os documentos gerados e/ou coletados ao longo da pesquisa foram analisados respeitando a regra de homogeneidade para o material, ou seja, os questionários terão o mesmo tema, buscando investigar as concepções de conceitos relacionados à cinética química e sobre as metodologias adotadas pelo professor. Também foram avaliadas questões quanto à Estratégia de Ensino Estudo de Caso. Da formulação das hipóteses e do objetivo, foi verificada a eficiência da EEEEC, ou seja, se a metodologia adotada contribuiu para a aprendizagem dos estudantes.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção estão discutidos os principais resultados obtidos neste trabalho. Na seção 5.1 está discutida a análise dos questionários que foram respondidos pelos professores. Na seção 5.2 estão discutidos os resultados obtidos da análise inicial dos estudantes (antes da aplicação da EEEEC). Na seção 5.3 está discutida a proposição do caso que foi utilizado na EEEEC. Na seção 5.4 está apresentada uma análise da forma como foi apresentado o Caso proposto nesse trabalho e os resultados obtidos após a análise dos questionários respondidos pelos alunos após a aplicação de tal estratégia estão apresentados na seção 5.5.

5.1 Análises do questionário respondido por professores

Inicialmente, a aplicação do questionário para os professores teve como objetivo principal ser um dos meios que auxiliaram na identificação das dificuldades enfrentadas pelos alunos, buscando entender a dificuldade de compreensão dos conteúdos de cinética química e também sobre a utilização de estratégias diferenciadas para o ensino de Química.

O questionário (APÊNDICE - A) foi aplicado para 03 (três) professores ministrantes das disciplinas Química Geral II, Físico-Química II e Laboratório de Físico-Química, do Campus Acadêmico do Agreste (CAA) da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), campus este que também foi o campo de estudo da pesquisa. Todas essas disciplinas abordam conceitos de Cinética Química.

A disciplina Química Geral II possui cerca de 25-30% da ementa voltada para a introdução dos conceitos de cinética Química, cujos conteúdos programáticos propostos incluem: velocidade de reação; leis de velocidade e ordem de reação; leis integradas de primeira e segunda ordens; tempo de meia-vida; modelos de reações; efeito da temperatura; teoria das colisões; teoria do complexo ativado; reações elementares; velocidade e equilíbrio; e catálise. A disciplina de Físico-Química II aborda os conceitos de forma mais aprofundada, sendo os conteúdos programáticos propostos: velocidade de reação e leis de velocidade; dependência da velocidade com a temperatura; mecanismos e processos elementares; aproximação do estado estacionário; teoria do estado de transição; e catálise. A disciplina Laboratório de Físico-Química tem o objetivo de correlacionar os conteúdos teóricos da Físico-Química, com experimentos desenvolvidos em laboratório. Também desenvolver aptidões para monitorar, por observação e por medição, parâmetros termodinâmicos de substâncias, soluções e misturas e compará-los com valores relatados na literatura; construir e analisar tabelas e gráficos, bem como discutir e calcular grandezas físico-químicas obtidas

através de resultados empíricos; redigir relatórios científicos, discutir e avaliar os resultados obtidos nos experimentos, contribuindo para o aprendizado integrado teórico e experimental. (PPC – Curso de Química-Licenciatura, CAA –UFPE, 2017)

Ao perguntarmos sobre as dificuldades enfrentadas pelos discentes das disciplinas ministradas pelos professores entrevistados, os mesmos pontuaram as seguintes dificuldades: manipulação algébrica de equações; conceitos físicos; conversão de unidades; manipulação de dados; compreensão textual; compreensão de teorias; desvincilhamento de termos antigos, que, em relação ao conceito de cinética, os principais obstáculos, segundo esses professores, são atribuídos às deficiências de conceitos físicos básicos, tais como velocidades, e, por conseguinte, o entendimento das leis de velocidade e a correlação com as equações como ferramentas para descrever o fenômeno observado, e a multidisciplinariedade do conceito, que perpassa pelo aprendizado de outras disciplinas.

Diante dessas dificuldades, os professores relataram que os rendimentos variam de baixo para razoável, e, em particular para as disciplinas iniciais do curso, o rendimento fica entre razoável e ineficiente. Isso justifica o baixo rendimento nas disciplinas posteriores, dificultando a prática do professor em sala de aula, visto que estas disciplinas requerem uma boa base de conhecimento, e, portanto, o mesmo tem que rever assuntos antigos para que possa promover a aprendizagem dos conteúdos de tais disciplinas.

Com relação à utilização de estratégias diferenciadas para o ensino de Química, foi perguntado se os mesmos utilizavam alguma metodologia que auxiliasse na aprendizagem dos alunos, tais como contextualização, EEEEC, exercícios com problematização ou outras metodologias, e sobre a participação dos alunos e seus rendimentos após o uso de tais metodologias. Eles relataram que utilizam contextualização (artigo acadêmicos e outros textos), exercícios problematizadores e, em outros casos, jogos didáticos. Entretanto, eles relatam que nem sempre há tempo hábil para ministrar os conteúdos com metodologias diferenciadas, pois requer um tempo maior de orientação do professor e dedicação por parte dos discentes, que, em alguns casos, não ocorre e compromete a eficácia da prática. Outro ponto relevante também mencionado pelos professores é a falta de envolvimento e compromisso, por parte dos alunos com as metodologias aplicadas, o que, na visão deles, compromete toda a sua eficácia. Acredita-se que a falta de comprometimento dos estudantes pode ser justificada por duas razões: o fato de estarem exaustos com as demandas de outras disciplinas; e/ou por se tratar de metodologias que não relacionam os conteúdos com parte de seu cotidiano, muitas vezes desmotivando-os.

A análise das questionários contribuiu para que o caso proposto nesse trabalho fosse elaborado por meio de uma estória, com o intuito de tentar despertar o interesse do aluno e

contextualizar para uma situação cotidiana que poderia ser vivenciada ao mesmo tempo na casa deles e no meio acadêmico, nesse caso, na Universidade, contribuindo para um pensamento mais investigativo.

5.2 Pré-análise: Antes da aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso

Nesta etapa, participaram 18 (dezoito) alunos. A coleta de dados na pré-análise foi realizada por meio do questionário apresentado no APÊNDICE – B, que deveria ser respondido baseado na veracidade das afirmações de 1-15 apresentadas utilizando a escala Likert, cujas respostas poderiam ser dadas de acordo com uma escala de concordância: concordo completamente, concordo, sem opinião ou neutra, discordo e discordo completamente. As respostas nessa escala podem ser representadas por uma escala numérica de +2 até -2 ou de 1 até 5.

A análise das respostas dos alunos às afirmações (1 a 15, do questionário) utilizando a escala Likert foram divididas em quadro blocos. O primeiro bloco de afirmações foi composto por três perguntas relacionadas à físico-química em geral, no segundo bloco, duas afirmações que buscavam saber como os alunos veem a cinética em seu dia a dia, no terceiro bloco, duas afirmações sobre a utilização de metodologias de ensino diferenciadas, no quarto e último bloco, oito afirmações direcionadas aos conceitos de cinética química, quimiosseletividade e espontaneidade da reação.

A seguir, os blocos descritos brevemente acima serão detalhados e seus resultados serão discutidos.

O primeiro bloco foi composto pelas afirmações apresentadas na Tabela 2, cujas afirmações estão relacionadas a visão dos estudantes sobre a disciplina de físico-química.

Tabela 2 . 1º Bloco de afirmações da escala de Likert.

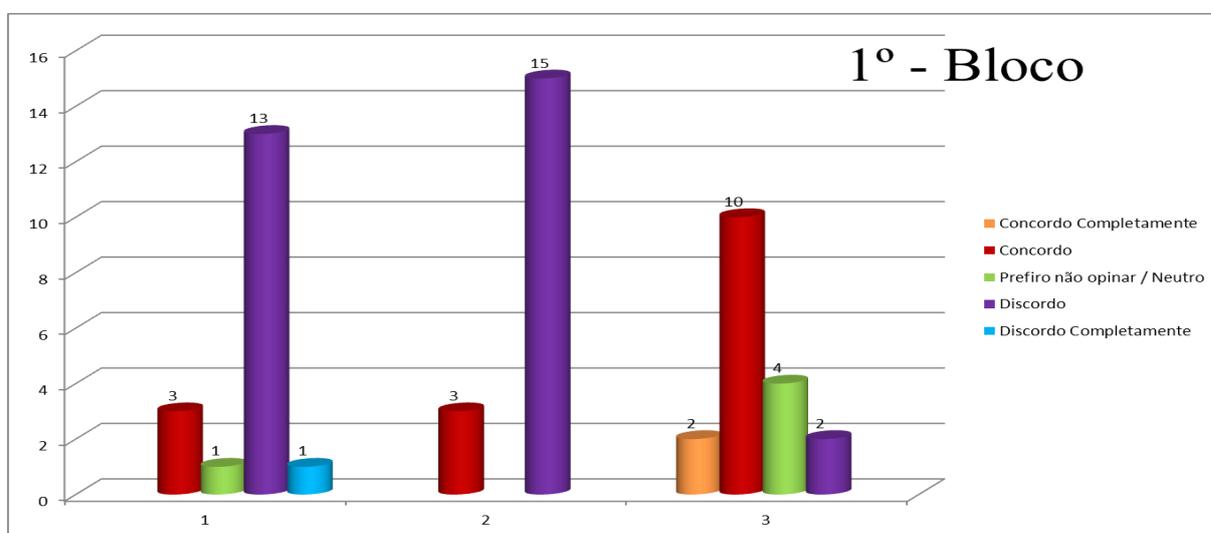
-
- 1) Os conteúdos de Físico-Química são de fácil compreensão.
 - 2) A linguagem utilizada pelos autores das referências bibliográficas usuais é clara e objetiva.
 - 3) Cinética química possui muitas fórmulas e cálculos.
-

Fonte: O autor

Tendo em vista que uma escala proporciona a habilidade de transcrever o nível de concordância (COSTA, 2011), para as duas perguntas iniciais, os estudantes, em sua maioria, discordaram das afirmativas 1 e 2, apresentando um percentual superior a 75% do total de estudantes que participaram da pesquisa. Esse resultado era esperado (Figura 5), visto que o

ensino de química perpassa predominantemente por práticas educacionais voltadas para a memorização de fórmulas e a resoluções de equações, tornando o processo de ensino e aprendizagem complexo (SCHNETZLER, 2004). Além disso, essa disciplina relaciona conceitos teóricos muitas vezes abstratos, além dos cálculos matemáticos, o que a torna complexa para a maioria dos estudantes. Esse resultado está de acordo com o que foi discutido com relação aos questionários que foram aplicados para os professores. Quanto à afirmação 3, 66,67% dos estudantes concordaram com o fato de que a cinética química possui muitas fórmulas e cálculos, o que também corrobora com as respostas às afirmações 1 e 2.

Figura 5 . Gráfico referente às respostas do primeiro bloco de afirmações da escala de Likert.



Fonte: O autor

O segundo bloco, composto por duas afirmações que estão apresentadas na Tabela 3, buscou investigar se os entrevistados correlacionavam os conteúdos de cinética com seus dia a dia e na atuação deles como profissional no mercado de trabalho.

Tabela 3. 2º Bloco de afirmações da escala de Likert.

4) É possível relacionar os conteúdos com o cotidiano de cada um.

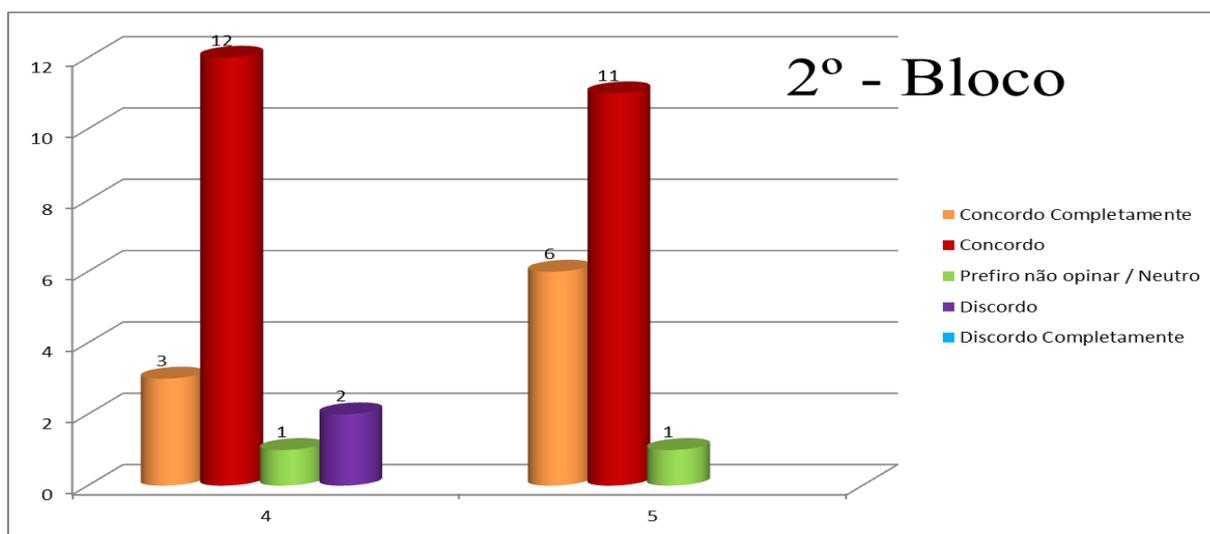
5) No mercado de trabalho na área de Química se utiliza cinética química.

Fonte: O autor

Para a quarta afirmativa, 83,33% dos estudantes concordaram e para a quinta, cerca de 94,44% deles concordaram com as afirmativas, o que sugere que os alunos conseguem fazer conexões entre a parte teórica, vivenciada em sala de aula, com suas respectivas vidas (Figura 6). Assim, de acordo com Driver et al. (1999, p. 36), esse resultado mostra que o ensino de

ciências deveria ser de tal forma que introduzisse os alunos numa forma de interpretar o mundo e suas inquietações, um processo que deve envolver relações pessoais e sociais. Como os estudantes conseguem relacionar seu cotidiano com as aulas teóricas, a utilização de metodologias que possibilite essa correlação deve ter uma boa aceitação por parte dos estudantes e possibilitaria uma aprendizagem mais efetiva.

Figura 6. Gráfico referente às respostas do segundo bloco de afirmações da escala de Likert.



Fonte: O autor

No terceiro bloco, as afirmações foram relacionadas à utilização de metodologias de ensino diferenciadas, e composto por duas afirmações (Tabela 4). Assim como no segundo bloco, na maioria dos entrevistados a concordância para as afirmações desse bloco ficou direcionada para “concordo” e “concordo completamente”, apresentando um percentual de 94,44% para a sexta afirmativa e 83,33% para a sétima (Figura 7).

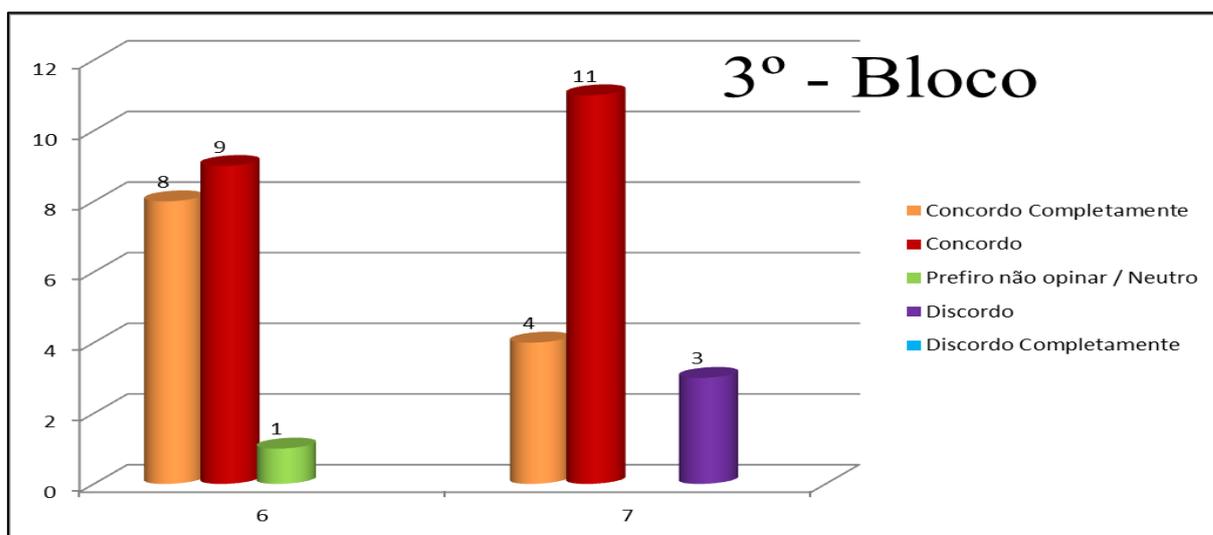
Tabela 4. 3º Bloco de afirmações da escala de Likert.

6) A contextualização promove a aprendizagem dos conteúdos de cinética química

7) A estratégia de ensino estudo de caso promove aprendizagem dos conteúdos de cinética química

Fonte: O autor

Figura 7. Gráfico referente às respostas do terceiro bloco de afirmações da escala de Likert.



Fonte: O autor

Para a afirmação nº 6, o direcionamento da afirmativa estava relacionado ao fato de utilizar a contextualização (uma metodologia diferenciada) em prol do ensino e aprendizagem. A concordância dos alunos com essa afirmativa mostra que tal metodologia, que cria uma relação entre o aluno, seu cotidiano e o conhecimento teórico, é vista por eles como uma forma de levar a uma aprendizagem mais efetiva. Ausubel (2003) afirma que essa aprendizagem pode ser promovida devido à criação de uma relação entre o novo material a ser aprendido com o conhecimento teórico, mas que não seja de forma aleatória e nem exatamente igual aos conceitos estabelecidos (AUSUBEL, 2003).

Na afirmativa nº 7, os entrevistados tiveram que responder se concordam ou não com a utilização da EEEC para o ensino de cinética química. Embora os alunos não tenham citado se alguma vez já utilizaram tal estratégia, e nenhum dos três professores entrevistados também não citaram a sua utilização para o ensino de tal conteúdo, a resposta que predominou foi “concordo”. Isso pode ser explicado tendo em vista que eles, baseado nas disciplinas voltadas para metodologias de ensino de química cursadas, acreditam que há uma contribuição positiva para o ensino e a aprendizagem de cinética química ao utilizar a EEEC. Ou seja, a vivência em sala de aula e os conhecimentos construídos durante as aulas teóricas promovem uma situação em que o mesmo se familiariza com o caso proposto, de acordo com as observações de Sá et al. (2007).

No quarto e último bloco, foi trabalhado o entendimento dos entrevistados a respeito de seus conhecimentos sobre cinética química, por meio de oito afirmações, mostradas na Tabela 5. Os resultados obtidos da análise desse último bloco encontram-se no gráfico da

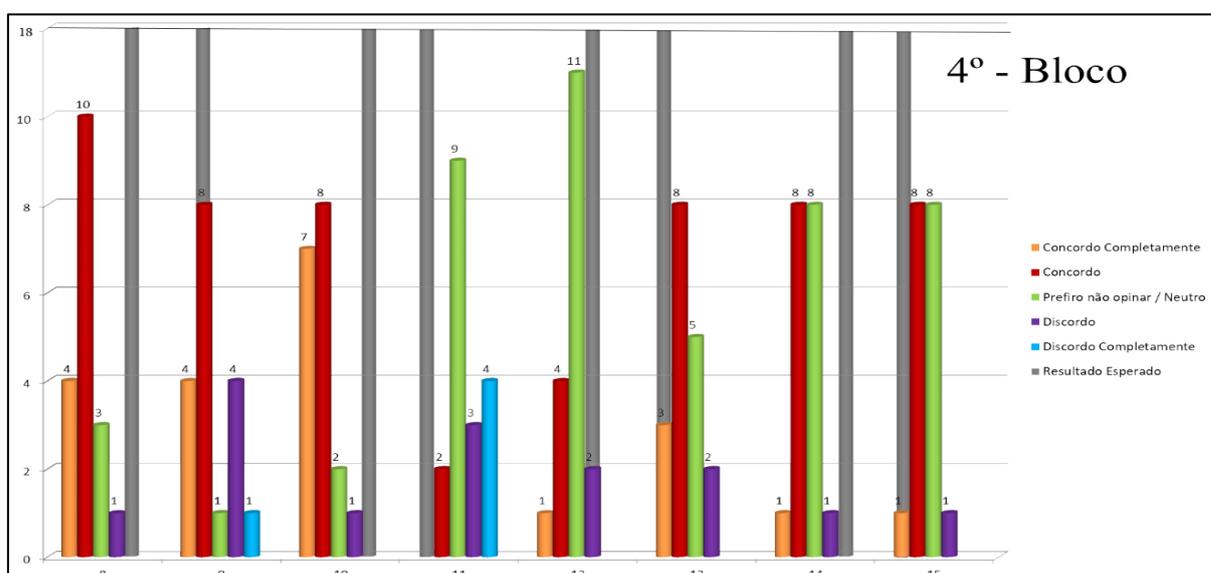
Figura 8, cujas respostas esperadas também estão mostradas na coluna de cor cinza, sobreposta à posição na qual se encontra o grau de concordância correto, na escala Likert. De modo geral, pode-se observar nesta etapa um nível insuficiente de acertos.

Tabela 5. 4º Bloco de afirmações da escala de Likert.

8) A cinética química só leva em consideração a velocidade das reações.
9) A velocidade de uma reação está relacionada com a energia de ativação
10) A espontaneidade de uma reação está relacionada com a velocidade dessa reação
11) A variação da energia de Gibbs de uma reação fornece informações sobre a espontaneidade da reação
12) Quimiosseletividade, regioseletividade e estereosseletividade são conceitos abordados nas disciplinas de Físico-Química.
13) Reação quimiosseletiva é aquela em que um grupo funcional da molécula reage sem que outras funcionalidades potencialmente reativas sejam afetadas.
14) Uma reação que leva à formação de produtos menos estáveis termodinamicamente ($\Delta_r G$ menos negativo, reação menos espontânea), mas possui energia de ativação mais baixa, possui controle termodinâmico. E uma reação que leva à formação dos produtos mais estáveis termodinamicamente, mas com energia de ativação mais alta, possui controle cinético.
15) Um substrato que possui dois grupos funcionais suscetíveis à reação de oxidação promovida por um agente oxidante deverá preferencialmente reagir para formar um produto em detrimento de outro se o agente oxidante for quimiosseletivo.

Fonte: O autor

Figura 8. Gráfico referente às respostas do quarto bloco de afirmações da escala de Likert.



Fonte: O autor

Para a primeira afirmação desse bloco (afirmação nº 8), um grande número de alunos demonstrou dificuldades com relação aos conceitos mais fundamentais da cinética química, como, por exemplo, o fato de que a cinética não leva em consideração apenas a velocidade da reação, mas também a determinação de mecanismos, otimização racional de processos, catálise etc. O fato de essa afirmação apresentar o advérbio “só” (somente) também pode ter contribuído para o erro. Esperava-se que os estudantes respondessem “discordo completamente”. Entretanto, apenas 5,56% respondeu “discordo”. Isso nos remete ao fato deles terem apresentado um rendimento entre razoável e ineficiente nas disciplinas iniciais, segundo apontado pelos professores entrevistados, ficando evidente o déficit na aprendizagem de tal conceito.

A segunda afirmação desse bloco (afirmação nº 9) mostra um nível de acerto de cerca de 44% (“concordo”), pois a afirmação está correta, mas não apenas a velocidade está relacionada com a energia de ativação, mas também com a contribuição do fator pré-exponencial na equação de Arrhenius (Eq. 11), pode deslocar a seletividade para um produto que não vem da menor energia de ativação, mesmo a reação possuindo controle cinético. O fato de vários estudantes (22%) terem respondido “concordo completamente”, mostra que eles conhecem a relação entre velocidade de reação e energia de ativação, mas não lembram ou desconhecem esses outros fatores.

Nas afirmações nº 10 e 11, intencionou-se verificar se os estudantes relacionavam a energia de Gibbs de reação química com a sua espontaneidade. Foi observado que nenhum dos alunos acertou completamente tais respostas. Em particular, um grande número de discentes respondeu que concordava completamente com a afirmação nº 10, enquanto que a resposta deveria ser discordar completamente, visto que a espontaneidade de uma reação não tem relação com sua velocidade, mas com o valor da energia de Gibbs de reação para processos que ocorrem em condições de pressão e temperatura constantes. Essa relação também não está clara para esses estudantes, conforme pode ser observado nas respostas à afirmação nº 11, em que 50% dos alunos preferiu não opinar e quase 40% discorda em algum nível de tal afirmação. Isso pode ser atribuído ao fato de que os discentes de disciplinas de Físico-Química se preocupam mais em memorizar fórmulas e realizar cálculos, desconsiderando ou dando uma menor importância à compreensão dos conceitos (CARSON; WATSON, 2002; THOMAZ; SCHWENZ, 1998). Além disso, dois fatores ainda podem contribuir de forma negativa para o ensino de cinética química: o fato de que muitas vezes os conceitos e teorias são tratados sem que haja uma contextualização, com aulas meramente expositivas, desconsiderando o conhecimento já existente dos alunos e seu cotidiano, tornando algo desinteressante e desmotivador para o aluno (LIMA et al., 2000); e também das

deficiências que os estudantes apresentam em física e matemática (BRUCE; BLIEM; PAPANIKOLAS, 2008; PIETROCOLA, 2002), o que torna ainda mais complexo o processo de ensino, visto que o professor ainda tem que sanar estas deficiências.

Conceitos ainda mais específicos, tais como quimiosseletividade, regioseletividade e estereosseletividade se tornam ainda mais difíceis de serem trabalhados pelos docentes nessa disciplina, visto as dificuldades expostas acima e serem apenas trabalhados com mais ênfase em disciplinas de Química Orgânica. Portanto, as respostas à afirmativa nº 12 foram obtidas conforme o esperado e em relação à afirmação nº 13 “Reação quimiosseletiva é aquela em que um grupo funcional da molécula reage sem que outras funcionalidades potencialmente reativas sejam afetadas”, 61% concordaram (em algum nível) com tal afirmação, mostrando que os discente tem algum conhecimento sobre esse conceito.

Quanto às afirmações 14 e 15, que tratam de controle cinético e termodinâmico de reações, de um modo geral, e de reações quimiosseletivas, respectivamente, e necessitam de um nível mais aprofundado para a resposta correta, os alunos demonstraram que esses conceitos específicos ainda não são dominados pelos estudantes, o que corrobora para o fato do ensino de cinética química ser aplicado de forma meramente ilustrativa, sem que haja uma relação com a parte matemática e sem uma contextualização, com aulas apenas expositivas (LIMA et al., 2000). Esses resultados são corroborados pela visão de Thomaz e Schwenz (1998), que afirmam que quanto maior a falta de conhecimentos fundamentais para gerar a base dos novos e mais complexos, maior a interferência no desempenho do indivíduo.

Assim, tendo em vista os resultados da análise descrita nessa seção e na seção 5.1 (análise dos questionários aplicados aos professores), a EEEEC foi proposta e realizada com o intuito de resolver problemas conceituais básicos de cinética química, além de proporcionar a contextualização e aprendizado de novos conceitos que normalmente não são tratados, mas são bastante utilizados em diversas áreas da química, tais como Química Orgânica e Química Inorgânica. Vale ressaltar que os estudantes que participaram são do 8º período e, portanto, já cursaram todas as disciplinas que abordam especificamente os conteúdos de Físico-Química e, portanto, deveriam ter mostrado um desempenho superior ao obtido nesta etapa.

5.3 Análise da forma de aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso e da Solução do Problema Proposto no Caso

Nesse momento, algumas características da aplicação dessa EEEC merecem ser destacadas para que auxiliem no entendimento dos resultados obtidos quanto à proposta desse trabalho, ou seja, analisar quais as contribuições da Estratégia de Ensino Estudo de Caso na aprendizagem de cinética química dos discentes no curso de graduação em Química-Licenciatura:

- A. A aplicação desta EEEC foi para estudantes que já cursaram as disciplinas de Físico-Química, em particular, Físico-Química II, disciplina em que tais conceitos são discutidos com maior profundidade, há pelo menos um semestre.
- B. O estudo de caso foi entregue com antecedência de duas semanas antes de responderem ao questionário.
- C. A resolução do caso (as tentativas de responder às perguntas presentes no caso) foram realizadas sem a presença do professor.

O caso “Os medicamentos da minha avó” foi aplicado para 6 (seis) pequenos grupos, composto por três integrantes, cada, totalizando 18 alunos participantes da atividade. Assim, essa aplicação se enquadra na classe de “pequeno grupo”, para o qual foi entregue um caso situado no contexto social e educacional onde os mesmo estão inseridos (HERREID, 1998).

A cada grupo foi entregue o texto e uma folha para anotações e observações (APÊNDICES C e D). Após a entrega do caso, os estudantes tiveram duas semanas para propor a melhor resposta à inquietação do caso, apresentada pelas seguintes perguntas:

“Agora me explique como isso vai solucionar seu problema, me respondendo: os complexos oxo-diperoxo de molibdênio são quimiosseletivos à oxidação do sulfeto, mesmo em substratos que contenham grupos alquenos, também suscetíveis à oxidação? Essas reações poderiam ser úteis para na síntese seletiva de sulfóxidos?”

A resolução do caso se deu a partir das discussões entre os membros do grupo, buscando auxílio da literatura científica, e das trocas de informações entre os grupos.

Os grupos também foram analisados de acordo com as habilidades que mostraram após as duas semanas, durante a resolução do problema apresentado no caso, consideradas nesse trabalho como as mais relevantes para a resolução de problemas desse tipo, baseado na

literatura (SOUSA et al., 2012). Na Tabela 6 estão destacadas as habilidades e se as mesmas foram observadas nos grupos avaliados.

Tabela 6. Análise das habilidades avaliadas apresentadas pelos discentes durante a resolução do problema apresentado no caso.

Análise das resoluções da EEEC						
Habilidades observadas	G1	G2	G3	G4	G5	G6
Realizar trabalhos em grupo	x	x	x	x	x	x
Solução do problema	x	x	x	x		
Busca da resolução na literatura			x	x	x	
Comunicação escrita	x	x	x	x		
Pensamento crítico			x	x		
Domínio do conceito de Cinética química	x	x	x	x		
Compreensão de quimiosseletividade		x		x		
Leitura de figuras e tabelas	x	x	x	x	x	

Fonte: O autor

Como se pode observar, todos os grupos mostraram ter habilidade de trabalho em grupo. A maioria dos grupos mostrou possuir as habilidades de se comunicar por meio da escrita, dominar alguns conceitos de cinética química e interpretar figuras e dados de tabelas. Entretanto, as habilidades de realizar pesquisa na literatura e pensar criticamente ainda precisam ser mais bem trabalhada por meio de estratégias específicas para isso, visto que são habilidades fundamentais para suas formações como profissionais. Isso foi refletido na dificuldade em solucionar o caso, ou seja, em responder à pergunta, embora a maioria dos grupos tenham conseguido, como equipe. Além disso, o conceito de quimiosseletividade, foco do estudo de caso, também ainda parece não estar completamente claro, como será discutido na seção 5.5, mesmo embora eles mostrem conseguir interpretar os dados apresentados no caso.

Assim, o trabalho em equipe foi de fundamental importância para que os alunos conseguissem se envolver no caso e solucionar o problema (ou responder às perguntas), o que, de acordo com Sá et al. (2007), mostra que é possível cessar o individualismo que ocorre nos currículos dos cursos de graduação em química e incentivar a autonomia dos alunos por meio de estratégias desse tipo.

Os grupos também apresentaram uma boa comunicação escrita, umas das habilidades que pode ser trabalhada com a EEEC, habilidade essa que também é observada no trabalho aplicado por Macedo e colaboradores (2012).

Embora dois grupos não tenham demonstrado envolvimento com a resolução do problema, da forma como era esperado, pôde-se perceber o envolvimento dos estudantes com conhecimentos químicos nas tentativas de solucionar a problemática, mostrando que esta, sendo uma proposta de ensino aberta, aumenta o nível de aprendizagem em sala de aula, corroborando com os resultados obtidos por Freitas-Reis e Farias (2015).

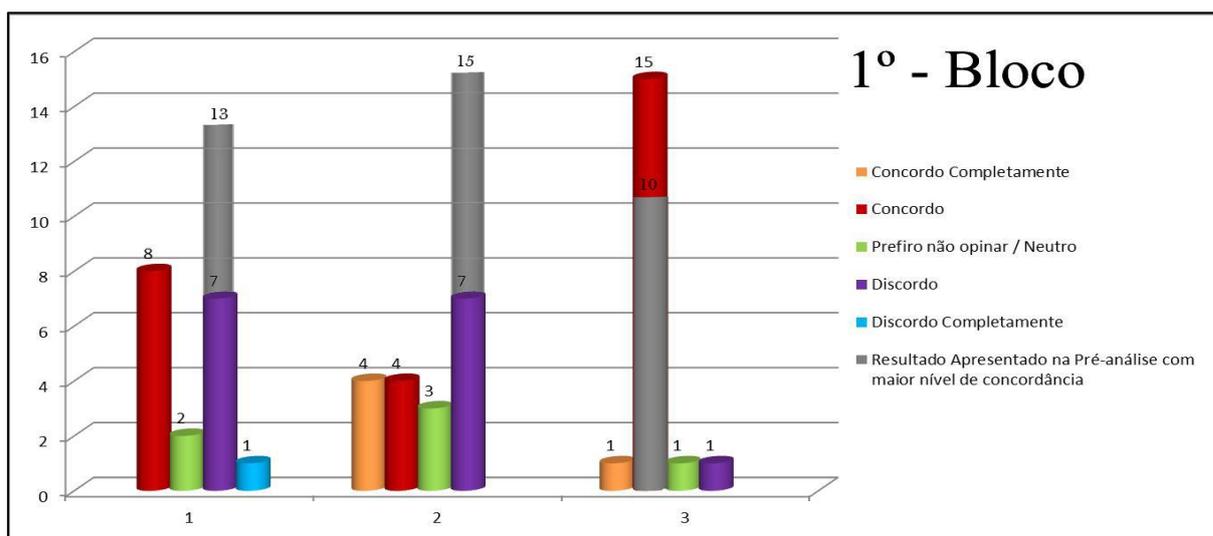
5.4 Pós-análise: Depois da aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso

Nesta etapa, também participaram 18 (dezoito) alunos, os mesmos participantes que participaram da etapa da pré-análise. A coleta de dados pós-aplicação da EEEEC, deu-se através da reaplicação do questionário apresentado no APÊNDICE – B, utilizando a escala Likert, seguindo a mesma estrutura sem alteração.

A seguir, os quatro blocos do questionário serão detalhados e seus resultados serão discutidos e comparados com os dados obtidos da pré-análise (seção 5.2).

Para o primeiro bloco das afirmações (Tabela 2), que tratavam de questões relativas à compreensão dos conteúdos de Físico-Química, da linguagem utilizada pelos autores das referências bibliográficas usuais e do fato da cinética química possuir muitas fórmulas e cálculos, observou-se uma evolução positiva das respostas (Figura 9).

Figura 9. Gráfico referente às respostas do primeiro bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.



Fonte: O autor

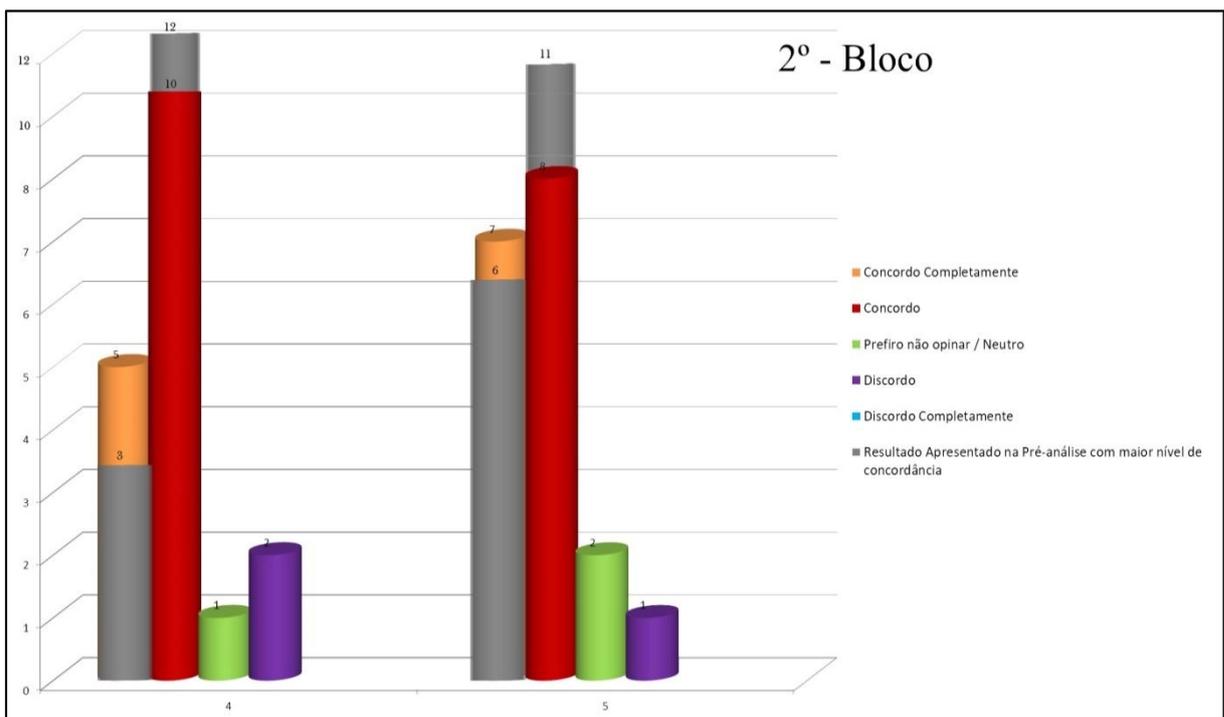
Observou-se que, antes da aplicação da EEEEC, mais de 75% dos estudantes discordavam das duas afirmações iniciais, porém, após a aplicação do estudo de caso, esses dados mudaram e mais estudantes passaram a concordar com o fato de que a físico-química

pode ser de fácil entendimento e que a linguagem dos autores também pode facilitar tal compreensão. Isso mostra que a estratégia proposta possibilitou ao aluno, outro tipo de contato com o conteúdo em questão. Esse comportamento também foi observado em cursos de medicina, cuja EEEEC possibilitou o aluno vivenciar seus conhecimentos construídos com as aulas teóricas, com problemas medicinais reais (SÁ et al., 2007).

Quanto à afirmação nº 3, houve um aumento no nível de concordância para a categoria “concordo” com o fato de que a cinética química possui muitas fórmulas e cálculos, mesmo após a EEEEC, visto que os estudantes tiveram que analisar e interpretar dados gerados por meio de cálculos, mas que, de acordo com a análise das duas primeiras afirmações, isso sugere que eles não encontraram um aumento de dificuldade.

No segundo bloco, foi analisado se os estudantes aumentaram seus níveis de concordância com o fato de que os conteúdos de cinética estão presentes em seus dia a dia e, possivelmente, na atuação deles como profissional no mercado de trabalho. Os resultados apresentados no gráfico da Figura 10 mostram que os dois níveis de concordância “concordo” e “concordo completamente” tiveram um aumento de respostas, favorecido pelo fato de que o caso estudado relacionava um problema do cotidiano (o uso de medicamentos) e a produção dos mesmos (indústria química e mercado de trabalho) com a vida acadêmica na universidade (aprendizagem teórica e pesquisa científica).

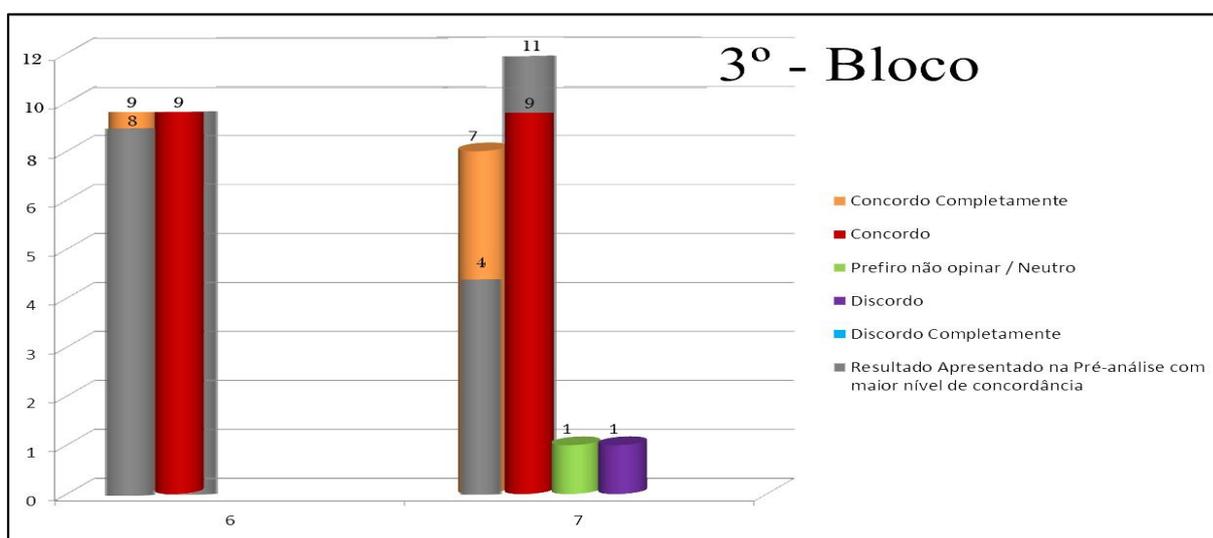
Figura 10. Gráfico referente às respostas do segundo bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.



Fonte: O autor

No terceiro bloco de afirmações, ambos os níveis de concordância tiveram aumento, em uma situação que já era considerada bastante boa, com um aumento um pouco mais expressivo para o nível “concordo” da afirmação nº 7 (Figura 11). Isso mostra que além da vivência nas disciplinas de metodologias de ensino de química de alguns estudantes, a EEEC pôde mostrar para eles, na prática, que o uso de contextualização em tal estratégia proporciona uma aprendizagem mais efetiva, de acordo com Ausubel (2003), cuja experiência permitiu que os estudantes se familiarizassem com o caso com base na vivência dos conhecimentos construídos nas aulas teóricas, de acordo com o que foi obtido por Sá et al. (2007).

Figura 11. Gráfico referente às respostas do terceiro bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.

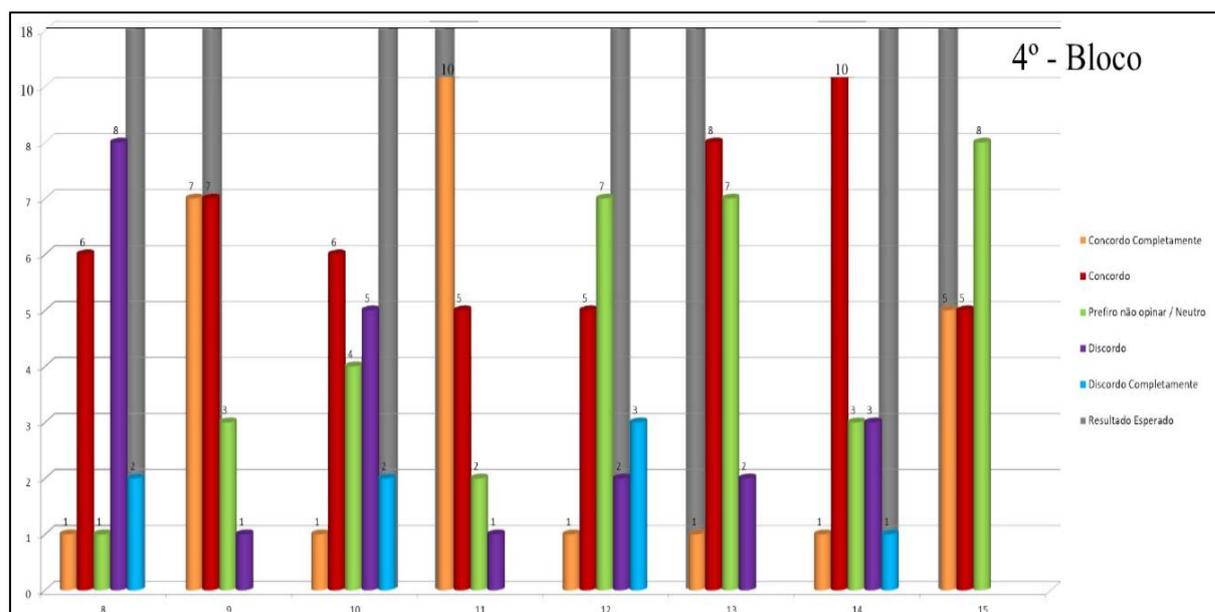


Fonte: O autor

O gráfico da Figura 12 mostra os resultados obtidos para o quarto e último bloco, cujas afirmações buscaram analisar o entendimento dos discentes com relação aos seus conhecimentos sobre cinética química (Tabela 5). Assim como no gráfico da Figura 8, as respostas esperadas também estão mostradas na coluna de cor cinza, sobreposta à posição na qual encontra-se o grau de concordância correto, na escala Likert.

De modo geral, pode-se observar um nível satisfatório de acertos, maior que aquele observado na etapa de pré-análise, o que sugere que a EEEC contribuiu de forma positiva para a consolidação dos conhecimentos e/ou aprendizagem dos conceitos. A seguir, algumas análises específicas são feitas para cada afirmação.

Figura 12. Gráfico referente às respostas do quarto bloco de afirmações da escala de Likert, pós-análise em comparação com os dados da pré-análise.



Fonte: O autor

Para a afirmação nº 8, “A cinética química só leva em consideração a velocidade das reações”, houve um aumento de 11% de acertos (“discordo completamente”) e 50% de aumento de acertos parciais, ou seja, que levando em consideração as respostas “discordo” também, mostrando que os discentes passaram a perceber que outros aspectos podem ser investigados a partir da cinética química.

Quanto à afirmação nº 9, embora muitos estudantes já reconhecesse o fato de que a velocidade de uma reação química depende da energia de ativação, houve um aumento de 27% dos estudantes que concordam com tal afirmação completamente, ou seja, que não reconhecem que esse não é o único fator que influencia a velocidade da reação.

Para a afirmação nº 10, observa-se que houve um aumento de apenas 11% no acerto completo (ou seja, “discordo completamente”) e 39% na soma de respostas como “discordo” e “discordo completamente”, o que já é um resultado satisfatório, visto que o caso auxiliou alguns estudantes a corrigir um equívoco observado na pré-análise, uma vez que a espontaneidade de uma reação *não* está relacionada com a velocidade dessa reação.

Os critérios de espontaneidade de reação são apresentados e discutidos na disciplina de Físico-Química I, mas são aplicados na disciplina de Físico-Química II, no estudo de equilíbrio químico, eletroquímica etc. Com a aplicação da EEEEC, o caso proposto promoveu um aumento de 56% no número de acertos e diminuição de 49% entre as pessoas que preferiram não opinar sobre a afirmação de que a variação da energia de Gibbs de uma reação fornece informações sobre a espontaneidade da reação (afirmação nº 11).

Os conceitos mais específicos de quimiosseletividade, regioseletividade e estereosseletividade (afirmação nº 12) foram mais lembrados de terem sido vistos em outros momentos após o estudo do caso proposto, visto que a quantidade de discentes que preferiram não opinar diminuiu e aumentou a quantidade de discentes que concordaram completamente com tal afirmação.

Quanto à afirmação nº 13, parece ter tido um aumento de dúvidas quanto ao fato de que uma reação quimiosseletiva é aquela em que um grupo funcional da molécula reage sem que outras funcionalidades potencialmente reativas sejam afetadas, visto que aumentou o número de estudantes que preferiram não opinar e diminuiu a quantidade de estudantes que acertaram completamente a questão.

Quanto às afirmações nº 14 e 15, não houve um aumento muito expressivo na quantidade de discentes que acertaram completamente às afirmações mais específicas “Uma reação que leva à formação de produtos menos estáveis termodinamicamente ($\Delta_r G$ menos negativo, reação menos espontânea), mas possui energia de ativação mais baixa, possui controle termodinâmico. E uma reação que leva à formação dos produtos mais estáveis termodinamicamente, mas com energia de ativação mais alta, possui controle cinético” e “Um substrato que possui dois grupos funcionais suscetíveis à reação de oxidação promovida por um agente oxidante deverá preferencialmente reagir para formar um produto em detrimento de outro se o agente oxidante for quimiosseletivo”. Contudo, ainda foi possível observar o envolvimento dos estudantes com conhecimentos químicos nas tentativas de solucionar a problemática, de acordo com as observações de Freitas-Reis e Farias (2015).

De modo geral, ao se observar o total de acertos (Tabela 7) na escala Likert referente ao 4º bloco, obtemos um resultado geral positivo, um crescimento de 114,29% referente ao número total de acertos.

Tabela 7. Quantitativo de acertos referente aos níveis de concordância na escala Likert, antes e após a aplicação da Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC).

Quantitativo de Acertos na escala Likert		
	Antes da aplicação da EEEC	Após aplicação da EEEC
Afirmativa de Nº 8	0	2
Afirmativa de Nº 9	8	7
Afirmativa de Nº 10	0	2
Afirmativa de Nº 11	0	10

Afirmativa de N° 12	2	2
Afirmativa de N° 13	3	1
Afirmativa de N° 14	0	1
Afirmativa de N° 15	1	5
Total de acertos	14	30

Fonte: O autor

Os resultados obtidos quanto à aprendizagem dos conceitos de cinética química por meio da EEEC nos levam às seguintes indagações:

- a) Por que, mesmo após um período de tempo relativamente curto após o término da disciplina de Físico-Química II, os estudantes não lembram ou ainda não compreendem conceitos básicos e apresentam dificuldades de aprender conceitos novos relativos ao conteúdo em questão?
- b) Por que os estudantes em fim de curso ainda não possuem uma autonomia para a resolução de problemas?

Entretanto, ainda se observa que, mesmo após um período de tempo relativamente curto após o término da disciplina de Físico-Química II, os estudantes não lembram ou ainda não compreendem conceitos básicos e apresentam dificuldades de aprender conceitos novos relativos ao conteúdo em questão, e que, mesmo os estudantes avaliados, que estão no final do curso, a maioria deles ainda não possuem uma autonomia para a resolução de problemas.

Assim, espera-se que esse trabalho possa contribuir para que as estratégias de ensino atualmente adotadas possam ser melhoradas ou que novas estratégias de ensino possam contribuir para melhorar tal cenário.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho de pesquisa buscou analisar quais as contribuições da Estratégia de Ensino Estudo de Caso (EEEC) na aprendizagem de cinética química dos discentes no curso de graduação em Química-Licenciatura, por meio do caso intitulado “Os medicamentos da minha avó”, que envolveu a quimiosseletividade em reações de oxidação promovidas por compostos de coordenação do tipo oxo-diperoxo de metal de transição, proposto a partir do desenvolvimento de projetos de iniciação científica desenvolvidos pelo pesquisador desse trabalho, à discentes do curso de Química – Licenciatura.

Para isso, foram inicialmente identificadas as principais dificuldades enfrentadas pelos discentes na compreensão do conteúdo de Cinética Química, por meio de entrevistas com os professores ministrantes de disciplinas que tratam especificamente deste conteúdo, e também aplicação de questionário utilizando escala Likert para 18 discentes do 8º período, no qual foram avaliadas as dificuldades com relação às disciplinas de Físico-Química, o uso de metodologias diferenciadas de ensino, em particular, que incluam contextualização e a utilização da EEEEC, e conceitos de cinética química fundamentais e específicos, tais como quimiosseletividade, regioseletividade e estereosseletividade.

O uso da EEEEC por meio do texto proposto promoveu tanto uma percepção por parte dos discentes de que a disciplina Físico-Química não se trata de uma disciplina de difícil compreensão, embora tenha suas complexidades (que envolvem uso de teorias e fórmulas), quanto o aumento da percepção quanto aos conteúdos de cinética química, em particular, estarem presentes em seus dia a dia e, possivelmente, na atuação deles como profissional no mercado de trabalho. Além disso, quanto às estratégias diferenciadas de ensino, tal como a contextualização e a EEEEC, a atividade proposta nesse trabalho permitiu que o discente, futuro professor, vivenciasse o uso de tais estratégias e ele mesmo avaliasse suas eficiências, de forma diferente ao que ele vivencia nas disciplinas de metodologias do ensino, no qual o discente passa a ser protagonista no uso delas.

Assim, espera-se que esse trabalho possa contribuir para que as estratégias de ensino atualmente adotadas possam ser melhoradas ou que novas estratégias de ensino possam contribuir para melhorar tal cenário.

Além disso, espera-se despertar o interesse dos licenciados que participaram da atividade para a utilização de metodologias como a Estratégia de Ensino Estudo de Caso, que pode promover uma aprendizagem efetiva, visto que proporciona uma experiência diferenciada, pois trabalham em equipe, exercem suas autonomias e tomada de decisões.

REFERÊNCIAS

AMARO, A.; PÓVOA, A.; MACEDO, L. **A arte de fazer questionários**. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Portugal: Porto, 2005.

AUSUBEL, D. P. **Aquisição e retenção de conhecimentos: uma perspectiva cognitiva**. A natureza do significado e da aprendizagem Significativa; Lisboa: Plátano, v. 1, 2003. p. 71-103.

BALL, D. W. **Físico-química**, Volume 2, 1ª edição, ed Cengage Learning, São Paulo, 2014.

BATIGALHIA, F.; **Oxo diperoxo complexos aquirais e quirais de molibdênio**: Estudo das reações de oxidação de 2,2'-biridinas 4,4'-substituídas e sulfetos pró-quirais. 189 f. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de São Carlos, São Paulo, 2004.

BATIGALHIA, F. et al. **Selective and mild oxidation of sulfides to sulfoxides by oxodiperoxo molybdenum complexes adsorbed onto silica gel**. Tetrahedron 57, p. 9669–9676, 2001.

BRUCE, C. D.; BLIEM, C. L.; PAPANIKOLAS, J. M. **“Partial Derivates: Are You Kidding”**: Teaching thermodynamics using Virtual Substance. University of North Carolina. American Chemical Society. 2008.

CARVALHO, L. P. et al. **Chemoselective oxidation of unsaturated organosulfur, selenium and phosphorus compounds by molybdenum oxodiperoxo complexes: A computational investigation**. Inorganica Chimica Acta 467, 351–357, 2017.

CONFERENCIA MUNDIAL SOBRE LA CIENCIA (1999). **La Ciencia para el siglo XXI: Un nuevo compromiso**. Budapeste. UNESCO, Paris, 2000.

COSTA, F. J. **Mensuração e desenvolvimento de escalas: aplicações em administração**. Rio de Janeiro: Ciência Moderna, 2011.

CARSON, E. M.; Watson, J. R. **Undergraduate student’s understandings of entropy and Gibbs free energy**. School of Chemistry, University of Leeds. 2002.

DRIVER, R. et al. **Construindo conhecimento científico na sala de aula**. Química nova na escola, v. 9, n. 5, p 31-40; mai. 1999.

FREIRE, P. **A concepção “bancária” da educação como instrumento da opressão: seus pressupostos, sua crítica**. Pedagogia do Oprimido, v. 17, p. 57-68, 2005.

FREITAS-REIS, I.; FARIA, F. L. **Abordando o tema alimentos embutidos por meio de uma estratégia de ensino baseada na resolução de casos: os aditivos alimentares em foco**. Química Nova na Escola, v. 37, n. 1, p. 63-70, 2015.

FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E.; ROBB, M. A.; CHEESEMAN, J. R.; SCALMANI, G.; BARONE, V.; MENNUCCI, B.; PETERSSON, G.

A.; NAKATSUJI, H.; CARICATO, M.; LI, X.; HRATCHIAN, H. P.; IZMAYLOV, A. F.; BLOINO, J.; ZHENG, G.; SONNENBERG, J. L.; HADA, M.; EHARA, M.; TOYOTA, K.; FUKUDA, R.; HASEGAWA, J.; ISHIDA, M.; NAKAJIMA, T.; HONDA, Y.; KITAO, O.; NAKAI, H.; VREVEN, T.; MONTGOMERY, J. A., JR.; PERALTA, J. E.; OGLIARO, F.; BEARPARK, M.; HEYD, J. J.; BROTHERS, E.; KUDIN, K. N.; STAROVEROV, V. N.; KOBAYASHI, R.; NORMAND, J.; RAGHAVACHARI, K.; RENDELL, A.; BURANT, J. C.; IYENGAR, S. S.; TOMASI, J.; COSSI, M.; REGA, N.; MILLAM, J. M.; KLENE, M.; KNOX, J. E.; CROSS, J. B.; BAKKEN, V.; ADAMO, C.; JARAMILLO, J.; GOMPERS, R.; STRATMANN, R. E.; YAZYEV, O.; AUSTIN, A. J.; CAMMI, R.; POMELLI, C.; OCHTERSKI, J. W.; MARTIN, R. L.; MOROKUMA, K.; ZAKRZEWSKI, V. G.; VOTH, G. A.; SALVADOR, P.; DANNENBERG, J. J.; DAPPRICH, S.; DANIELS, A. D.; FARKAS, Ö.; FORESMAN, J. B.; ORTIZ, J. V.; CIOSLOWSKI, J.; FOX, D. J. Gaussian 09 (Revision D.1), Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009.

HERREID, C. F.; **Sorting potatoes for Miss Bonner**. Journal of College Science Teaching, Vol. 27, No. 4, February 1998.

LIMA, J. F. L. et al.; **A contextualização no ensino de cinética química**. Química Nova na Escola, v. 11, n. 11, p. 26-29, 2000.

MACEDO, S. K. S et al. **O uso de estudo de caso para abordar o conteúdo cinética química no 2º ano do ensino médio**. 52º Congresso Brasileiro de Química; Química e Inovação: Caminho para a Sustentabilidade, Recife – PE. 2012.

MORTIMER, E. F.; AMARAL, L. O. F. **Quanto mais quente melhor: calor e temperatura no ensino de termoquímica**. Química Nova na Escola, v. 7, n. 1, p. 30-34, 1998.

PIETROCOLA, M. **A matemática como estruturante do conhecimento físico**. Caderno brasileiro de ensino de física. Volume 19. Nº 1. p. 89-109. Santa Catarina. 2002.

PINHEIRO, A. N.; MEDEIROS, E. L.; OLIVEIRA, A. C. **Estudo de casos na formação de professores de química**. Química Nova, São Paulo, Sociedade Brasileira de Química, v. 33, n. 9, p. 1996-2002, 2010.

RODRIGUES, S. B. V.; DA-SILVA, D. C.; QUADROS, A. L. **O ensino superior de química: reflexões a partir de conceitos básicos para a química orgânica**. Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte – MG, Química Nova, São Paulo, Sociedade Brasileira de Química, v. 34, n. 10, p. 1840-1845, 2011.

SÁ, L. P.; FRANCISCO, C. A.; QUEIROZ, S. L. **Estudos de Caso em Química**. Química Nova. Vol. 30, No. 3, 731-739, 2007.

SCHNETZLER, R. P. **A pesquisa no ensino de Química e a importância da Química Nova na Escola**. Química Nova na Escola, v. 20, p. 49-53, 2004.

SENSATO, F. R. et al. **Why do peroxomolybdenum complexes chemoselectively oxidize the sulfur centers of unsaturated sulfides and sulfoxides? A DFT analysis**. European journal of organic chemistry, v. 2005, n. 11, p. 2406-2415, 2005.

SILVA JÚNIOR, S. D. S.; COSTA, F. J. **Mensuração e escalas de verificação: uma análise comparativa das escalas de Likert e Phrase Completion**. PMKT–Revista

Brasileira de Pesquisas de Marketing, Opinião e Mídia, v. 15, p. 1-16, 2014.

SILVA, M. M.; SANTOS, M. V. P.; SILVA, J. A. B.; e LONGO, R. L. **Effects of the complexation energy on the thermochemistry and kinetics of oxidation Reações with Oxo-Diperoxo complexes.** XVIII – Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Goiás: Pirenópolis, 2015.

SILVA, O. B.; OLIVEIRA, J. R. S.; QUEIROZ, S. L. **SOS Mogi-Guaçu: contribuições de um Estudo de Caso para a educação química no nível médio.** Química Nova na Escola, Vol. 33, N° 3, ago. 2011.

SILVEIRA, D. T.; CÓRDOVA, F. P. **Métodos de pesquisa,** A pesquisa científica, Volume 2, p. 31-42, 2009.

SOUSA, R. S.; ROCHA, P. D. P.; GARCIA, I. T. S. **Estudo de caso em aulas de química: percepção dos estudantes de nível médio sobre o desenvolvimento de suas habilidades.** Química Nova na Escola, São Paulo, v. 34, n. 4, p. 220-228, 2012.

THOMAZ, P. L. e SCHWENZ, R. W. **College Physical Chemistry student's Conceptions of Equilibrium and Fundamental Thermodynamics.** Department of Chemistry and Biochemistry, University of Colorado, United States of America. 1998.

YIN, R. K. **Estudo de Caso:** Planejamento e Métodos. 3ª ed. Bookman editora, P. 20-38, 2015.

APÊNDICES - A

Questionário - Professores

1) Qual(ais) disciplina(s) você ministra na qual o conceito de cinética química é ensinado?

2) Quais as dificuldades apresentadas pelos alunos nessa(s) disciplina(s)?

3) Como você tem observado o rendimento acadêmico dos alunos nesta disciplina?

4) Com relação aos conteúdos de cinética química, os alunos apresentam ou apresentaram algum obstáculo particular na compreensão desse conceito?

5) Em suas aulas, você já utilizou Contextualização, EEEEC, exercícios com problematização ou outras metodologias. Se sim, como foi a viabilidade da metodologia, a participação dos alunos e o desenvolvimento dele nas avaliações? Como foi o rendimento após a aplicação da(s) metodologia(s)? Se não utiliza, qual o por quê?

APÊNDICES - B

Questionário - Alunos

Afirmações referentes ao conteúdo, à aprendizagem de Físico-Química, EEEC e Cinética química.	Concordo Completamente	Concordo	Prefiro não opinar / Neutro	Discordo	Discordo Completamente
	+2	+1	0	-1	-2
1) Os conteúdos de Físico-Química são de fácil compreensão.					
2) A linguagem utilizada pelos autores das referências bibliográficas usuais é clara e objetiva.					
3) Cinética química possui muitas fórmulas e cálculos.					
4) É possível relacionar os conteúdos com cotidiano de cada um.					
5) No mercado de trabalho na área de Química se utiliza cinética química.					
6) A contextualização promove a aprendizagem dos conteúdos de cinética química					
7) A estratégia de ensino estudo de caso promove aprendizagem dos conteúdos de cinética química					
8) A cinética química só leva em consideração a velocidade das reações.					
9) A velocidade de uma reação está relacionada com a energia de ativação					
10) A espontaneidade de uma reação está relacionada com a velocidade dessa reação					
11) A variação da energia de Gibbs de uma reação fornece informações sobre a espontaneidade da reação					
12) Quimiosseletividade, regioseletividade e estereosseletividade são conceitos abordados nas disciplinas de Físico-Química.					
13) Reação quimiosseletiva é aquela em que um grupo funcional da molécula reage sem que outras funcionalidades potencialmente reativas sejam afetadas.					
14) Uma reação que leva à formação de produtos menos estáveis termodinamicamente ($\Delta_r G$ menos negativo, reação menos espontânea), mas possui energia de ativação mais baixa, possui controle termodinâmico. E uma reação que leva à formação dos produtos mais estáveis termodinamicamente, mas com energia de ativação mais alta, possui controle cinético.					
15) Um substrato que possui dois grupos funcionais suscetíveis à reação de oxidação promovida por um agente oxidante deverá preferencialmente reagir para formar um produto em detrimento de outro se o agente oxidante for quimiosseletivo.					

APÊNDICES - C

Estudo do Caso: Os medicamentos da minha avó

Márcio Marcos da Silva

Bem, inicialmente gostaria de me apresentar: me chamo Marcos e sou aluno do 7º período de Química licenciatura, da Universidade Federal de Pernambuco. Certa vez, estava na casa de minha avó, a Dona Samara Gertrudes, uma senhora de 72 anos de idade, 1,65 m de altura e 65 Kg de massa corporal. Ao observar minha avó, percebi que ela tomava vários medicamentos regularmente, indicados pelo seu médico. Vi minha vó tomando alguns deles e, assim que ela terminou, perguntei o nome e pra quê eles serviam. Ela falou assim:

— Tomo esse que se chama omeprazol para tratar de úlceras gástricas, tolmesoxide é um vasodilatador, atenolol para controlar minha pressão arterial e tenho outro lá dentro, que no momento não recorro do nome agora, mas sei que é para o coração.

— Poxa vó! São muitos, né!?

— É assim, meu neto, quando chegamos numa certa idade, é assim mesmo que levamos a vida.

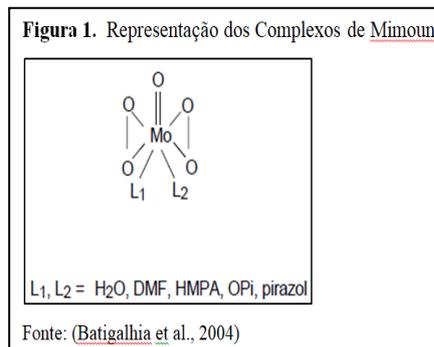
O dia passou, voltei pra casa e ainda ficava pensando na quantidade de medicamentos que minha pobre vó toma. Como um químico curioso e investigador em formação que sou, fiz uma pesquisa em relação a esses medicamentos e achei uma característica em comum entre eles: dois deles são sulfóxidos e os outros dois são sintetizados a partir de um sulfóxido. Isso me deixou muito intrigado. Então, procurei saber mais sobre a síntese dos sulfóxidos e descobri que são sínteses agressivas, quanto ao meio ambiente e às condições reacionais, e de alto custo. Com isso, fiquei pensando como poderia ajudar no estudo e, em particular, na síntese de fármacos. Estava com um problema em minhas mãos!

A partir daí, apresentei meus questionamentos (o problema) à minha professora de físico-química, a professora Júlia, em que a mesma propôs um projeto de pesquisa no qual seria utilizada a química teórica e computacional, para o estudo de complexos oxo-diperoxo de molibdênio, em que vários trabalhos recentes da literatura mostravam que vinham sendo testados quanto à síntese seletiva de sulfóxidos.

De início, fizemos uma vasta pesquisa bibliográfica sobre a síntese de sulfóxidos: quais são os métodos e os agentes oxidantes mais utilizados, e suas vantagens e desvantagens. Realmente, após essa pesquisa, vimos que os complexos oxo-diperoxo de molibdênio parecem promissores nessa tarefa, visto que esses complexos são oxidantes moderados, apresentam rendimentos mais elevados e condições mais brandas de manuseio e de aplicação

em reações que os procedimentos mais tradicionais, minimizam a produção de subprodutos, são seletivos e “verdes”. (DE CARVALHO et al., 2017).

O Molibdênio é o elemento que ocupa o 5º período e o grupo 6 da tabela periódica. Assim como os outros elementos deste grupo, possui vários estados de valência, mas o estado de maior interesse é o +6, visto que é a forma mais estável do metal e por ele possuir a camada “d” vazia, possibilitando-o formar complexos com elementos doadores de elétrons, como, por exemplo, o oxigênio e o nitrogênio. Dentre os complexos com atividade oxidante, destacam-se os complexos do tipo oxo-diperoxo de Molibdênio, coordenados com bases como HMPA (Hexametilfosforamida), DMF (Dimetilformamida), piridina, N-óxido de piridina, HMPT (Hexametilfosfotriamida), pirazol e água, conhecidos como complexos de Mimoun (BATIGALHIA et al., 2001).



Vale ressaltar que complexos deste tipo foram inicialmente utilizados em epoxidação de olefinas (o substrato), ou seja, na reação de oxidação da dupla ligação de grupos alquenos, por exemplo, para a formação do produto epóxido. Nessas reações, um dos átomos de oxigênio peróxido do complexo ataca a dupla ligação, sendo transferido para a molécula do substrato. Com o tempo, esses complexos também foram sendo utilizados na oxidação de uma variedade de outros substratos, incluindo de sulfetos.

Mas se esses complexos oxidam tanto duplas ligações quanto grupos sulfetos, se eu estiver interessado na oxidação de substrato que contenha esses dois grupos funcionais, tal como o metil-vinil-sulfeto, qual dos dois sítios, ambos suscetíveis à oxidação, será oxidado por tais complexos?

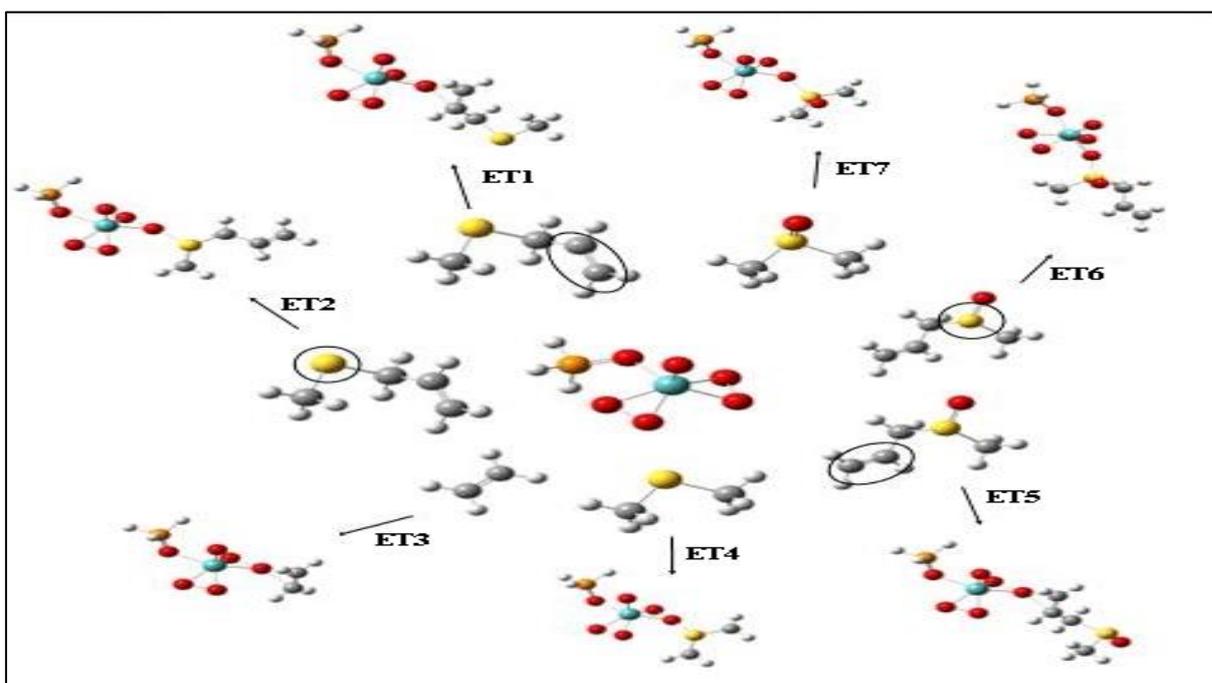
Ao fim da pesquisa bibliográfica, decidimos investigar a quimiosseletividade de tais reações do ponto de vista teórico-computacional. Então, partimos para os cálculos em supercomputadores e simulamos as reações do sulfeto com o complexo de Molibdênio do tipo [MoO(O₂)₂(OPH₃)], nos quais foram investigadas duas hipóteses: I) obtenção do produto epóxido: nesse caso, um dos átomos de oxigênio peróxido do complexo ataca a ligação dupla C-C (reação de epoxidação) e forma o produto epóxido; II) obtenção do produto sulfóxido: nesse caso, um dos átomos de oxigênio peróxido do complexo ataca o enxofre e forma o produto sulfóxido (produto desejado).

Também foram testados outros substratos, tais como o dimetil-sulfeto e o eteno, ambos com um dos grupos funcionais, para comparação da reação deles com as reações do substrato contendo os dois grupos funcionais; e também substratos contendo já grupos

sulfetos oxidados, tais como metil-vinil-sulfóxido e o dimetil-sulfóxido, visto que a maioria dos agentes oxidantes não são tão suaves para interromper a oxidação no nível sulfóxido. Esse último aspecto é de extrema relevância, tendo em vista que os fármacos com as ações desejadas citadas anteriormente, em sua maioria, são sulfóxidos e, portanto, os agentes oxidantes devem ser hábeis a parar a oxidação no nível sulfóxido.

Na Figura 2 estão representadas as reações de oxidação e os respectivos estados de transição (ET) formados a partir das reações do complexo oxodiperoxo de molibdênio frente ao metil-vinil-sulfeto (ET1 – oxidação à dupla ligação e ET2 – oxidação do sulfeto), eteno (ET3), dimetil-sulfeto (ET4), metil-vinil-sulfóxido (ET5 – oxidação à dupla ligação e ET6 – oxidação do sulfóxido) e dimetil-sulfóxido (ET7).

Figura 2. Representação das reações de oxidação dos complexos oxodiperoxo de molibdênio frente ao metil-vinil-sulfeto (ET1 – oxidação à dupla ligação e ET2 – oxidação do sulfeto), eteno (ET3), dimetil-sulfeto (ET4), metil-vinil-sulfóxido (ET5 – oxidação à dupla ligação e ET6 – oxidação do sulfóxido) e dimetil-sulfóxido (ET7).



Fonte: O autor

Para cada reação investigada, a oxidação foi promovida pelo oxigênio peróxido, de acordo com a literatura (SENSATO et al., 2005). Para a formação dos estados de transição ET1, ET3 e ET5 o ataque ocorreu na dupla ligação dos substratos, formando, portanto, os correspondentes produtos epóxidos; para os ET2 e ET4, o ataque ocorre no enxofre, formando os correspondentes produtos sulfóxidos; e para os ET6 e ET7, os sulfóxidos sofreram oxidação, formando as respectivas sulfonas.

Os resultados obtidos na minha pesquisa científica estão mostrados na Tabela 1 e sugerem que a barreira de ativação, ou seja, o valor de $\Delta^\ddagger G$, é menor para a oxidação do grupo sulfeto que para a oxidação do alqueno, mesmo embora a oxidação da dupla reação seja mais espontânea ($\Delta_r G$). A Figura 3 mostra uma representação esquemática desse comportamento. Essas reações experimentalmente mostram que o produto sulfóxido é formado em detrimento do produto epóxido (BATIGALHIA et al., 2001). Assim, a reação apresenta controle cinético

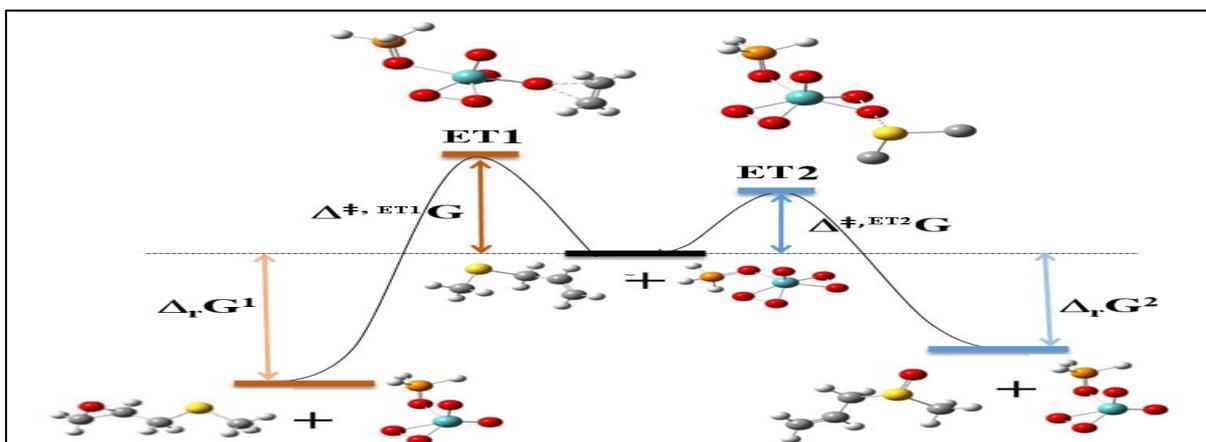
Comportamento similar é observado na oxidação sucessiva, ou seja, na reações de oxidação do metil-vinil-sulfóxido, ou seja, menor barreira de ativação foi obtida para oxidação do sulfóxido que para a oxidação da dupla ligação. Além disso, o produto sulfona é favorecido termodinamicamente (processo mais espontâneo, $\Delta_r G$ mais negativo) que o produto epóxido, mesmo embora para a oxidação sucessiva ocorrer, é necessário que o sistema sobrepeça uma barreira de ativação pouco maior que para a primeira oxidação (de sulfeto a sulfóxido).

Tabela 1. Resultados obtidos com o nível de teoria B3LYP/6-311+G(2df,2p)/dhf-SVP. Em parênteses, estão as diferenças obtidas com relação aos valores obtidos por Sensato et al. (2005) utilizando outro nível de cálculo.

ET	$\Delta^\ddagger G$	$\Delta_r G$
I	27,3 (-0,9)	-33,3 (-1,1)
II	17,9 (1,1)	-32,9 (-0,6)
III	28,7 (-0,5)	-33,1 (-0,9)
IV	17,9 (0,5)	-32,5 (-1,1)
V	27,7 (0,0)	-32,3 (-2,1)
VI	20,3 (1,2)	-52,5 (-0,3)
VII	20,2 (0,4)	-52,8 (-0,3)

Fonte: O autor

Figura 3. Ilustração de um típico perfil da energia de reação da oxidação de substratos organosulfetos instaturados por complexos do tipo $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{L}]$ via mecanismo de Sharples. A reação de $[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{OPH}_3)] + \text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2=\text{CH}_2$ via ET1 (oxidação da dupla ligação) produz o epóxido 2-((metiltio)metil)-oxirano e via ET2 (oxidação do sulfeto) produz o metil-vinil-sulfóxido.



Fonte: Adaptado da referência CARVALHO et al., 2017.

Quando fui mostrar meus resultados à professora Júlia, vale ressaltar que estava super feliz com o andar dos meus esforços e com os resultados obtidos, ela me fez a seguinte pergunta:

— *Certo Marcos, maravilha!! Agora me explique como isso vai solucionar seu problema, me respondendo: os complexos oxo-diperoxo de molibdênio são quimiosseletivos à oxidação do sulfeto, mesmo em substratos que contenham grupos alquenos, também suscetíveis à oxidação? Essas reações poderiam ser úteis para na síntese seletiva de sulfóxidos?*

Estou pensando até agora como respondê-la...

A fim de ajudar o Marcos a responder a professora Júlia, peço a vocês, que também são graduandos de Química – Licenciatura, a fazer pesquisas e propor a melhor resposta para ele.

Referências:

CARVALHO, L. P. et al. **Chemoselective oxidation of unsaturated organosulfur, selenium and phosphorus compounds by molybdenum oxodiperoxo complexes: A computational investigation** *Inorganica Chimica Acta* 467 (2017) 351–357.

BATIGALHIA, F. et al. **Selective and mild oxidation of sulfides to sulfoxides by oxodiperoxo molybdenum complexes adsorbed onto silica gel**, *Tetrahedron* 57 (2001), 9669–9676.

Sensato, F. R. et al. **Why do peroxomolybdenum complexes chemoselectively oxidize the sulfur centers of unsaturated sulfides and sulfoxides? A DFT analysis.** *European journal of organic chemistry* 11 (2005) 2406-2415.

