

USO DE MODELAGEM MOLECULAR NO ESTUDO DOS CONCEITOS DE NUCLEOFILICIDADE E BASICIDADE

Celeste Ferreira e Agnaldo Arroio*

Departamento de Metodologia do Ensino e Educação Comparada, Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, Av. da Universidade, 308, 05508-040 São Paulo - SP, Brasil

Daisy de Brito Rezende#

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Prof. Lineu Prestes, 748, 05508-000 São Paulo - SP, Brasil

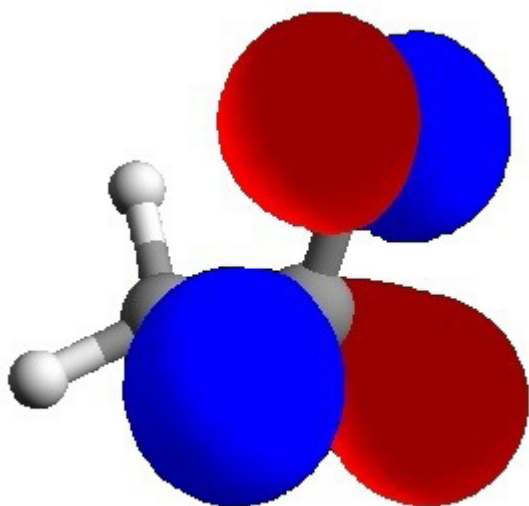


Figura 1S. Orbitais HOMO do íon etóxido

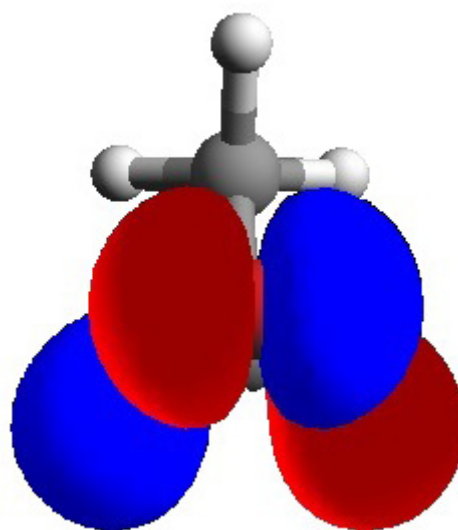


Figura 3S. Orbitais HOMO do íon etóxido

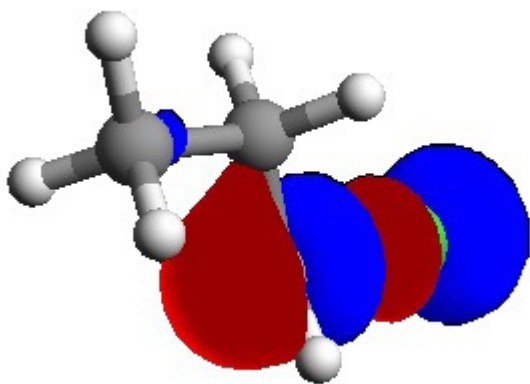


Figura 2S. Orbitais LUMO do 1-cloropropano

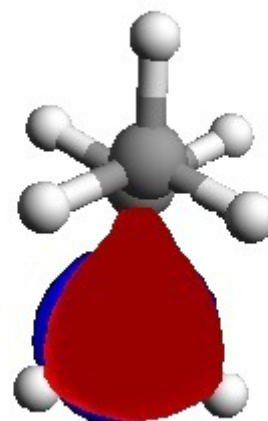


Figura 4S. Orbitais LUMO do 1-cloropropano

*e-mail: agnaldoarroio@yahoo.com

#Programa Interunidades de Pós-Graduação em Ensino de Ciências, USP