

QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO MÉDIO: DESENVOLVIMENTO DE PROJETO DE PESQUISA DE RELEVÂNCIA AMBIENTAL

Alexsandro da Silva Cavalcanti¹

RESUMO: A partir da conclamação a uma maior participação das mulheres na Ciência durante o Ano Internacional da Química e com o intuito de estimular estudantes de Ensino Médio a desenvolverem trabalhos de iniciação científica, foi iniciado o projeto-piloto Química Teórica e Computacional no Ensino Médio numa escola pública estadual de Pernambuco. Três estudantes participaram de minicursos sobre Química Teórica e Computacional e desenvolveram o projeto de pesquisa "Aquecimento global e sua relação com as moléculas de água (H₂O) e gás carbônico (CO₂) – um estudo teórico.", no qual utilizaram softwares de cálculo e visualização molecular para simular o complexo H₂O-CO₂ e comparar seus parâmetros com artigos de referência. Conforme idealizou o programa "quero ser professor, quero ser cientista" do MEC, as estudantes sentiram-se estimuladas pela iniciação científica e estão atualmente envolvidas com atividades referentes à Química.

PALAVRAS-CHAVE: Visualização molecular, Química teórica, Complexo H₂O-CO₂, Aquecimento global, Ensino Médio.

INTRODUÇÃO

O ano de 2011 foi escolhido para ser o Ano Internacional da Química (AIQ) durante a 63^a sessão da Assembleia Geral da Organização das Nações Unidas (ONU). O objetivo do AIQ foi celebrar as grandes descobertas e os últimos avanços científicos e tecnológicos da Química, promovendo mundialmente o conhecimento e a educação química em todos os níveis. O principal motivo de 2011 ser escolhido como o AIQ foi a comemoração do 100^o aniversário do Prêmio Nobel de Química concedido a Marie Curie pela descoberta dos elementos radioativos polônio e rádio. Considerando a importância de Marie Curie

para a Química e para o desenvolvimento científico, o comitê organizador do AIQ no Brasil conclamou a participação em massa das mulheres para seguir uma trajetória científica. Assim, ainda em 2011, foi desenvolvido numa escola pública estadual, de referência em Ensino Médio, no município de Abreu e Lima (PE), um projeto-piloto com três estudantes. O projeto-piloto, denominado Química Teórica e Computacional no Ensino Médio (QTCEM), teve por objetivo incentivar as estudantes a desenvolverem trabalhos de iniciação científica no campo da Química Teórica e Computacional a partir da utilização de tablets que

¹ Alexsandro da Silva Cavalcanti, IF Pernambuco - Campus Afogados, alexsandro.cavalcanti@afogados.ifpe.edu.br

foram doados pela Secretaria de Educação do Governo do Estado de Pernambuco.

A partir do projeto-piloto, foi desenvolvido com as estudantes um trabalho que envolveu química teórica e a questão ambiental. Dessa forma, em 2012, iniciou-se a execução do trabalho Aquecimento global e sua relação com as moléculas de água (H_2O) e gás carbônico (CO_2) – um estudo teórico. Nesse trabalho, as estudantes conseguiram utilizar simulações computacionais para verificar e entender o motivo das moléculas de água e gás carbônico serem considerados gases de efeito estufa, além de simularem a existência de um complexo de van der Waals entre tais moléculas, o complexo H_2O-CO_2 , mais estável que ambas as moléculas isoladas. A comparação com artigos científicos publicados em periódicos reconhecidos deram maior confiabilidade aos dados calculados.

No término da execução do projeto-piloto QTCEM, em 19 de setembro de 2013, o Ministério da Educação publicou, no Diário Oficial da União, a portaria Nº 893, de 18/09/2013, que lança o programa “Quero ser professor, quero ser cientista”. O referido programa tem por objetivo estimular os estudantes a seguirem a carreira docente e/ou de cientista, com ênfase em matemática, física, química e biologia. Justamente para sanar o que disseram Arroio e colaboradores (2006, p. 173): “Química, Física e Matemática soam como carreiras que não despertam interesse nos jovens”. Portanto, há uma grande necessidade de utilizar formas alternativas de ensinar Química. Sanger e Badger II (2001) mostraram como estratégias de visualização por computador podem ser úteis como ferramenta auxiliar aos métodos tradicionais de ensino de Química. A visualização é como se fosse uma habilidade metacognitiva necessária para compreender modelos em Química, onde muitos conceitos químicos dependem dessa habilidade de visualizar (RAMOS E SERRANO (2013) e LOCATELLI (2011)).

Assim, considerando a carência de es-

tudos no Brasil e na América Latina com fundamentação no ensino de Química sobre o potencial da modelagem molecular e o fato de vários periódicos especializados em educação pouco publicarem trabalhos sobre modelagem molecular, segundo Ramos e Serrano (2013), este trabalho tem por objetivo comprovar que ensinar Química a partir de estudos teóricos computadorizados de modelagem molecular, além de não ser entediante – como considerado por Arroio et al. (2006) –, deverá resultar em retenção de aprendizagem, permitindo estimular alguns estudantes a seguirem carreira científica, e, talvez, de professores de Química, como idealiza o Programa quero ser professor, quero ser cientista.

METODOLOGIA

A fim de desenvolver o projeto-piloto, as estudantes participaram de minicursos de revisão de Química, principalmente a partir de artigos, tais como “modelos teóricos para a compreensão da estrutura da matéria” de Almeida e Santos (2001), “ligações químicas” de Duarte (2001) e Toma (1997), “interações intermoleculares” de Rocha (2001), “modelagem molecular” de Santos (2001) e Rodrigues (2001), “espectroscopia molecular” de Oliveira (2001) e “a Química atmosférica e no efeito estufa” de Tolentino e Rocha-Filho (1998) e Mozeto (2001).

Tendo enfatizado o caráter teórico do projeto, iniciou-se o desenvolvimento do curso de Química Computacional propriamente dito. Isto é, as estudantes aprenderam a utilizar os softwares GaussView 5.0 (DENNINGTON ET AL. (2009)) e Gaussian 2003 (FRISCH ET AL. (2009)). Durante o projeto, as estudantes fizeram não só as otimizações para as moléculas isoladas de água (H_2O) e de gás carbônico (CO_2) como também determinaram as frequências de tais moléculas a fim de obter os seus modos normais de vibração e saber quais deles seriam ativos no infravermelho. Em outras palavras, as estudantes buscaram entender porque tais moléculas são consideradas gases de efeito estu-

fa (INGERSOLL (1969), TENNYSON (2006) e MATTHEWS ET AL. (2014)).

Posteriormente, foi proposto ao grupo o desenvolvimento de um projeto de pesquisa que le-vasse em consideração o que fora estudado durante os minicursos e que tivesse alguma aplicação prática, de relevância ambiental preferencialmente. Dessa forma, decidiu-se avaliar o comportamento de uma eventual interação intermolecular entre a água e o dióxido de carbono em um complexo de van der Waals.

Assim, utilizando os softwares citados, o complexo H₂O-CO₂ foi otimizado a partir do método de Hartree-Fock (HF) (TRISIC E PINTO (2009, p. 66 – 68)) utilizando as funções de base 6-31++G(d,p) de Binkley e Pople (1975) de modo a determinar sua energia, seu momento de dipolo, seus comprimentos e ângulos de ligações e seus modos e frequências vibracionais, inclusive os que seriam ativos no infravermelho. Não foram realizadas, porém, as correções que normalmente acompanham as simulações computacionais, tais como BSSE (erro por superposição das funções de bases) e ZPE (energia do ponto zero), uma vez que os conceitos são complexos para estudantes de Ensino Médio.

Para o cálculo da energia da interação intermolecular existente no complexo, ou *energia de estabilização do complexo*, descrita como $\Delta E_{\text{int.}}$ por Sadlej et al. (1998), foi utilizada a equação

$$\Delta E_{\text{int.}} = E(\text{AB}) - [E(\text{A}) + E(\text{B})],$$

onde E(AB) representa a energia do complexo H₂O-CO₂ calculada computacionalmente e E(A) e E(B) são, respectivamente, as energias das moléculas isoladas H₂O e CO₂ também baseadas nos cálculos computacionais descritos acima.

Durante o desenvolvimento dos cálculos teóricos de otimização e determinação dos modos de vibração ativos no infravermelho, as estudantes pesquisaram artigos sobre complexos de van der Waals para fundamentar o trabalho. Assim, verifica-

ram que tal complexo já tinha sido bem estudado por outros pesquisadores, destacando-se os trabalhos de Danten et al. (2005), Peter-son e Klemperer (1984) e Sadlej et al. (1998), com os quais foram feitas comparações dos parâmetros calculados.

Durante o projeto, as estudantes executaram, então, o trabalho "Aquecimento global e sua relação com as moléculas de água (H₂O) e gás carbônico (CO₂) – um estudo teórico", que tinha por objetivo compreender porque tais moléculas estão relacionadas com o efeito estufa. Assim, o complexo de van der Waals H₂O-CO₂ foi modelado durante a execução do trabalho a fim de verificar seus parâmetros de momento de dipolo, comprimentos e ângulos de ligação, sua energia de estabilização e sua interação com a radiação IV.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Pina et al. (2010) afirma que cerca de 70% da radiação solar que entra na Terra é absorvida pelo planeta, dentre os quais 19% é absorvida pela atmosfera, restando 51% da radiação absorvida pela superfície da Terra (terra e oceanos). No entanto, toda essa energia é reemitida para a atmosfera, onde 21% correspondem à radiação de calor (infravermelha, IV), sendo 6% enviadas diretamente para o espaço e 15% absorvidas por moléculas que modificam seus valores de momentos de dipolo μ (ATKINS E DE PAULA (2008, p. 410) e OLIVEIRA (2009, p. 141)), as quais aquecem e também passam a emitir radiação infravermelha em todas as direções. Tais moléculas são conhecidas como gases de efeito estufa (GEE), onde se destacam vapor d'água (H₂O), gás carbônico (CO₂), óxido nitroso (N₂O), gás ozônio (O₃), gás metano (CH₄) e hexafluoreto de enxofre (SF₆), segundo Rocha et al. (2004) e Tolentino e Rocha-Filho (1998). Dentre os GEE, gás carbônico e vapor d'água são os principais, segundo Xavier e Kerr (2004), Mendonça e Gutierrez (2000), Molion (2008) e Tennyson (2006), uma vez que a queima de combustíveis fósseis formam

formam o CO₂, além do vapor d'água. Há uma hipótese de que se conseguíssemos manter constantes as concentrações desses gases na atmosfera, sofreríamos ainda as consequências do aquecimento global por cerca de 100 anos, que é o tempo de residência do CO₂ na atmosfera (TOLENTINO E ROCHA-FILHO (1998), MOZETO (2001) e SILVA ET AL. (2009)) – o vapor d'água possui tempo de residência de apenas 10 dias (GRASSI (2001)). Tal previsão leva em consideração a projeção para moléculas agindo isoladamente. No entanto, caso as moléculas de H₂O interagissem com as moléculas de CO₂ de modo a formar um complexo de van der Waals mais estável que as moléculas isoladas, por algum tipo de interação intermolecular, não estaríamos subestimando ainda mais o efeito do aquecimento global?

Considerando os argumentos supracitados, a estrutura do complexo de van der Waals H₂O-CO₂ (Figura 1) foi otimizada e comparada com as estruturas descritas nos trabalhos de referência teóricos (DANTEN ET AL. (2005) e SADLEJ ET AL. (1998)). É importante destacar que a estrutura otimizada pelas estudantes não é uma estrutura de transição, uma vez que os cálculos de frequências mostram apenas vibrações reais, ou seja, não foram verificadas frequências negativas (Tabela 1). Em ambos os trabalhos de referência, tal estrutura é dita "T-shaped", isto é, estrutura com forma de T.

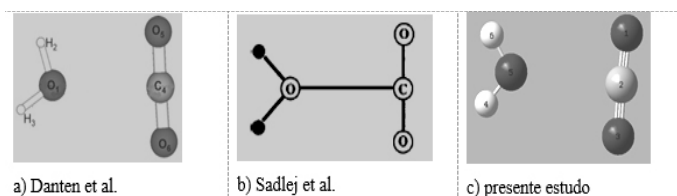


Figura 1: comparação entre a estrutura otimizada do complexo H₂O-CO₂ e os trabalhos de referência. Os números descritos nas estruturas identificam os átomos.

Conforme Oliveira (2001), a luz pode provocar na matéria as transições de estados energéticos, as quais podem ser vibracionais, no caso da radiação incidente ser IV. Como os GEE absorvem

tal radiação, Oliveira (2009, p. 136) afirma que em cada estrutura molecular não-linear há um total de $3N - 6$ (onde N é o número de átomos) modos vibracionais, dentre os quais apenas os que conseguem alterar o momento de dipolo da molécula é que serão ativos no infravermelho, isto é, efetivamente poderão absorver tal radiação. Assim, antes mesmo de calcular computacionalmente as estruturas, as estudantes fizeram as previsões do total de modos vibracionais para o complexo. Suas previsões foram confirmadas pela tabela 1.

Tabela 1: Modos de vibração do complexo H₂O-CO₂ com suas frequências e intensidades de absorção no infravermelho.

Modo de vibração	Frequência (cm ⁻¹)	Intensidade IV (km/mol)
1	66,31	28,94
2	109,91	0,23
3	137,60	344,46
4	164,01	0,44
5	217,19	50,23
6	745,09	91,17
7	756,56	73,08
8	1508,71	0,41
9	1737,59	126,46
10	2561,97	1071,95
11	4146,47	27,21
12	4267,73	106,13

Com o Gaussian 2003 é possível simular espectros de IV das estruturas otimizadas, enquanto que o software GaussView 5.0 permite visualizá-los (Figura 2). Comparando a tabela 1 com a figura 2, percebe-se que 3 picos estão ausentes no espectro de IV do complexo H₂O-CO₂. A ausência deles pode ser explicada pelo fato de que os modos de vibração 2, 4 e 8 (em vermelho, na tabela 1) têm intensidades de absorção no infravermelho muito próximas de zero, ou seja, pouco absorvem tal radiação.

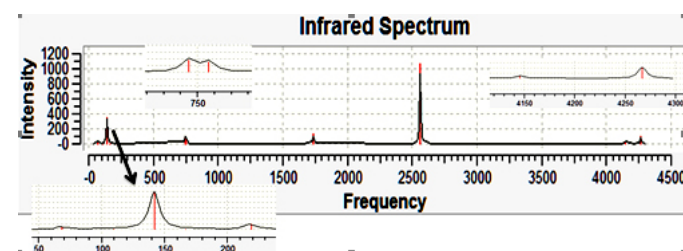


Figura 2: Espectros de infravermelho do complexo H₂O-CO₂ otimizado.

Tabela 2: Resumo dos parâmetros calculados no nível HF/6-31++G(d,p) a partir do Gaussian 2003.

Parâmetro	Complexo	Moléculas isoladas	
		H ₂ O	CO ₂
Energia (hartree)	-263,67480810	-263,67009572	
Momento de dipolo (D)	2,52	2,23	0,00
Ligação (angstrom)			
OH	0,943	0,943	
CO	1,144		1,143
Ângulo (grau)			
HOH	107,5	107,1	
OCO	177,5		180,0

Na tabela 2, podemos observar um resumo dos parâmetros otimizados durante o projeto de pesquisa desenvolvido, tanto para as moléculas isoladas quanto para o complexo de van der Waals H₂O-CO₂. A partir da tabela, percebe-se que a energia mínima do complexo é ainda menor que a soma das energias das moléculas de H₂O e CO₂ isoladas, o que demonstra uma maior estabilidade que ambas: -2,96 kcal/mol é a energia de estabilização, isto é, a energia da interação intermolecular. Embora não tenham sido realizados cálculos de correções nas simulações realizadas pelas estudantes, a energia de estabilização do complexo foi próxima da calculada por Danten et al. (2005), com um erro de 13,7%. O autor utilizou o nível de cálculo MP2 com função de base aug-cc-pVTZ de Dunning (1989).

Tabela 3: Comprimentos das ligações no complexo comparados com os trabalhos de referência. Na primeira coluna, os números ao lado dos símbolos dos elementos representam os átomos destacados na figura 1c: O1C2, por exemplo, significa que o átomo 1 é o oxigênio e está ligado ao carbono, que é o átomo 2.

Ligação	Presente trabalho	Sadlej et al.	Danten et al.		Petersen e Klemperer
			VTZ		
			VTZ	VDZ	
O1C2	1,144		1,170 (-2,2)	1,180 (-3,1)	
O3C2	1,144		1,169 (-2,2)	1,179 (-3,0)	
H4O5	0,943		0,961 (-1,8)	0,966 (-2,3)	
H6O5	0,943		0,962 (-1,9)	0,966 (-2,3)	
C2O5	2,815	2,906 (-3,1)	2,774 (+1,5)	2,783 (+1,2)	2,836 (-0,7)
O3H4	3,420				
O1H6	3,420				

Tabela 4: Ângulos das ligações no complexo comparados com os trabalhos de referência. Na primeira coluna, os números ao lado dos símbolos dos elementos também representam os átomos destacados na figura 1c.

Ângulo	Presente trabalho	Sadlej et al.	Danten et al.	
			VTZ	
			VTZ	VDZ
H4O5H6	107,5		104,6 (+2,8)	104,8 (+2,6)
O1C2O3	177,5		178,3 (-0,5)	178,3 (-0,5)
O1C2O5	91,3	90,0 (+1,4)	88,0 (+3,7)	86,5 (+5,5)
H4O5C2	126,2		139,6 (-9,6)	146,8 (-14,0)

Analisando ainda os trabalhos de referência, pode-se comparar os comprimentos e ângulos de ligações nas tabelas 3 e 4, acima. Da mesma forma que na energia de estabilização do complexo, o trabalho mais próximo do desenvolvido pelas estudantes foi o de Danten et al. (2005), pois publicou mais dados que os demais. Os erros percentuais estão destacados entre parênteses, em vermelho, enquanto que os valores mais próximos do calculado pelas estudantes estão destacados em amarelo.

Para finalizar o estudo, as estudantes tentaram descrever a natureza da interação intermolecular existente entre as moléculas de H₂O e CO₂. Como a interação intermolecular mais estudada é a do tipo ligação de hidrogênio, a pesquisa tratou logo de descartar tais possibilidades: i) as ligações de hidrogênio são, geralmente, lineares, segundo Bueno (1978, p. 42) e Buckingham et al. (2008), mas os ângulos H4O5O3 e H6O5O1 (correspondentes a possíveis ligações de hidrogênio) equivalem a 104,3°; ii) conforme Bueno (1978, p. 48) e Rocha (2001) o comprimento das ligações de hidrogênio varia entre 1,7 – 2,6 Å, mas, como indica a tabela 3, ambas as ligações (O3H4 e O1H6) que poderiam ser ligações de hidrogênio medem 3,420 Å.

Rocha (2001) enquadra as interações intermoleculares entre 0,5 e 10 kcal/mol, então, como o complexo tem uma energia de estabilização de cerca de 3,0 kcal/mol, certamente há algum tipo de

interação intermolecular existente na estrutura otimizada. Bueno (1978, p. 24 – 26) informa que as interações de van der Waals podem ser do tipo dipolo permanente-dipolo induzido, também chamadas forças de Debye, as quais acontecem quando uma molécula polar (no caso H_2O) é colocada na presença de uma apolar (CO_2), ocorrendo uma distorção da nuvem eletrônica desta última, formando um dipolo. A figura 3a abaixo nos mostra a distribuição das cargas de Mulliken no complexo otimizado. Dessa forma, percebe-se que a energia que estabiliza o complexo está relacionada à forte interação entre o oxigênio da molécula da água e o carbono do CO_2 e não a uma eventual ligação de hidrogênio. A interação entre tais átomos justifica o complexo ser chamado de "T-shaped", forma de T, por Danten et al. (2005) e Sadlej et al. (1998) (Figura 3b).

estudantes que o ensino de Química a partir de estudos teóricos não foi nem entediante nem distante de aplicações práticas e relevantes. A partir do desenvolvimento do trabalho, ficou claro que os objetivos do AIQ e do programa "quero ser cientista, quero ser professor" foram satisfeitos: estímulo para mulheres seguirem carreira científica e/ou docente, com ênfase em Química, principalmente.

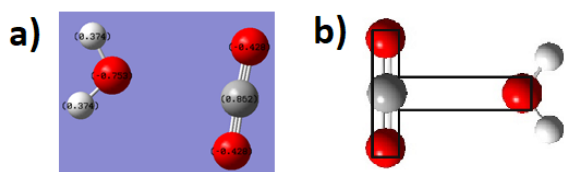


Figura 3: a) Distribuição das cargas de Mulliken no complexo H_2O-CO_2 ; b) Estrutura em forma de T (T-shaped).

CONCLUSÃO

Segundo as próprias estudantes, o desenvolvimento do trabalho e as posteriores participações em eventos de divulgação científica, estimularam as mesmas a seguirem a carreira científica, ao desenvolverem o trabalho "Aquecimento global e sua relação com as moléculas de água (H_2O) e gás carbônico (CO_2) – um estudo teórico". Uma das estudantes está atualmente estudando Bacharelado em Química, outra fez o Curso Técnico em Análises Químicas e a terceira concluiu o Curso Técnico em Química, além de ter sido aprovada no Curso de Licenciatura em Química.

A partir do projeto-piloto QTCEM, percebeu-se pelas declarações das estu -

ABSTRACT: *As a result of the call for a greater participation of women in science during the International Year of Chemistry and in order to stimulate high school students to carry out scientific initiation work, a pilot project was started on the Theoretical and Computational Chemistry in High School in a school State of Pernambuco. Three students participated in workshops on Theoretical and Computational Chemistry and developed the research project "Global Warming and its relation with water molecules (H₂O) and carbon dioxide (CO₂) - a theoretical study.", in which they used calculation and molecular visualization software to simulate the H₂O-CO₂ complex and to compare their parameters with reference papers. As he conceived the program "I want to be a teacher, I want to be a scientist" of the Ministry of Education of Brazil (MEC), the students felt stimulated by the scientific initiation and are currently involved with activities related to Chemistry.*

KEYWORDS: *Molecular Visualization, Theoretical Chemistry, H₂O-CO₂ Complex, Global Warming, High School.*

REFERÊNCIAS:

ALMEIDA, W. B.; SANTOS, H. F. Modelos teóricos para a compreensão da estrutura da matéria. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, 4, 6 – 13, 2011.

ARROIO, A. et al. O show da química: motivando o interesse científico. **Química Nova**, 29, 173 – 178, 2006.

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J. **Atkins: físico-química**, v.1. Trad. Edilson Clemente da Silva... [et al.]. 8 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

BINKLEY, J. S.; POPLE, J. A. Møller–Plesset theory for atomic ground state energies. **International Journal Quantum Chemistry**, 9, 229-236, 1975.

BUCKINGHAM, A. D.; DEL BENE, J. E.; McDOWELL, S. A. C. The hydrogen bond. **Chemical Physical Letters**, 463, 1, 1 – 10, 2008.

BUENO, W. A. **Ligação de hidrogênio**. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil: Ed. da Universidade de São Paulo, 1978.

DANTEN, Y.; TASSAING, T.; BESNARD, M. Ab initio investigation of vibrational spectra of water-(CO₂)_n complexes (n = 1, 2). **The Journal of Chemical Physics A**, 109, 14, 3250 – 3256, 2005.

DENNINGTON, R.; KEITH, T.; MILLAM, J. Semichem Inc., **Shawnee Mission, KS, GaussView, Version**, v.5, 2009.

DUARTE, H.A. Ligações químicas: ligação iônica, covalente e metálica. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, 4, 14 – 23, 2001.

DUNNING Jr, T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. **The Journal of Chemical Physics**, 90, 2, 1007-1023, 1989.

FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E.; ROBB, M. A.; CHEESEMAN, J. R.; SCALMANI, G.; BARONE, V.; MENNUCCI, B.; PE-TERSSON, 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.; MONT-GOMERY, 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.; COS-SI, 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, Inc., Wallingford CT, 2009.

GRASSI, M. T. As águas do planeta Terra. **Química Nova na Escola**, edição especial, Maio, 31 – 40, 2001.

INGERSOLL, A. P. The runaway greenhouse: A history of water on Venus. **J. of the Atmospheric Sciences**, 26, 1191 – 1198, 1969.

LOCATELLI, S. W. **Análise da manifestação de elementos de metavisualização na aprendizagem de Química**. 2011, 155 fls. Dissertação (Mestrado – Programa de Pós-graduação Interunidades em Ensino de Ciências). Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

MATTHEWS, H. D.; GRAHAM, T. L.; KEVERIAN, S.; LAMONTAGNE, C.; SE-TO, D.; SMITH, T. J. National contributions to observed global warming. **Environmental Research Letters**. 9, 1, 1 – 9, 2014.

MENDONÇA, M. J. C.; GUTIEREZ, M. B. S. **Efeito estufa e o setor energético brasileiro**. Rio de Janeiro: 2000. Disponível em < http://repositorio.ipea.gov.br/bitstream/11058/2521/1/TD_719.pdf > Acesso em 13 jul. 2017.

MOLION, L. C. B. Aquecimento global: uma visão crítica. **Revista Brasileira de Climatologia**, 3, 7 – 24, 2008.

MOZETO, A. A. Química atmosférica: a química sobre nossas cabeças. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, edição especial, 41 – 49, Maio, 2001.

OLIVEIRA, G. M. **Simetria de moléculas e cristais**: fundamentos da espectroscopia vibracional. Porto Alegre: Bookman, 2009.

OLIVEIRA, L. F. C. Espectroscopia molecular. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, 4, 24 – 30, 2001.

PETERSON, K. I.; KLEMPERER, W. Structure and internal rotation of H₂O–CO₂, HDO–CO₂, and D₂O–CO₂ van der Waals complexes. **The Journal of Chemical Physics**, 80,

2439 – 2445, 1984.

PINA, A.; SILVA, L. F.; OLIVEIRA JUNIOR, Z. T. Mudanças climáticas: reflexões para subsidiar esta discussão em aulas de física. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, 27, 3, 449 – 472,

RAMOS, A. F.; SERRANO, A. Modelagem Molecular no Ensino de Ciências: Uma revisão da literatura no Período 2001-2011 acerca da sua aplicabilidade em atividades de ensino. **Acta Scientiae**, 15, 2, 363 – 382, 2013.

ROCHA, J. C.; ROSA, A. H.; CARDOSO, A. **A. Introdução à química ambiental**. Porto Alegre: Bookman, 2004.

ROCHA, W. R. Interações intermoleculares. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, 4, 31 – 36, 2001.

RODRIGUES, C. R. Processos modernos no desenvolvimento de fármacos: modelagem molecular. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, 3, 43 – 49, 2001.

27. SADLEJ, J.; MAKAREWICZ, J.; CHALASINSKI, G. Ab initio study of energy, structure and dynamics of the water-carbon dioxide complex. **The Journal of Chemical Physics**, 109, 10, 3919 – 3927, 1998.

SANGER, M. J.; BADGER II, S. M. Using computer-based visualization strategies to improve students' understanding of molecular polarity and miscibility. **Journal of Chemical Education**, 78, 10, 1412-1416, 2001.

SANTOS, H. F. O conceito da modelagem molecular. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, 4, 4 – 5, 2001.

SILVA, C. N.; LOBATO, A. C.; LAGO, R. M.; CARDEAL, Z. L.; QUADROS, A. L. Ensinando a química do efeito estufa no Ensino Médio: possibilidades e limites. **Química Nova na Escola**, 31, 4, 268 – 274, 2009.

TENNYSON, J. Calculating the vibration-rotation spectrum of water. **Physica Scripta**, 73, C53 – C56, 2006.

TOLENTINO, M.; ROCHA-FILHO, R. C. A química no efeito estufa. **Química Nova na Escola**, 8, 10 – 14, 1998.

TOMA, H.E. Ligação química: abordagem clássica ou quântica?. **Química Nova na Escola**, 6, 8 – 12, 1997.

TRSIC, M.; PINTO, M. F. S. **Química quântica: fundamentos e aplicações**. Barueri, São Paulo: Manole, 2009.

XAVIER, M. E. R.; KERR, A. S. A análise do efeito estufa em textos paradidáticos e periódicos jornalísticos. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, 21, 3, 325 – 349, 2004.

Submetido em: 13/07/2017

Aceito em: 03/11/2017