

Avaliação e aplicação de simulação computacional no ensino de equilíbrio químico

Evaluation and application of computational simulations software in the education of chemical equilibrium

Claudia Carobin Orlandi
Mariângela de Camargo
Agostinho Serrano de Andrade Neto

RESUMO

O conceito de Equilíbrio Químico tem sido apontado por muitos autores como um conteúdo complexo para o ensino e a aprendizagem. Neste artigo, investigamos se o uso de simulações computacionais, Lechat, auxilia os estudantes a explicar e compreender o equilíbrio químico nos diferentes níveis de representação (macroscópico, microscópico e simbólico), na evolução de diferentes situações de um fenômeno químico. Utilizando como instrumento de obtenção de dados: Pré-teste, Guia de simulação embasada na metodologia POE (Predizer-observar-Explicar) e pós-teste.

Palavras-chave: educação química, equilíbrio químico, simulação computacional, Lechat.

ABSTRACT

The concept of chemical equilibrium has been pointed for many authors as problematic in respect to education and learning. The present work investigates the possibility of using computational simulations, Lechat, in the development of the concept of Chemical Equilibrium, as well as the influence of different variable related to this concept and the accomplishment of the joint between the representative levels (macroscopic, microscopic and symbolic) that this concept implies. We use as instruments of data collection: Pre Test, Guide of simulation according to POE (Predict – Observe – Explain) methodology and after test.

Key words: chemical education, chemical equilibrium, computational simulations, Lechat.

Claudia Carobin Orlandi é Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, ULBRA Canoas.

Mariângela de Camargo é Doutora em Engenharia, Ciências dos Materiais e Profa. no Curso de Química, ULBRA Canoas.

Agostinho Serrano de Andrade Neto é Doutor em Química e Prof. do Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática, ULBRA Canoas.

Introdução

O conceito de Equilíbrio Químico tem sido apontado por muitos autores, como um conceito de grande importância para o ensino de Química (MASKILL; CACHAPUZ, 1989), uma vez que envolve outros temas, tais como reação química, reversibilidade das reações e cinética. Em geral, as abordagens encontradas nos livros didáticos, bem como as observadas em sala de aula tendem a enfatizar aspectos quantitativos (matemáticos) relacionados ao conceito, em detrimento de uma abordagem qualitativa, ou seja, a compreensão do que ocorre em um sistema no estado de equilíbrio ao nível microscópico (MACHADO, 1996).

O estudo da Química torna-se mais significativo quando estudado e articulado nos três níveis de representação de um fenômeno químico: o macroscópico, o microscópico e o simbólico (WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001). O nível macroscópico é caracterizado pelos aspectos sensoriais do fenômeno químico (experimentos, observáveis e mensuráveis, dentre outros). O nível simbólico é caracterizado pela representação abstrata matemática criada para representar o fenômeno químico (símbolos, equações, coeficientes, gráficos, números) e o nível microscópico é caracterizado pela representação do comportamento cinético-molecular do fenômeno químico (partículas, átomos, moléculas e íons) (WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001).

Para articular os três níveis em determinado assunto é importante que o estudante apresente um conhecimento mais sólido e inclusive a habilidade de visualização espacial (para imaginar microscopicamente o rearranjo de átomos e moléculas em uma reação química). O estudo de sistemas em Equilíbrio Químico, também é importante para desenvolver nos estudantes a capacidade de articulação entre os níveis de representação de um fenômeno químico (WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001).

Vários estudos, disponíveis na literatura, mostram que os estudantes apresen-

tam várias concepções alternativas e dificuldades de aprendizagem sobre conceitos e situações de Equilíbrio Químico. Em geral, os estudantes nem sempre reconhecem as entidades que se transformam e as que permanecem constantes em uma reação química, mas tendem a centrar suas explicações em nível macroscópico (MORTIMER; MIRANDA, 1995).

Uma das concepções alternativa mais citada por diferentes autores é a idéia de um Equilíbrio Químico Estático ao invés de dinâmico. O conceito de Equilíbrio Químico Dinâmico demanda o prévio entendimento de reações químicas. Microscopicamente, a matéria tem movimento e transformações de substâncias, não sendo estática (sem movimento inerente) e nem contínua (sem ocorrência de transformações) (VAN DRIEL, 1998; ANDERSON, 1990).

A incapacidade de representar mentalmente reações, imaginando o agregamento de átomos formando moléculas, bem como a atividade cinética das moléculas (NOVICK; NUSSBAUM, 1978) é uma das causas de concepções alternativas encontradas sobre o caráter dinâmico do Equilíbrio (VAN DRIEL, 1998).

Contudo, a idéia de que uma substância pode ser transformada em outra não é facilmente aceita, assim como a idéia de reversibilidade. Existe, a concepção de que a reação inversa somente inicia depois que todos os reagentes transformaram-se em produtos (FURIÓ; ORTIZ, 1983; RAVIOLO; BAUMGARTNER; LASTRES; TORRES, 2000).

O presente trabalho apresenta uma abordagem pedagógica, no sentido de explicar e explorar fenômenos e processos (BARNEA; DORI, 2000), bem como proporcionar aos estudantes o desenvolvimento da capacidade de compreensão do equilíbrio químico nos diferentes níveis de representação, e auxiliá-los na competência representativa. Para isso, utilizaremos o software de simulação *Lechat* (PAIVA, 2000), desenvolvido para a área de ensino.

O software Lechat é um simulador para sistemas gasosos homogêneos, desenvolvido para alunos de Ensino Médio ou Superior, dependendo do tipo de abordagem para cada nível de Ensino (PAIVA, 2000). O programa é bastante interativo possibilitando ao estudante a manipulação de variáveis e a observação simultânea, tanto a nível microscópico quanto simbólico, da evolução de uma reação química até atingir o equilíbrio químico.

A utilização de tecnologias educacionais, em particular, softwares de simulação, proporciona aos estudantes a oportunidade de manipularem variáveis e a partir disto encontrar relações entre os conceitos (JIMOYIANNIS; KOMIS, 2001). No nosso caso, utilizamos um software de Equilíbrio Químico com uma variedade de reações que podem ser selecionadas e manipuladas. Essas reações, quando simuladas, apresentam a construção dos gráficos (nível simbólico) e a representação microscópica de átomos e moléculas ocorrendo simultaneamente, desde o estado inicial da reação até atingir o equilíbrio químico da reação.

Neste artigo, investigamos se o uso deste software de simulação auxilia os estudantes nas seguintes situações de Equilíbrio Químico:

1. Aproximação do equilíbrio para as concentrações de reagentes e produtos

Nesta situação de Equilíbrio Químico, investigaremos se os estudantes apresentam um entendimento qualitativo de que as concentrações dos reagentes e dos produtos variam com a aproximação do equilíbrio. Para isso, denominamos instantes t_0 (estado inicial da reação, logo que misturamos os reagentes e os produtos) e instante t_1 (para indicar o estado intermediário da reação química).

Na literatura, verificamos que aparecem dificuldades em alguns estudantes na compreensão de que inicialmente a concentração de reagentes é máxima e a de produtos, zero (instante t_0). Com o passar

do tempo (instante t_1), a concentração dos reagentes diminuiu e a dos produtos aumenta, até chegar ao equilíbrio.

2. Concentração dos reagentes e dos produtos no equilíbrio químico da reação

Nesta situação de equilíbrio, verificaremos se os estudantes apresentam a concepção de que as concentrações dos reagentes e dos produtos variam quando atingem o equilíbrio químico da reação, podendo haver elevada concentração de reagentes, elevada concentração de produtos ou situações intermediárias. Isso porque a concepção alternativa mais frequente nos estudantes é de que as concentrações dos reagentes e dos produtos no equilíbrio químico da reação são iguais (GORODETSKY; GUSSARSKY, 1986; HACKLING; GARNETT, 1985).

3. Representação microscópica do equilíbrio químico da reação

Destaca-se nesta situação estudada, a dificuldade que os estudantes têm de avaliar as transformações em nível microscópico. Desejamos investigar se os estudantes apresentam a concepção de que no equilíbrio químico da reação todas as espécies químicas estão presentes num equilíbrio químico dinâmico.

Metodologia

Utilizamos como instrumentos de coleta de dados: Pré-Teste, Guia de Simulação e Pós-Teste. Toda a atividade foi desenvolvida tendo como base as concepções alternativas dos estudantes, documentadas na literatura. Estes instrumentos constam de questões abertas e descritivas.

O guia de simulação foi desenvolvido de acordo com a metodologia do POE (*Predict – Observe – Explain*) (TAO; GUNSTONE, 1999). Atualmente, alguns estudos utilizam a metodologia do POE para investigar conceitos relacionados à

Ciência (TAO; GUNSTONE, 1999; WHITE; GUNSTONE, 1992).

Na etapa de previsão do guia de simulação, os estudantes devem prever e justificar o resultado de um evento específico. A observação é o passo seguinte da previsão. O estudante, seguindo o seu guia, simula no computador o evento correspondente à fase de previsão. Finalmente, na etapa de explicação, o estudante deve explicar discrepâncias entre sua previsão e observação.

Desse modo é importante salientar a importância de seguir seqüencialmente cada etapa da atividade, para que a mesma não perca a sua essência e conseqüentemente os estudantes não percam em aprendizado. O que mais ocorre durante a simulação é a curiosidade de observar a simulação antes da etapa de previsão e assim o estudante torna-se incapaz de fazer uma previsão, pois já sabe qual é a resposta certa.

A aplicação dos instrumentos de coleta dos dados ocorreu em uma turma do curso de Farmácia, durante o período de instrução da disciplina de Química Geral II, na Universidade Luterana do Brasil, em Canoas – RS, no segundo semestre de 2003. A amostra é constituída em um total de 43 estudantes.

Na análise dos instrumentos de coleta dos dados, foi utilizado de maneira combinatória o enfoque qualitativo e quantitativo, na pesquisa em Ensino de Ciências e Matemática. Foi inicialmente realizada

uma análise interpretativa, para classificarmos as respostas de cada uma das situações de Equilíbrio Químico estudadas, de acordo com um nível de compreensão específico (JIMOYIANNIS; KOMIS, 2001).

- A. Compreensão total:** As respostas demonstram entendimento conceitual claro, sem concepções alternativas e perfil científico;
- B. Compreensão com elementos errôneos:** Possui marcadamente um perfil científico, mas com o aparecimento de concepções alternativas.
- C. Concepções alternativas:** Marcadamente com o uso de concepções alternativas, que não demonstram a compreensão da situação-problema.
- D. Compreensão parcial:** Pobre descrição de fenômeno e as respostas refletem basicamente as concepções alternativas.
- E. Respostas indefinidas:** Não há respostas para serem analisadas.

Resultados e discussão

Através do teste de Wilcoxon para amostras pareadas, analisamos se houve diferença entre dois momentos (pré e pós-teste) para o grupo de estudantes. Os resultados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Comparação entre pré e pós-teste para as três situações estudadas.

Programa Lechat				
Situações estudadas	Resultado	n	%	
Representação do equilíbrio químico no nível microscópico (Nível microscópico)	Pré > Pós	3	7%	
	Pré < Pós	28	65%	
	Pré = Pós	12	28%	
	Total	43	100%	
Aproximação do equilíbrio químico para as concentrações dos reagentes e produtos (Nível simbólico)	Pré > Pós	4	9%	
	Pré < Pós	30	70%	
	Pré = Pós	9	21%	
	Total	43	100%	
Concentração dos reagentes e produtos no equilíbrio químico (Nível simbólico)	Pré > Pós	3	7%	
	Pré < Pós	22	51%	
	Pré = Pós	18	42%	
	Total	43	100%	

Considerando os resultados expressos na tabela 1 em função da análise dos resultados obtidos com o pré e pós teste dos alunos. Para a situação de representação microscópica do equilíbrio químico, verificamos que vinte e oito estudantes (65%) apresentaram resultados em que o pós-teste foi maior do que o pré-teste ($\text{Pré} < \text{Pós}$), doze (28%) com resultados em que o pré-teste foi “igual” ao pós-teste ($\text{Pré} = \text{Pós}$) e três estudantes (7%) que decresceram em relação à hierarquia, ou seja, o resultado do pré foi maior do que o pós-teste ($\text{Pré} > \text{Pós}$). Assim, pelos resultados apresentados verifica-se que houve evolução conceitual, nesta situação, ao nível de representação microscópica.

Essa contribuição deveu-se basicamente, ao conceito simbólico da concentração, que estava de certa forma ligada à situação de aproximação do equilíbrio. Por exemplo, se os estudantes compreendem que no início da reação a concentração de reagentes é alta e de produtos, zero, microscopicamente irão imaginar que aparecerá apenas moléculas de reagentes. Na fase intermediária, sabemos que a concentração dos reagentes diminuiu e a dos produtos aumentou devido a sua formação, então microscopicamente, a representação deverá ter moléculas de reagentes e de produtos no mesmo sistema. Assim, é possível que a representação microscópica do programa tenha contribuído para o aprendizado dessa situação, no nível de representação microscópica.

Destacamos nesta situação a dificuldade que os estudantes apresentaram de avaliar as transformações no nível microscópico, ou seja, avaliar o equilíbrio químico dinâmico da reação neste nível de representação, evidenciado no pré-teste. Após o uso da atividade computacional verificamos o grande auxílio das simulações em função dos resultados obtidos no pós-teste, aonde temos a inversão dos resultados iniciais, ou seja, um número significativo de estudantes compreendeu que

um equilíbrio químico dinâmico ocorre quando reagentes e produtos coexistem no mesmo sistema, havendo inclusive indicações (mostradas pelos estudantes em representações) que ocorrem colisões e transformações no nível representacional microscópico.

Para a situação de aproximação do Equilíbrio Químico para as concentrações dos reagentes e dos produtos, os resultados indicam que houve aprendizado da referida situação após o uso do programa. Verifica-se que trinta estudantes (70%) apresentaram resultados em que o pós-teste foi maior do que o pré-teste ($\text{Pré} < \text{Pós}$).

O programa de simulação Lechat apresenta uma abordagem que parte de uma representação simbólica, muito bem elaborada no software para o nível de representação microscópica. Sendo assim, um dos motivos para os bons resultados apresentados é a possível visualização, passo a passo, da construção dos gráficos obtidos a partir das informações fornecidas e manipuladas pelos estudantes no programa.

Finalmente, para a situação de concentração dos reagentes e produtos no equilíbrio químico da reação, verifica-se na tabela que dos quarenta e três estudantes, vinte e dois (51%) obtiveram os resultados do pós-teste superiores ao do pré, indicando aprendizado nesta situação. Dezoito estudantes (42%) permaneceram no mesmo patamar de compreensão, ou seja, as respostas do pré e pós-teste foram praticamente iguais e apenas três estudantes (7%) obtiveram resultados em que o pré-teste foi superior ao pós-teste.

Conclusão

O programa computacional Lechat apresenta uma abordagem que articula o nível de representação simbólico e o microscópico simultaneamente, não havendo no programa nenhuma abordagem para a representação macroscópica, desta maneira sugere-se que

para esse nível seja trabalhado com outro programa ou em aula prática conjuntamente. Deste modo, verificamos que o uso adequado de um guia de simulação vinculado a um programa computacional específico à área de ensino favorece a compreensão de determinados conceitos e situações de Equilíbrio Químico, permitindo refletir e compreender que um fenômeno químico pode ser estudado e articulado nos três níveis de representação.

Sobre a metodologia do POE, parece-nos ser bem indicada para este tipo de atividade, pois foi muito eficaz e mostrou uma importância muito grande em nossos resultados. Os estudantes aceitaram e gostaram desta metodologia e inclusive, podemos afirmar que os estudantes que souberam respeitar cada fase da seqüência Predizer – Observar – Explicar apresentaram resultados bastante significativos.

Um questionário de avaliação referente à atividade de simulação computacional foi aplicado para avaliar a metodologia utilizada. Neste, verificamos que os estudantes gostaram de utilizar ferramentas computacionais adicionalmente às aulas de Química Geral, além disso, a atividade em grupos favorece a troca de idéias e o debate das questões propostas.

Referências

- ANDERSON, B. Pupil's conceptions of matter and its transformation. *Studies in Sci. Educ.*, 1990, 18, p.53-58.
- BARNEA, N.; DORI, Y. J.; Chemical Education; *Res. Prat. Eur.*, 2000, 1.
- FURIÓ C. J., ORTIZ, E. Persistência de errores conceptuales en el estudio del Equilibrio Químico. *Enseñanza de Las Ciencias*, 1983, p 15-20.
- GRODETSKY, M.; GUSSARSKY, E. Misconceptualization of the chemical equilibrium concept as revealed by different evaluation methods. *Eur. J. Sci. Edu.*, 1986, 8(4), p 427-441.
- HACKLING, M. W.; GARNETT, P. J. Misconceptions of Chemical Equilibrium. *Eur. J. Sci. Edu.*, 1985, 7(2), p 205-214.
- http://nautilus.fis.uc.pt/wwwqui/equilibrio/port/eqq_lechat2.html, acesso em maio 2002.
- JIMOYIANNIS, A.; KOMIS, V. Computer simulations in physics teaching and learning: a case study on student's understanding of trajectory motion. *Computers & Education.*, 2001, 36, p 183-204.
- MACHADO, A. H.; Equilíbrio Químico; *Quím. Nova na Escola*, 1996, 4.
- MASKILL, R.; CACHAPUIZ, A. F. C. Learning about the chemistry topic of equilibrium: The use of word association tests to detect developing conceptualization. *Int. J. Sci. Educ.*, 1989, 11.
- MORTIMER, E. F.; MIRANDA, L. C. Transformações: concepções de estudantes sobre reações químicas. *Quím. Nova na Escola*, 1995, 2. Disponível em: <<http://www.foco.lcc.ufmg.br/ensino/qnesc/qnesc-02.html>>. Acesso em dezembro 1995.
- NOVICK, S.; NUSSBAUM, J. Junior High School Pupil's Understanding of the Particulate Nature of Matter: An Interview Study. *Sci. Educ.*, 1978, 62(3), p 273-281.
- PAIVA, J. C. M. Ensino do Equilíbrio Químico: Subtilezas e Simulações Computacionais. Tese de Doutorado. Universidade de Aveiro, Portugal, 2000.
- RAVILOLO, A.; BAUMGARTNER, E.; LASTRES, L.; TORRES, N. Logros y dificultades de alumnus universitarios en equilibrio químico: uso de un test con proposiciones. *Educación Química*, 2000, 12(1), p.18-26.
- TAO, P. K.; GUNSTONE, R. F. The process of Conceptual Change in Force and Motion during Computer-Supported Physics Instruction. *J. Res. Sci. Teaching.*, 1999, 36(7), p.859-882.
- VAN DRIEL, J. H. Developing secondary student's conceptions of chemical reactions: the introduction of chemical equilibrium. *Int. J. Sci. Educ.*, 1998, 20(4), p.379-392.
- WHITE, R. T.; GUNSTONE, R. F. Probing understanding. London: Falmer, 1992.
- WU, H. K.; KRAJCIK, J. S.; SOLOWAY, E. Promoting understanding of chemical representations: student's use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching.* 2001, 38(7), pp. 821-842.