

## Sequência didática usando simuladores

**Aluno: Kevin Magno Rosa**

### Objetivo

Nosso recurso didático tem como objetivo apresentar o espectro eletromagnético interagindo com moléculas aos estudantes do ensino médio de maneira prática e visual, utilizando simulações computacionais para demonstrar como diferentes tipos de radiação eletromagnética afetam as moléculas e influenciam seus comportamentos, como absorção, emissão e transições energéticas.

### Metodologia

Nosso produto didático consiste em uma coleção de simulações interativas destinadas a explorar a interação entre o espectro eletromagnético e as moléculas. Estas simulações, acessíveis online, permitem aos alunos prever como as moléculas irão reagir à radiação eletromagnética, observar essas interações em tempo real e, em seguida, explicar os resultados observados. Dito isso, adotamos a metodologia POE (Prever, Observar, Explicar) para promover uma aprendizagem ativa e envolvente, incentivando os alunos a formular hipóteses, realizar experimentos virtuais e construir uma compreensão sólida dos conceitos apresentados.

### Desenvolvimento

Será esclarecida a interação de algumas moléculas com as faixas do espectro eletromagnético, incluindo luz visível, infravermelho, ultravioleta e microondas.



The image shows a screenshot of a simulation interface. At the top left, there is a camera icon. In the center, a small molecule is visible. On the right side, there is a list of molecules with their corresponding ball-and-stick models:

- Monóxido de carbono (CO)
- Nitrogênio (N<sub>2</sub>)
- Oxigênio (O<sub>2</sub>)
- Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>)
- Metano (CH<sub>4</sub>)
- Água (H<sub>2</sub>O)
- Dióxido de nitrogênio (NO<sub>2</sub>)
- Ozônio (O<sub>3</sub>)

At the bottom, there is a control panel with four buttons representing different types of radiation: Micro-onda, Infravermelho, Visível, and Ultravioleta. Below these buttons is an arrow pointing to the right labeled "Aumento de Energia". To the right of the radiation buttons are control buttons for "Normal" (selected), "Lento", a pause button, and a play button. Below these is a button labeled "Diagrama do Espectro da Luz". At the bottom left, the text "Moléculas e Luz" is visible. At the bottom right, there are icons for volume, keyboard, and the PhET logo.



### **microondas;**

- Monóxido de carbono(CO): Quando microondas interagem com o monóxido de carbono, elas principalmente causam transições rotacionais na molécula, já que a energia das microondas corresponde às diferenças entre os níveis rotacionais quantizados. O CO pode absorver essa energia, transitando para um estado rotacional mais alto e eventualmente emitindo energia ao retornar a um estado de menor energia. Essas interações são usadas na espectroscopia rotacional para determinar propriedades moleculares e são aplicadas em análises atmosféricas e astroquímicas para detectar e medir a concentração de CO.

- Nitrogênio(N<sub>2</sub>): As microondas não interagem com o nitrogênio molecular porque N<sub>2</sub> não possui um momento de dipolo elétrico permanente, essencial para a absorção de microondas via transições rotacionais. Por isso, N<sub>2</sub> é transparente às microondas, ao contrário de moléculas polares como CO.

- Ozônio: O ozônio, devido ao seu momento de dipolo elétrico, pode interagir com microondas, resultando em transições rotacionais que podem ser estudadas por meio da espectroscopia de microondas. Essa interação é aproveitada para detectar e monitorar a presença de ozônio na atmosfera, contribuindo para estudos ambientais e de qualidade do ar.

### **Infravermelho;**

- Monóxido de carbono (CO): Quando a luz infravermelha interage com o monóxido de carbono, ela causa transições vibracionais e rotacionais na molécula. Isso ocorre porque a energia da luz infravermelha é compatível com as diferenças de energia entre os estados vibracionais e rotacionais quantizados da molécula de CO. O CO pode absorver essa energia, passando para estados vibracionais e rotacionais mais excitados. As diferentes vibrações e rotações da ligação CO resultam em bandas de absorção específicas no espectro infravermelho, que são características do CO. Essas interações são fundamentais na espectroscopia infravermelha, permitindo a identificação e quantificação do monóxido de carbono em várias aplicações, como monitoramento da qualidade do ar, segurança industrial e detecção de vazamentos.

Metano (CH<sub>4</sub>): Quando a luz infravermelha interage com o metano, ela também causa transições vibracionais e rotacionais na molécula. Similar ao CO, isso ocorre porque a energia da luz infravermelha é compatível com as diferenças de energia entre os estados vibracionais e rotacionais quantizados da molécula de metano. O CH<sub>4</sub> pode absorver essa energia, passando para estados vibracionais e rotacionais mais excitados. As diferentes vibrações e rotações das ligações carbono-hidrogênio



resultam em bandas de absorção específicas no espectro infravermelho, que são características do metano. Assim como no caso do CO, essas interações são fundamentais na espectroscopia infravermelha para identificar e quantificar o metano, sendo aplicadas em diversas áreas, incluindo monitoramento ambiental, exploração de recursos energéticos e detecção de vazamentos.

Água (H<sub>2</sub>O): Quando a luz infravermelha interage com a água, ela também causa transições vibracionais e rotacionais na molécula. Nesse caso, as vibrações ocorrem nas ligações químicas entre os átomos de hidrogênio e oxigênio. A energia da luz infravermelha é compatível com as diferenças de energia entre os estados vibracionais quantizados da molécula de água. A água pode absorver essa energia, passando para estados vibracionais mais excitados. As diferentes vibrações das ligações H-O-H resultam em bandas de absorção específicas no espectro infravermelho, características da água. Essas interações são importantes em muitos campos, desde a análise atmosférica até a pesquisa de materiais, e são cruciais na determinação da estrutura e composição de substâncias que contêm água.

### **Luz visível;**

- Dióxido de nitrogênio (NO<sub>2</sub>): Quando a luz visível interage com o dióxido de nitrogênio, o principal efeito é a absorção da luz, resultando na coloração característica amarela a marrom-avermelhada do gás. Esta absorção ocorre principalmente na faixa de comprimento de onda visível.

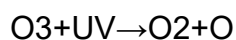
O NO<sub>2</sub> possui uma absorção de banda larga na região do ultravioleta e do visível, com picos em torno de 400-500 nanômetros. Essa absorção de luz é resultado das transições eletrônicas na molécula de NO<sub>2</sub>, onde os elétrons são excitados de um nível de energia para outro. A intensidade e a forma dessas bandas de absorção dependem da concentração de NO<sub>2</sub> e do comprimento do trajeto óptico.

Essas interações são fundamentais para a detecção e monitoramento do dióxido de nitrogênio, especialmente em ambientes urbanos onde a poluição do ar pode ser uma preocupação significativa para a saúde pública e o meio ambiente.

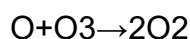
## Ultravioleta;

- Ozônio (O<sub>3</sub>): Quando a radiação ultravioleta (UV) interage com o ozônio, ela causa a dissociação da molécula de ozônio em oxigênio molecular (O<sub>2</sub>) e oxigênio atômico (O). Este processo é uma parte fundamental do ciclo de absorção de UV pela camada de ozônio na estratosfera.

A radiação ultravioleta é dividida em três faixas principais: UV-A (320-400 nm), UV-B (280-320 nm) e UV-C (100-280 nm). O ozônio absorve fortemente na faixa UV-C e UV-B, com a absorção máxima ocorrendo entre 220 e 290 nm. Esta absorção ocorre devido às transições eletrônicas nas moléculas de ozônio, levando à fotodissociação:



O oxigênio atômico resultante pode então reagir com outra molécula de ozônio para formar duas moléculas de oxigênio molecular, completando o ciclo:



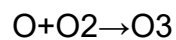
Essas interações são fundamentais para proteger a vida na Terra, pois a camada de ozônio filtra a radiação UV prejudicial, impedindo que a maior parte da radiação UV-B e quase toda a UV-C cheguem à superfície terrestre. Sem essa proteção, a radiação UV poderia causar danos significativos à vida, incluindo aumento no risco de câncer de pele, cataratas e outros problemas de saúde, além de impactos negativos nos ecossistemas.

- Dióxido de nitrogênio (NO<sub>2</sub>): Quando a radiação ultravioleta (UV) interage com o dióxido de nitrogênio, ela causa transições eletrônicas na molécula, resultando na absorção de energia UV e, em alguns casos, na fotodissociação da molécula de NO<sub>2</sub> em monóxido de nitrogênio (NO) e um átomo de oxigênio (O).

A radiação ultravioleta é dividida em três faixas principais: UV-A (320-400 nm), UV-B (280-320 nm) e UV-C (100-280 nm). O NO<sub>2</sub> absorve fortemente na faixa UV-B e UV-C, com a absorção máxima ocorrendo em torno de 360 nm. Essa absorção resulta nas seguintes reações fotolíticas:



O átomo de oxigênio (O) resultante pode então reagir com outra molécula de oxigênio (O<sub>2</sub>) para formar ozônio (O<sub>3</sub>):



Essas interações são fundamentais no contexto da formação e destruição do ozônio troposférico, especialmente em áreas urbanas. O  $\text{NO}_2$ , ao ser fotodissociado pela radiação UV, contribui para a formação do ozônio ao nível do solo, que é um poluente atmosférico e um componente chave do smog fotoquímico. Este processo tem implicações importantes para a qualidade do ar e a saúde pública, pois o ozônio troposférico pode causar problemas respiratórios e outros impactos negativos na saúde humana e no meio ambiente.