

Modelagem molecular no Ensino de Ciências: uma revisão da literatura no período 2001-2011 acerca da sua aplicabilidade em atividades de ensino

Adriana de Farias Ramos
Agostinho Serrano

RESUMO

Apresentamos uma extensa revisão de literatura da produção na área de Ensino e Ciências e Matemática sobre o tópico de modelagem molecular. Investigamos dezessete periódicos nacionais e internacionais de renome na área durante um período de 10 anos, coletando os artigos que apresentassem palavras-chave semelhantes à ‘modelagem molecular’. Um total de 110 artigos foram colecionados e categorizados dentro de uma perspectiva de pesquisa bibliográfica qualitativa. Três categorias emergiram naturalmente: Uma na qual apenas exemplos de modelagem molecular são sugeridos para uso em ensino, sem que aplicações sejam realizadas. Uma segunda categoria em que os autores relatam aplicação de experimentos de modelagem molecular em situações didáticas, porém sem uma análise mais profunda. A terceira categoria é formada de artigos nos quais referenciais teóricos e epistemológicos de educação são utilizados também para iluminar a análise dos dados coletados. Este trabalho parte do que foi publicado¹ em congressos anteriormente e foca especificamente na análise detalhada dos artigos em cada uma das categorias criadas – o que antes foi feito apenas de forma resumida e geral – e permite concluir que existe uma produtividade grande de exemplos didáticos e aplicações na área de modelagem molecular, contudo sem um aprofundamento dentro da pesquisa em ensino de química. Com relação aos estudos existentes, podemos dividi-los em dois grupos. Um grupo é o de visualização, no qual existem vários trabalhos demonstrando o grande potencial de aprendizado de estudantes que utilizam ferramentas computacionais de visualização de modelos químicos. O outro grupo é o de trabalhos de modelagem. Apesar da extensa produtividade no campo da visualização – e dos resultados positivos acerca de seus benefícios no aprendizado de conceitos científicos – faltam estudos nos quais haja, efetivamente, uma fundamentação sólida dentro da área de Ensino de Ciências e Matemática acerca do potencial para o ensino de Ciências da modelagem molecular em si, e também faltam contribuições de pesquisas realizadas no Brasil.

Palavras-chave: Modelagem Molecular. Química Computacional. Revisão de Literatura. Ensino de Química.

Adriana de Farias Ramos é Mestre em Educação. Doutoranda em Ensino de Ciências pelo Programa da Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática (Bolsa CAPES). Servidora do IFRS – Campus Porto Alegre. Endereço para correspondência: Av. Ramiro Barcelos, 2777 sala 259, Bairro Santana, Porto Alegre/RS. E-mail: adriana@ifrspoa.edu.br

Agostinho Serrano é Doutor em Física, professor adjunto da ULBRA/RS, vinculado ao Programa da Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática. Endereço para correspondência: Av. Farroupilha, 8001 · Prédio 14 – Sala 218, Canoas/RS. E-mail: asandraden@gmail.com.

¹ Os primeiros resultados deste trabalho de revisão de literatura foram apresentados no I Congresso Internacional de Enseñanza de las Ciencias y la Matemática (Tandil – Buenos Aires/AR, novembro de 2011) e no VIII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências (Campinas/SP, dezembro 2011).

Acta Scientiae	Canoas	v.15	n.2	p.363-382	maio/ago. 2013
----------------	--------	------	-----	-----------	----------------

Molecular Modeling in Science Teaching: A review of the literature about its applicability in teaching activities

ABSTRACT

We present an extensive review of the literature of the production in the field of Science and Mathematics Teaching regarding the subject of molecular modeling. We investigated seventeen renowned Brazilian and international journals in the field for a period of 10 years, collecting papers that presented keywords similar to 'molecular modeling'. A total of 110 papers were collected and categorized within a qualitative bibliographic research perspective. Three categories emerged naturally: One in which only examples of molecular modeling are suggested for usage in teaching. A second category in which the authors describe the application of modeling experiments in teaching situations, without further analysis. The third category is formed by papers in which theoretical and epistemological referentials used in the field of Education were also used to enlighten the data analysis. This work was partially previously published in congresses and focuses specifically on the detailed analysis of articles in each category created – what was previously done only briefly and in a general way – and allows us to conclude that there is a big productivity of teaching examples and applications in the field of molecular modeling, but without a deeper research in chemical education. With respect to existing studies, we can divide them into two groups. One group is the visualization, in which there are several studies demonstrating the good potential for students that make use of computational tools for visualization of chemical models. The other group is of modeling research. Despite the extensive productivity in the field of visualization – and the positive results regarding its benefits in scientific concepts learning – there is a lack of studies in which there is effectively a solid foundation in the area of Science and Mathematics Teaching circa the potential for science education of molecular modeling itself, and also there is a lack of Brazilian research in the field.

Keywords: Molecular Modeling. Computational Chemistry. Review of Literature. Chemistry Teaching.

INTRODUÇÃO

Neste artigo pretendemos apresentar os resultados de uma revisão de literatura com o objetivo de compor o estado da arte sobre o uso de softwares de modelagem molecular no ensino de química. Para tanto, pesquisamos² dezessete periódicos especializados em ensino de química e ciências da América Latina, Estados Unidos e Europa, num período de 10 anos. Também foram pesquisadas as principais bases de dados disponíveis a fim de cruzar informações e comparar resultados de busca. Além destes periódicos, também consultamos as seguintes bases de dados: ERIC (Educational Resources Information Center); Google Scholar; EBSCO (Academic Search Premier) e Springerlink (Metapress).

O método de busca dos artigos nos sítios dos periódicos e nas bases de dados pesquisadas foi usar a ferramenta “*search*” das páginas destes na internet para encontrar

² Chemistry Education: Research and Practice; Contributions from Science Education Research; Enseñanza de las Ciencias; International Journal of Science Education; International Journal of Science and Mathematics Education; Journal of Chemical Education; Journal of Computers in Mathematics and Science Teaching; Journal of Research in Science Teaching; Journal of Science Education and Technology; Journal of Science Teacher Education; Química Nova; Química Nova na Escola; Research in Science & Technological Education; Research in Science Education; Revista Electronica de Investigacion en Educacion en Ciencias; Science & Education; Studies in Science Education.

as entradas de título e resumo dos termos: “*molecular modeling*”, “*molecular modelling*”, “*modelagem molecular*”, “*modelización molecular*”, “*modelación molecular*”. Tais termos foram pesquisados de forma isolada e em conjunto com o termo “*quantum chemistry*”, vinculado com termos que indicassem a ideia de ensino, tais como: “*education, learning, teaching or instruction*”.

Inicialmente os resumos dos artigos encontrados foram lidos para uma primeira categorização. Após esta leitura flutuante, os artigos foram lidos em sua totalidade e então foi possível se criar três categorias (BODGAN; BIKLEN, 1994), em função da sua natureza: pesquisa teórica, aplicação didática e pesquisa em educação.

Os artigos classificados como de pesquisa teórica, tratam de trabalhos realizados em simulações ou em laboratório, de natureza teórica, sem o envolvimento de estudantes. São relatos de sínteses de compostos e outros trabalhos realizados por pesquisadores ou grupos de pesquisa, que descrevem a possível utilização de ferramentas de modelagem molecular como centro ou mesmo como ferramenta de apoio ao ensino de química. Optamos por manter estes artigos, nos quais há o relato de alguma atividade teórica envolvendo modelagem molecular – em que pode ou não haver procedimentos de laboratório – e que não envolve a participação direta de grupos de estudantes, pelo fato de acreditarmos que os relatos descritos podem ser utilizados por professores em aplicações didáticas, com as devidas transposições didáticas. Além do mais, são trabalhos que foram publicados em periódicos de ensino de química, ou em seções voltadas para o ensino de química (no caso da revista química nova), e, portanto, aceitos pelo corpo editorial de revistas bem conceituadas da área de ensino.

Os artigos classificados como aplicação didática são relatos de efetivas experiências em sala de aula, laboratório ou projetos envolvendo estudantes. Nestes trabalhos, a participação do estudante na manipulação dos *softwares* de modelagem molecular como tarefa principal ou mesmo como ferramenta auxiliar é condição fundamental. Esta categoria foi criada porque, dentro destes artigos, não identificamos fundamentação teórica ou epistemológica da área da educação ou ensino em química para embasar a metodologia e avaliação dos resultados de aplicação da modelagem molecular em sala de aula. Caso contrário, estes trabalhos estariam na categoria pesquisa em educação.

Por fim, a categoria pesquisa em educação caracteriza trabalhos que apresentam algum referencial teórico e epistemológico da área. São trabalhos teóricos, aplicados ou relatos de experiências diversas envolvendo estudantes, mas que trazem como diferencial o debate na área do ensino em química ou de ciências, fundamentado em referenciais da área.

RESULTADOS DA REVISÃO DE LITERATURA

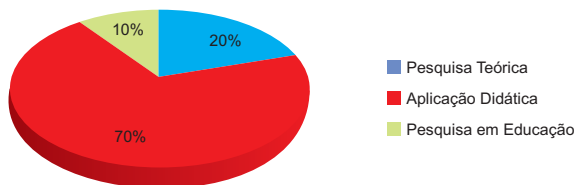
Após a realização da busca, não encontramos nenhum trabalho em 10 (dez) periódicos, a saber: *Contributions from Science Education Research*; *Enseñanza de las Ciencias*; *Journal of Computers in Mathematics and Science Teaching*; *Journal of Science*

Teacher Education; Journal of Science Education and Technology; Research in Science & Technological Education; Revista Electronica de Investigacion em Educacion em Ciencias; Química Nova na Escola; Science & Education; Studies in Science Education.

Este é um resultado importante, pois como a lista compõe-se basicamente de periódicos da área de educação, a ausência de trabalhos em modelagem molecular em um espaço de tempo de uma década indica a carência de uso desta ferramenta didática por pesquisadores da área de ensino de química. Esta conclusão é reforçada com a verificação da profusão de trabalhos em outros periódicos como o *Journal of Science Education*, que carecem de referencial teórico e metodológico. Existem inúmeros exemplos, todos com grande potencial didático, sendo publicados regularmente em periódicos que não exigem referencial teórico em ensino de química, em uma área contemporânea da química, que parece escapar, ano após ano, do campo de investigação do ensino de química.

Depois de feita a busca e refino dos trabalhos encontrados, chegamos a um total de 110 artigos publicados desde janeiro de 2001 até dezembro de 2011. A figura 1, a seguir, mostra a divisão quantitativa dos artigos nas categorias criadas.

FIGURA 1 – distribuição dos artigos publicados nos periódicos pesquisados, nas categorias Pesquisa Teórica, Aplicação Didática e Pesquisa em Educação.



Fonte: a pesquisa.

Em números absolutos, foram 22 (vinte e dois) artigos na categoria pesquisa teórica; 77 (setenta e sete) trabalhos na categoria aplicação didática e apenas 11 (onze) trabalhos na categoria pesquisa em educação.

A seguir, apresentamos uma descrição dos trabalhos presentes em cada categoria. Para melhor apresentar os trabalhos das categorias pesquisa teórica e aplicação didática, agrupamos estes trabalhos em subcategorias. Os trabalhos de pesquisa teórica foram agrupados em três das cinco subcategorias, ao passo que os de aplicação didática percorreram todas as subcategorias. Ao todo, são cinco subcategorias, a saber:

- A. Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular** – envolve trabalhos que descrevem diversas regiões das moléculas, regioselectividade e análise conformacional;
- B. Teoria de Ligação Química e interações intra e intermolecular** – envolve trabalhos que abordam as interações intra e intermoleculares, além de estrutura das moléculas sob o ponto de vista das ligações químicas existentes;

- C. **Modelagem Molecular e Análise Instrumental** – integração entre modelagem molecular e diversas técnicas de análise instrumental de caracterização qualitativa;
- D. **Reações Químicas** – envolve mecanismos de reações químicas e predição de produtos;
- E. **Sequências Didáticas** – propostas de sequências didáticas sobre um ou mais conteúdos a ser desenvolvidos.

PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA PESQUISA TEÓRICA

A categoria pesquisa teórica conta com 22 (vinte e dois) artigos publicados ao longo de dez anos. Após a divisão destes trabalhos de pesquisa teórica nas subcategorias, verificamos que todos os trabalhos estão nas seguintes subcategorias, pela ordem de relevância quantitativa: Reações Químicas; Teoria de Ligações Químicas e interações intra e intermolecular; e Modelagem Molecular e Análise Instrumental. A seguir, apresentamos alguns exemplos de trabalho de cada subcategoria (os mais representativos).

B. Teoria de ligação química e interações intra e intermolecular

Nesta subcategoria, temos 7 (sete) trabalhos que envolvem estrutura atômica e molecular e interações intra e intermoleculares. Destaco Kim et. al. (2011) que descreve o uso de ferramentas de modelagem molecular para analisar as moléculas de várias drogas que agem no sistema nervoso central para examinar os fatores que afetam em suas habilidades de penetrar na barreira hematoencefálica.

Purser (2001) explora a relação existente entre os modelos de densidade eletrônica, as respectivas estruturas de Lewis e as tentativas de resolver o debate que levou às disparidades encontradas nos livros didáticos atuais. O autor menciona a existência de importante debate sobre como melhor representar as moléculas e íons nos quais átomos de não metal, a partir do segundo período, são ligados a um átomo terminal (oxigênio, por exemplo), apontando a inconsistência existente nas abordagens dos livros didáticos.

C. Modelagem molecular e análise instrumental

Nesta subcategoria, encontramos 1 (um) trabalho. Morton et. al. (2001) isolou e caracterizou, por diversas técnicas instrumentais, a Thiarubrina A, composto orgânico produzido por organismo vivo cuja reatividade, atividade biológica única e potenciais aplicações medicinais têm sido observadas. A geometria da molécula do produto foi otimizada utilizando métodos semiempíricos com parametrização PM3. Uma das conclusões a que chegam os autores é da possibilidade de incorporar os componentes teóricos aos experimentos de laboratório e também que certos experimentos, como o

descrito no artigo, podem mostrar aos estudantes uma importante área da química ainda pouco discutida e explorada pelos currículos dos cursos de graduação.

D. Reações químicas

Nesta subcategoria estão os artigos que descrevem o fértil campo dos distintos mecanismos de reações químicas para a produção de diversos compostos. Aqui estão 14 (quatorze) trabalhos que integram as sínteses à modelagem molecular com métodos consagrados como: acilação de Friedel-Crafts, equilíbrio ceto-enólico, substituição nucleofílica aromática, dentre outros.

Cook e Feltman (2007) apresentam um experimento clássico de equilíbrio ceto-enólico dos seguintes compostos: acetilacetona, dimedona, etil-acetoacetato e etil 4,4,4-trifluoroacetoacetato. O objetivo foi o de promover a análise dos fatores da influência do solvente na reação, bem como ilustrar o uso da modelagem molecular na determinação da origem da polaridade das moléculas envolvidas na reação. Foram estudados três solventes diferentes (CDCl_3 , DMSO e Neat) e os resultados das reações são distintos justamente pela diversidade de reagentes e solventes.

Segundo os autores supracitados, as diferentes abordagens e métodos de modelagem molecular fornecem valores mais afastados ou mais condizentes com o observado experimentalmente. Por exemplo, os momentos de dipolo são razoavelmente calculados por método semiempírico (AM1), mas não produzem resultados razoáveis para as energias, pois este método indica o oposto do observável experimentalmente para a forma enol do acetilacetona (produto na forma de gás). Por outro lado, o cálculo da densidade funcional por “ab initio” mostra resultados convergentes com os observáveis.

A seguir, apresentamos o quadro 1, com as referências da categoria Pesquisa Teórica.

QUADRO 1 – Relação completa das referências categorizadas como pesquisa teórica.

Journal of Chemical Education	JCE 2011, 88, pp 1389-1393; JCE 2010, 87 (8), pp 819-822; JCE 2007, 84 (8), pp 1364-1370; JCE 2001, 78 (6), pp 840-844; JCE 2001, 78 (7), pp 981-983; JCE 2005, 82 (1), pp 111-115; JCE 2011, 88 (7) pp 898-906; JCE 2001, 78 (6), pp 781-783; JCE 2004, 81 (10), pp 1497-1499; JCE 2007, 84 (11), pp 1827-1829; JCE 2001, 78 (1), pp 68-70; JCE 2002, 79 (1), pp 96-97; JCE 2006, 83 (6), pp 923-926; JCE 2010, 87 (8), pp 845-847; JCE 2001, 78 (12), pp 1609-1614; JCE 2011, 88 (12), pp 1644-1647; JCE 2004, 81 (5), pp 722-724; JCE 2001, 78 (6), pp 844-846; JCE 2002, 79 (2), pp 225-227; JCE 2006, 83 (11), pp 1658-1660; JCE 2004, 81 (4), pp 596-604; JCE 2007, 84 (6), pp 1067-1072.
-------------------------------	---

Fonte: <http://pubs.acs.org/journal/jceda8>.

PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA APLICAÇÃO DIDÁTICA

A categoria aplicação didática conta com 77 (setenta e sete) artigos publicados ao longo de dez anos. São trabalhos que envolvem a participação de estudantes, mas que centram em relatos de experiências, sem, contudo, haver uma discussão com referenciais epistemológicos da área.

Após a divisão destes trabalhos nas cinco subcategorias, verificamos que há uma distribuição relativamente homogênea de trabalhos em cada uma, com um número um pouco maior de eventos na categoria Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular, seguido da categoria Teoria de Ligações Químicas e Interações Intra e Intermolecular. A seguir, apresentamos os exemplos de trabalhos mais representativos de cada subcategoria.

A. Estereoquímica, análise conformacional e análise molecular

Nesta subcategoria, temos o maior número de trabalhos publicados – 21 (vinte e um) ao todo – em função da facilidade que as ferramentas de modelagem molecular oferecem.

Yuriev, Chalmers e Capuano (2009) relatam a utilização do *software Hyperchem* para a realização de um experimento em uma disciplina que aborda a descoberta, *desing* e desenvolvimento de fármacos. No experimento, há um espaço prévio para debate com os estudantes sobre as configurações necessárias e, depois, sobre os dados gerados. Os estudantes desenvolvem as habilidades de interpretação e análise desses dados.

B. Teoria de ligação química e interações intra e intermolecular

Nesta subcategoria temos 18 (dezoito) artigos que tratam dos mais diversos aspectos das ligações químicas e interações. Shusterman, Mitchell, Finocchio e Kua (2007) apresentam um estudo de predição que tem como objetivo principal propiciar aos estudantes a utilização de ferramentas de modelagem molecular e de conceitos de termoquímica (energias de ligação, potenciais de ionização, afinidades eletrônicas) para prever a estabilidade relativa de moléculas hipervalentes (aquelas que excedem a regra do octeto) em relação às moléculas não hipervalentes.

O estudo das ligações de organometálicos é facilitado pelo trabalho desenvolvido por van Strijdonck et al. (2002). Aspectos importantes da química organometálica são abordados com os estudantes, tais como: características dos orbitais d, doação de elétrons π , retro doação de elétrons π e a geometria dos compostos.

C. Modelagem molecular e análise instrumental

Encontramos nessa categoria uma quantidade interessante de 15 (quinze) artigos que mesclam as ferramentas de modelagem molecular com métodos instrumentais.

Habata e Akabori (2001) apresentam uma proposta de ensino do método instrumental ^1H RMN (ressonância magnética nuclear de prótons) na qual é usado o mapa de potencial eletrostático para descrever o efeito da anisotropia magnética do benzeno assim como para descrever efeitos de eletronegatividade em outras moléculas como CHCl_3 , CH_2Cl_2 e CH_3Cl .

Um trabalho interessante desenvolvido por Shusterman, Patalinghug, Chang e Solis (2007) que envolve os estudantes no estudo das mudanças dos picos de absorção do espectro UV-Vis do azuleno (C_{10}H_8) pela introdução de substituintes, que causam uma mudança radical na cor do produto em função das transições ocorridas nos orbitais de fronteira (HOMO^3 e LUMO^4).

D. Reações químicas

Nesta categoria existem 13 (treze) trabalhos. Destacamos o trabalho de Reeve (2004), o qual descreve um experimento baseado em descoberta, em que os estudantes são incentivados a desenvolver as habilidades de resolução de problemas em contraponto à conhecida abordagem dos laboratórios: um roteiro como se fosse uma ‘receita de bolo’. Os estudantes de segundo nível das disciplinas de laboratório de química orgânica desenvolvem o roteiro de uma reação de acilação de Friedel-Crafts, debatendo os parâmetros da reação e realizando-a em laboratório. O *software* de modelagem molecular é usado para auxiliar na definição de qual dos isômeros é o mais estável termodinamicamente e chegam à conclusão de que o isômero orto substituído é o mais estável. Mecânica molecular também é utilizada.

E. Sequências didáticas

Nesta categoria encontramos 10 (dez) artigos, sendo que apontamos como destaque o trabalho de Cody e Wisner (2003) no qual é proposta uma sequência didática cujo objetivo é expandir o conhecimento dos estudantes de primeiro ano da graduação sobre ligação química, VSEPR (teoria da repulsão de elétrons da camada de valência). Os estudantes constroem estruturas e aplicam cálculos “semiempíricos” para otimizar as geometrias. Também são estudados os momentos de dipolo, as forças intermoleculares e os orbitais moleculares.

A seguir, apresentamos o quadro 2, com todas as referências da categoria Aplicação Didática.

³ Orbital molecular ocupado de maior energia.

⁴ Orbital molecular desocupado de menor energia.

QUADRO 2 – Relação completa das referências categorizadas como aplicação didática.

Journal of Chemical Education	JCE 2005, 82(12), pp 1800-1804; JCE 2004, 81(10), pp 1529-1532; JCE 2005, 82(9), pp 1334-1339; JCE 2007, 84(12), pp 2001-2003; JCE 2006, 83(5), pp 780-781; JCE 2004, 81(1), pp 121-125; JCE 2009, 86(4), pp 477-478; JCE 2004, 81(7), pp 971-974; JCE 2022, 79(1), pp 67-69; JCE 2004, 81(6), pp 837-840; JCE 2001, 78(11), pp 1551-1555; JCE 2005, 82(4), pp 588-596; JCE 2004, 81(7), pp 1006-1009; JCE 2010, 87(2), pp 221-228; JCE 2007, 84(6), pp 979-982; JCE 2006, 83(3), pp 413; JCE 2005, 82(9), pp 1329-1333; JCE 2007, 84(1), pp 102-105; JCE 2006, 83(8), pp 1182-1184; JCE 2004, 81(2), pp 283-287; JCE 2011, 88(4), pp 420; JCE 2004, 81(5), pp 657-672; JCE 2007, 84(2), pp 329-332; JCE 2011, 88(12), pp 1667-1671; JCE 2012, 89(1), pp 45-51; JCE 2011, 88, pp 962-965; JCE 2004, 81(7), pp 997-2005; JCE 2007, 84(4), pp 629-634; JCE 2011, 88, pp 929-931; JCE 2002, 79(12), pp 1467-1470; JCE 2002, 79(5), pp 588-591; JCE 2011, 88(4), pp 421-425; JCE 2008, 85(8), pp 1071-1077; 2008, 85(2), pp 240-242; JCE 2010, 87(6), pp 625-627; JCE 2006, 83(6), pp 931-933; JCE 2006, 83(6), pp 940-942; JCE 2007, 84(1), pp 156-171; JCE 2007, 84(8), pp 1328-1330; JCE 2007, 84(9), pp 1486-1487; JCE 2002, 79(5), pp 593-600; JCE 2001, 79(7), pp 942-943; JCE 2011, 88(3), pp 306-308; JCE 2001, 78(4), pp 535-538; JCE 2001, 78(4), pp 538-540; JCE 2007, 84(3), pp 471-474; JCE 2004, 81(2), pp 225-227; JCE 2007, 84(12), pp 1945-1947; JCE 2001, 78(1), pp 121-123; JCE 2008, 85(5), 692-694; JCE 2006, 83(5), pp 777-779; JCE 2010, 87(12), 1384-1387; JCE 2009, 86(2), pp 199-201; JCE 2008, 85(11), pp 1541-1543; JCE 2011, 88, pp 1007-1009; JCE 2005, 82(4), pp 625-629; JCE 2004, 81(8), pp 1136-1139; JCE 2008, 85(1), pp 104-106; JCE 2004, 81(11), pp 1633-1635; JCE 2004, 81(1), pp 72-75; JCE 2006, 83(1), pp 77-83; JCE 2008, 85(11), pp 1538-1540; JCE 2001, 78(3), pp 420-421; JCE 2004, 81(8), pp 1140-1144; JCE 2001, 78(9), pp 1202-1205; JCE 2009, 86(12), pp JCE 2005, 82(7), pp 1021-1025; JCE 2004, 81(4), pp 475-477; JCE 2009, 86(12), pp 1403-1407; JCE 2003, 80(7), pp 793-795; JCE 2011, 88, pp 1079-1084; JCE 2004, 81(9), pp 1322-1329; JCE 2011, 88, pp 574-580; JCE 2002, 79(9), pp 1122-1126.
Química Nova	QN 2003, 26 (3), pp 428-438;
Chemistry Education: Research and Practice in Europe	CE:RP 2001, 2 (2), pp 109-122;
Research in Science Education	RSE 2009, 39, pp 495-513;

Fonte: sítio dos respectivos periódicos.

PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA PESQUISA EM EDUCAÇÃO

Nesta categoria, optamos por apresentar todos os trabalhos, pois se trata de uma categoria que é o foco do nosso estudo, ou seja, a aplicabilidade dos softwares de modelagem molecular no ensino de química.

O primeiro artigo que apresentamos é a contribuição de Barnea e Dori (2000), que discutem qual a percepção de “modelo” que professores de química em serviço e em formação possuem, quando comparados a grupos de estudantes de graduação em química (grupo experimental e grupo controle). Referenciais de epistemologia são utilizados para discutir a utilidade crucial que um modelo tem para a ciência, em especial Toulmin. Os autores concluem que discutir a noção de “modelo” é importante porque expandiu a visão de todos os grupos participantes do estudo. O experimento em si tem uma execução longa, que envolve até mesmo uma etapa de formação de professores para utilizarem

modelagem molecular. A tomada de dados pode ser categorizada como quantitativa, porém com perguntas em aberto em um questionário cujas respostas depois são categorizadas de acordo com critérios pré-definidos pelos autores. O foco principal do artigo é a discussão da noção de “modelo” – quase em um sentido epistemológico – dos professores, e não necessariamente em outros aspectos da modelagem molecular.

Já o segundo artigo, o de Sanger e Badger II (2001), relata um trabalho de pesquisa em que o principal objetivo foi o de mostrar como as estratégias de visualização por computador podem ser utilizadas como ferramenta auxiliar aos métodos tradicionais de ensino de química, em especial o ensino de polaridade molecular e miscibilidade. Os autores compararam as respostas de um grupo controle de 36 estudantes universitários de segundo semestre de química – os quais se utilizaram de gráficos, modelos moleculares e demonstrações físicas – com um grupo experimental de mesmo número. Este grupo respondeu o mesmo questionário, mas utilizou a simulação em computador e gráficos de densidade eletrônica realizados no *software Spartan*. Sobre o tópico polaridade molecular, os dois grupos tiveram que responder sobre a polaridade de algumas moléculas previamente escolhidas. Além disso, também tiveram que prever a maior ou menor facilidade de dissolução de duas moléculas distintas em dióxido de carbono líquido. Os resultados dos questionários sobre polaridade molecular foram tratados e analisados por análise de variância (ANOVA) e mostraram que o grupo que teve acesso aos mapas de potencial e às simulações do computador teve mais facilidade para determinar a polaridade das moléculas estudadas. Os autores apontam que a visualização das regiões de maior densidade eletrônica (vermelho) e menor densidade (azul), junto com o cálculo do momento de dipolo das moléculas feito pelo *Spartan* auxiliou o grupo experimental a “reconhecer a importância da forma da molécula na determinação da sua polaridade” (tradução nossa).

Sobre o tópico miscibilidade de compostos em água, foram feitas questões acerca da miscibilidade de compostos polares, não polares e iônicos em água, com o foco nas forças intermoleculares destes compostos puros e as forças relativas dessas interações como uma explicação da regra “semelhante dissolve semelhante”.

Os autores relatam que ambos os grupos presenciaram demonstrações químicas da miscibilidade de várias misturas, sendo que o grupo experimental também teve contato com simulações de computador das mesmas misturas além dos mapas de potencial eletrostático dos compostos puros. Tais simulações iniciaram mostrando distintas misturas homogêneas e as forças de London, forças dipolo-dipolo e ligações de hidrogênio presentes e as interações que ocorrem na mistura, pois a miscibilidade pode ser explicada em termos de atração de forças positivas (vermelho) e negativas (azul) entre as moléculas.

As respostas de ambos os grupos a esse conjunto de questões também foram analisados por ANOVA e a conclusão que os autores chegaram foi que o grupo que teve acesso às simulações do *software Spartan* tiveram mais facilidade de compreender os fatores que determinam a maior ou menor miscibilidade das misturas estudadas. De uma maneira geral, os autores defendem que os estudantes que têm acesso a mapas de densidade eletrônica desenvolvem uma melhor compreensão conceitual de polaridade

molecular e forças intermoleculares. Além disso, as simulações são particularmente efetivas em auxiliar os estudantes a visualizar processos químicos mais dinâmicos em nível molecular. A visualização é considerada uma atividade crucial para a compreensão de fenômenos químicos por vários autores, como por exemplo, Habraken (1996) e, portanto, representar informação científica por meio de representações gráficas sintéticas tende a auxiliar sobremaneira o aprendizado químico.

Jones (2001), nosso terceiro artigo, relata a reestruturação curricular realizada em 1996 no currículo do curso de química do *Adam State College*, no Estado do Colorado/USA, na qual o principal objetivo foi o que expor todos os estudantes de todos os níveis ao uso de ferramentas de modelagem molecular. A estratégia utilizada para tal foi a de usar os experimentos de modelagem como suporte às práticas de laboratório, numa tentativa de fundir os aspectos teóricos e práticos da química.

Os *softwares* de modelagem molecular também foram instalados em computadores em salas de aula a fim de que os professores pudessem utilizá-los para abordagens teóricas e práticas de conceitos da química, bem como para ilustrar apropriadamente tais conceitos com cálculos e representações gráficas.

A conclusão que os autores chegaram foi de que a introdução de *softwares* de modelagem molecular contribuiu na compreensão de diversos conceitos da química por parte dos estudantes, segundo o próprio relato destes. Os autores ainda apontam o próximo desafio, que é o de desenvolver o mesmo trabalho nos cursos de bioquímica, pois há vários experimentos publicados com ênfase nesta área do conhecimento.

O quarto artigo que discutiremos é o de Wu, Krajcik e Soloway (2001). Este importante artigo parte da percepção de que os estudantes de química possuem, historicamente, dificuldades de aprendizagem de conceitos da química em nível simbólico e molecular. Diante disso, promoveram um estudo que buscou investigar como os estudantes de uma pequena escola secundária de uma cidade universitária do centro-oeste americano desenvolveram a compreensão das representações químicas com o auxílio de ferramentas computacionais baseadas em visualização, que lhes permitiu construir e manusear os modelos moleculares.

As questões que nortearam o estudo foram: a) os estudantes são capazes de fazer traduções entre representações químicas? b) que padrões de aprendizagem que os estudantes nos demonstram ao traduzir representações químicas e construir modelos usando o *software e-Chem*? c) Como as representações químicas são construções conceituais e apresentações visuais, como os estudantes absorvem as informações visuais e conceituais das representações? d) se os estudantes são capazes de demonstrar habilidades de representação após o uso do *e-Chem*, de que modo a interação com o *software* os ajudou a fazê-lo?

Foram utilizadas múltiplas formas de coleta de dados (pré-testes, pós-testes, notas de campo, entrevistas gravadas em vídeo, gravações em vídeo das atividades desenvolvidas) durante seis semanas e o público alvo foi um conjunto de setenta e quatro estudantes do décimo primeiro ano.

A conclusão foi que a maioria dos estudantes conseguiu adquirir conhecimento conceitual nos níveis macro e microscópicos e foram capazes de traduzir várias representações químicas. A análise dos dados também permitiu aos autores concluir que a representação das moléculas pelo *software* usando o modelo de esferas sobrepostas (*space-filling*) foi o mais atrativo visualmente. No entanto, o modelo de bolas e palitos (*balls-and-sticks*) foi o mais concreto para os estudantes (sem distinção entre o modelo físico e o computacional) porque este modelo transmitiu a informação visível dos átomos e das ordens de ligação.

Com relação às formas como os estudantes absorvem as informações visuais e conceituais das representações, os dados colhidos das entrevistas revelam que estes foram capazes de realizar o entrelaçamento das informações visuais e conceituais, promovendo a conexão visual entre as fórmulas estruturais e os modelos mentais correspondentes.

Por fim, a última questão norteadora foi desvendada na análise dos vídeos e entrevistas. O recurso de rotação das moléculas presente no *software* auxiliou os estudantes a visualizar de que forma eles poderiam transformar o modelo 2D em 3D, auxiliando também na construção de modelos mentais. Neste artigo observamos, novamente, o impacto no aprendizado de conceitos e representações químicas que os *softwares* de visualização de representações microscópicas trazem aos estudantes de química.

Paselk e Zoellner (2002), o quinto artigo nesta categoria a ser discutido, relatam mais uma iniciativa, até agora a segunda, de introduzir as ferramentas de modelagem molecular e química computacional no currículo de um curso de graduação em química. Desta vez foi na Universidade de Humboldt, nos Estados Unidos. O programa incluiu a criação de um novo laboratório, voltado para fomentar projetos de pesquisa para graduação, e melhorias para o conjunto de métodos computacionais utilizados nos currículos dos cursos de química e física.

O laboratório instrucional foi utilizado progressivamente para introduzir métodos de modelagem molecular e química computacional no currículo do curso e uma das primeiras aplicações foi em química geral, como forma de ilustrar a geometria molecular de compostos.

No sexto artigo a ser analisado, Saari e Viiri (2003) estudaram o impacto de uma sequência didática para o aprendizado de modelagem para estudantes do nível secundário de duas escolas distintas. As perguntas da pesquisa foram: a) como o ensino de modelos pode afetar a noção de modelos que os estudantes possuem? b) o que vai acontecer com os conceitos prévios de modelos dos estudantes após a sequência didática de modelagem? c) quais as categorizações possíveis de se fazer em relação aos conceitos prévios de modelos que os estudantes possuem?

O trabalho descreve os conceitos prévios dos estudantes do termo “modelo” como sendo um artefato, algo concreto. Além disso, estes concebem que somente podemos criar um modelo sobre algo que vemos. O que não vemos, segundo as concepções prévias dos estudantes, não pode ser modelado. A ideia de modelo destes estudantes é que ele pode ser copiado, diferentemente do que se faz na ciência, em que os modelos são criados na tentativa de descrever um fenômeno e prever seu comportamento.

A sequência didática foi construída com base nos dados colhidos acerca da diferença entre as concepções prévias dos estudantes sobre o que é modelo e o que a ciência compreende como sendo modelo. E o tópico inicial versou sobre os estados da matéria, usando os modelos curriculares (modelo de partículas e modelo contínuo).

A forma como os dados foram coletados seguiu a seguinte estrutura: antes da aplicação da sequência didática, os estudantes passaram por uma pré-entrevista. Após a sequência didática, responderam um questionário com perguntas abertas, uma nova entrevista e um último questionário aplicado sete meses após a aplicação da sequência didática na escola A e três meses após a mesma atividade na escola B, a fim de buscar a informação sobre o quão permanente foi o impacto das mudanças conceituais.

Os resultados das pré-entrevistas mostraram que a noção de modelo dos estudantes era muito limitada: dos trinta e um estudantes entrevistados, vinte e nove entendiam que modelos são objetos que podem ser copiados exatamente (noção equivocada). Por outro lado, após a sequência didática, as entrevistas mostraram que uma mudança importante ocorreu. Apenas dois estudantes mantiveram a opinião equivocada da pré-entrevista.

Com relação ao estudo que mostra o quão permanente foram os resultados da aprendizagem, onze estudantes mantiveram sua concepção de modelo, modificada pela sequência didática e cinco retomaram a opinião baseada nos seus conhecimentos prévios. Isto nos leva a concluir que há uma retenção da aprendizagem quando se utilizam modelos moleculares computadorizados; sempre se deve lembrar que retenção de aprendizado pode ser interpretada como um forte indício de aprendizagem significativa representacional (AUSUBEL, 1963) decorrente de uma atividade de visualização de modelos moleculares.

Por fim, os autores defendem que noções mais avançadas de modelos podem ser adotadas nesse nível de ensino, pois os resultados mostraram que uma parcela considerável de estudantes desenvolveram noções mais sofisticadas de modelos e, de uma maneira geral, mantiveram estas noções mesmo com o passar do tempo. Os autores apontam ainda que o ensino de modelos requer: a) extensivos períodos de tempo; b) diversidade de contextos; c) explicitar quais modelos podem ser usados em cada situação; d) uso de diferentes modelos para modelar o mesmo fenômeno; e) a discussão com os estudantes das vantagens e limitações de modelos gerados e, por fim, f) introdução de tópicos de modelagem na formação inicial e continuada de professores.

A sétima contribuição neste segmento é fornecida por Jones, Jordan e Stillings (2005), que apresentam um resumo das contribuições realizadas por um projeto financiado pelo principal órgão de fomento à pesquisa dos Estados Unidos. O projeto teve por objetivo construir colaborações entre diversas comunidades de pesquisadores a fim de investigar o papel da visualização molecular no aprendizado de conceitos. O início das atividades do projeto foi justamente a investigação das características das representações moleculares, das suas interações com a visualização de estruturas moleculares e dinâmicas, bem como o papel da modelagem molecular nos currículos de química, além de perspectivas para a pesquisa em visualização molecular na aprendizagem de química.

Além disso, apresenta uma análise do que foi positivo e negativo, sob o ponto de vista dos participantes. Vários projetos foram criados, e a conclusão do artigo é que este esforço, que também acreditamos ser o mesmo necessário para efetivamente utilizarmos modelagem molecular no ensino de química, deve ser realizado por profissionais de química, de educação (química), psicologia cognitiva, dentre outros; em colaboração estreita à boa comunicação. Este artigo mostra a urgência que temos, no Brasil, de investigar o uso de modelagem molecular no aprendizado de conceitos químicos.

Kaberman e Dori (2007) relatam a reforma do currículo do curso de graduação de química ocorrida no Instituto de Tecnologia, em Israel. Este é o oitavo artigo deste segmento que trazemos. No bojo dessa reforma, foram criadas estratégias de introdução de ferramentas de modelagem molecular, tanto em sala de aula quanto em laboratório. Especificamente para o laboratório, os autores criticam a forma como as práticas costumam ocorrer, sendo que o planejamento de experimentos não propicia a construção de novos conhecimentos, mas somente a confirmação de teorias conhecidas, leis e fatos confirmados pela ciência.

Em contraposição a essa realidade de como as aulas de laboratório costumam ser planejadas e executadas – levando os estudantes a não produzirem novos conhecimentos – os autores apresentam a estrutura curricular proposta na reforma, na qual as estratégias didáticas são todas voltadas para propiciar aos estudantes a construção de habilidade de pensamento de alta ordem⁵, baseada na taxonomia de Bloom⁶.

O currículo é composto de cinco unidades de aprendizagem e uma das unidades foi desenvolvida com ambientes informatizados para sala de aula e laboratório com ênfase no questionamento científico, nos estudos de caso e na modelagem molecular.

O principal objetivo do trabalho apresentado é o de realizar um estudo longitudinal, investigando os efeitos do uso das simulações e ambientes informatizados em três habilidades de pensamento de alta ordem: saber formular perguntas, questionamentos e modelagem. Com isso os autores buscaram responder a duas perguntas: existe diferença na construção de habilidades de alta ordem em dois grupos distintos de estudantes, a partir da introdução de atividades em ambientes informatizados? Quais os efeitos do uso de modelagem molecular nas habilidades de modelagem dos estudantes, especificamente em relação à transferência entre modelos moleculares e fórmulas estruturais e modelos de moléculas em 2D e 3D?

Para tanto, os pesquisadores organizaram um grupo controle de 155 (cento e cinquenta e cinco) estudantes e compararam os resultados com dois grupos de estudantes: um grupo de 224 (duzentos e vinte e quatro) estudantes do segundo estágio e um grupo de 390 (trezentos e noventa) do terceiro estágio.

⁵ O termo habilidade de pensamento de alta ordem foi introduzido pelos autores do trabalho e caracterizado como atividades cognitivas mais complexas, tais como: construção de argumentos, criação de perguntas de pesquisa, mediação de contradições, identificação de habilidades de investigação científica, dentre outros.

⁶ A Taxonomia de Bloom, também conhecida como taxonomia dos objetivos educacionais, foi produzida na década de 1950 nos Estados Unidos, e classifica as possibilidades de aprendizagem em três domínios: cognitivo, afetivo e psicomotor (BLOOM, 1956).

O grupo controle foi submetido ao ensino tradicional, centrado no professor e em cujas seções teóricas foram acompanhadas de aulas de laboratório. Os grupos experimentais executaram as atividades nos ambientes informatizados e tiveram contato com artigos científicos com ênfase no questionamento e em questões vinculadas à indústria química. Os professores que concordaram em aplicar as atividades de ambiente informatizados nas unidades didáticas passaram por treinamento específico para poder contribuir com a pesquisa.

Foram realizados pré-testes e pós-testes em ambos os grupos a fim de ter acesso às suas habilidades de pensamento de alta ordem. Os questionários eram criados a partir de estudos de caso (questionários A e B, com casos diferentes), a fim de obter dos estudantes notavelmente as habilidades de saber formular perguntas, questionamentos e modelagem. Os pré-testes foram aplicados no início do ano e os pós-testes no final do ano. Os dados foram analisados conforme o Teste de Duncan e o nível de conhecimento químico dos estudantes foi categorizado em baixo, intermediário e alto.

Os autores, após a análise dos dados, chegam à conclusão de que o rendimento dos estudantes do grupo experimental no pós-teste para saber formular perguntas, questionamentos e modelagem foi muito superior em relação ao pré-teste, em especial daqueles que tiveram seu nível de conhecimento categorizado como baixo. Da mesma forma, muito importante foi a melhora da capacidade de fazer a passagem de moléculas do modelo 3D para a fórmula estrutural e vice-versa entre os pré-testes e pós-testes. Dessa forma, foi expressiva a construção de habilidades de pensamento de alta ordem nos estudantes do grupo experimental em função da participação nas atividades no ambiente informatizado, utilizando estratégias que privilegiam o questionamento, a análise de estudos de caso, a capacidade de questionar, dentre outras. Note-se que não apenas a visualização de fenômenos químicos dentro de uma atividade de modelagem molecular foi investigada, mas um dos alvos da investigação dos autores foi justamente as chamadas habilidades de pensamento de alta ordem, que são trabalhadas durante uma atividade de modelagem, seja ela molecular ou não. Um último comentário pode ser acrescentado sobre este artigo: o que os autores chamam de modelagem pode muito bem ser chamado efetivamente de visualização, pois todos os resultados indicam claramente um melhor aprendizado de habilidades visuo-espaciais, tais como capacidade de visualizar internamente moléculas 2D e 3D e capacidade de transpor modelos moleculares entre si.

Aksela e Lundell (2008), nono trabalho apresentado aqui, reportam o resultado da investigação da percepção de professores de química de diferentes regiões da Finlândia sobre o uso de modelagem molecular na sua prática docente. O público alvo foram professores em serviço e em formação que já tivessem passado por cursos de modelagem molecular anteriormente. A principal finalidade era tentar compreender até que ponto a inovação tem sido adotada e implementada na prática cotidiana desses professores. O grupo respondeu questionários com perguntas fechadas e abertas sobre o tópico.

Dentre as razões pelas quais eles utilizam *softwares* de modelagem molecular, destacam-se o fato de que estes *softwares* “ilustram conceitos difíceis para estudantes”; “desenvolvem a capacidade de visualização dos estudantes” e outras respostas associadas

a motivar os estudantes a aprender química. Por outro lado, as razões que os professores apontam para não utilizarem modelagem molecular em sua prática didática, destacam-se “conteúdo programático muito extenso, incapaz de incorporar estas atividades”; “muitos estudantes por sala de aula” e “dificuldades pessoais no uso de Tecnologias de Informação”.

A investigação dos autores também mostrou uma utilização variada de modelagem molecular no ensino. No entanto, a prática mais comum do uso de modelagem molecular foi apontada: estrutura espacial de moléculas e isomeria; análise de orbitais atômicos e moleculares; estudo de ligações químicas e densidade eletrônica e interações intermoleculares (ligação de hidrogênio, forças de Van der Waals).

Em que pese os próprios autores reconhecerem que o estudo é baseado em dados limitados (apenas dezenove professores responderam o questionário) talvez as conclusões mais importantes do estudo sejam: a) a formação de professores futuramente deve enfatizar mais o uso de diferentes métodos de ensino em modelagem molecular com o objetivo de propiciar apoio à aprendizagem significativa de química e formação de habilidades de pensamento de ordem superior e b) mesmo que recursos computacionais estejam implementados, os professores se recusam a utilizar a modelagem molecular sem algum tipo de treinamento que os permitam sentir-se à vontade com estas ferramentas.

O décimo artigo que iremos apresentar é o de Clauss e Nelsen (2009), que descrevem o desenvolvimento de uma unidade didática que foi desenvolvida para ser utilizada em uma disciplina experimental introdutória de química orgânica de dois créditos, na Universidade de Wisconsin–Madison, durante alguns semestres. O programa inclui uma parte introdutória que envolve construção, visualização e manipulação de moléculas; uma parte de análise conformacional; uma parte de teoria do orbital molecular para compreensão da distribuição eletrônica das moléculas e sua comparação com a teoria de ligação de valência; uma parte de reatividade de reações de substituição SN_1 e SN_2 ; uma parte de predição de regioquímica de reações e, por fim, uma parte específica sobre reações de Diels-Alder.

Dos objetivos iniciais do programa, chama atenção àquele que propunha dar oportunidade aos estudantes de uso da modelagem molecular computacional como uma ferramenta prática de resolução de problemas a fim de analisar os resultados de reações químicas já realizadas em laboratório, assim como prever resultados de reações a ser conduzidas em laboratório posteriormente.

Os autores discorrem sobre as dificuldades iniciais dos estudantes em relação à teoria do orbital molecular, a partir da exposição destes aos conteúdos que aparentemente entram em contradição com o que eles têm aprendido sobre estrutura eletrônica – estruturas de Lewis e teoria da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência, combinada com a teoria de hibridização e de ligação de valência. Um exemplo descrito sobre essas contradições está na estrutura eletrônica do oxigênio na molécula da água, na qual as teorias de ligação e de hibridização vistas na química geral e livros de química orgânica levam os estudantes a concluir que existem dois pares de elétrons não ligantes (hibridização sp^3). No entanto, ao se depararem com os dados gerados pelo *software*, por cálculos “semiempíricos” (método

PM3) e “*ab initio*” (SCF, com utilização de bases gaussianas tipo 6-31G”), verifica-se que existe de fato apenas um par de elétrons não ligante presente num orbital p puro.

Desta forma, os autores defendem que o uso da teoria do orbital molecular em conjunto com os *softwares* de modelagem molecular produziria um ganho de compreensão aos estudantes sobre estrutura atômica, ligação química e reatividade. Tópicos que são abordados com outras teorias podem ser mais bem compreendidos e até desmistificados utilizando a teoria do orbital molecular, tais como: aromaticidade, conjugação, hyperconjugação, reações de substituição eletrofílica aromática, dentre outras. Esta importante defesa da teoria do orbital molecular constitui uma contribuição rara, visto que este referencial teórico não é preferencial nos livros de química e na prática docente, que opta geralmente pela Teoria de Ligação de Valência.

Finalmente, o décimo-primeiro e último artigo que categorizamos dentro da área de ‘Pesquisa em Educação’ é o de Johnson e Engel (2011). Estes autores apresentam o relato da experiência de alteração curricular do curso de química da Universidade de Washington – constituindo a quarta tentativa reportada até a presente data – com o objetivo de integrar a química computacional nas disciplinas de físico-química. Os autores fazem uma abordagem inicial, mostrando as aplicabilidades já existentes dos *softwares* de modelagem em outras áreas da química, apontando exemplos e levantando hipóteses para a não utilização destas ferramentas em disciplinas de físico-química: excesso de conteúdo a vencer e pouco tempo para tal; falta de estrutura de *hardware* e *software*; tempo e estrutura para treinamento prévio de estudantes para utilizar o *software*, além da necessidade de suporte técnico permanente.

As hipóteses levantadas para tentar explicar a pouca introdução da modelagem molecular computacional foram testadas nas disciplinas de mecânica quântica e espectroscopia, com 75 (setenta e cinco) estudantes de graduação.

As conclusões a que chegaram os autores foram que os estudantes não tiveram maiores problemas para operar o *software*, especialmente em função dos tutoriais fornecidos previamente; com relação ao acesso ao *software*, foram utilizadas versões estudantis (mais baratas) ou mesmo *softwares* livres ou livres para uso acadêmico, o que barateou o custo; por fim, a introdução das ferramentas computacionais não perturbou expressivamente a estrutura de conteúdos do currículo, pois apenas um único tópico foi deixado de fora em relação à disciplina convencional.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao final da revisão de literatura e da análise dos artigos encontrados, chegamos à conclusão de que a integração dos *softwares* de modelagem molecular com o ensino de química – tanto no nível do ensino médio quanto na graduação – traz benefícios importantes ao processo de ensino e aprendizagem – e, portanto, merece ser perseguido.

Com a utilização da modelagem molecular por computador, os estudantes têm, de acordo com a revisão apresentada, a oportunidade de desenvolver habilidades visuo-

espaciais, de compreender melhor alguns aspectos da química no nível microscópico e simbólico que, normalmente, são de difícil compreensão.

Verificamos que são vários os relatos dessa integração em países como Estados Unidos, Reino Unido, dentre outros. No entanto, nossos critérios de pesquisa não identificaram a publicação de trabalhos similares no Brasil e América Latina.

Diante disso, apontamos a necessidade de fomentar a pesquisa na área do ensino de química a fim de possibilitar uma mudança de cenário, pois acreditamos que o ensino de química pode passar por uma mudança positivamente estimulante com a introdução dos *softwares* de modelagem molecular na abordagem de vários tópicos.

Tendo e vista os trabalhos apresentados, em especial os trabalhos de Saari e Viiri (2003), que apresentam forte indício de aprendizagem significativa representacional e Sanger e Badger II (2004), que demonstram o aprendizado de conceitos químicos após o uso de representações não tradicionalmente utilizadas em sala de aula – identificamos uma evolução conceitual após a aquisição de representações computacionais, na qual podemos utilizar o referencial de campos conceituais⁷ para compreender. O trabalho de Kaberman e Dori (2007) realiza uma extensiva análise a qual demonstra que atividades de visualização (que os autores chamam de modelagem) tem um impacto positivo em todas as características que já discutimos e, além disso, melhora a capacidade de pensamento crítico e analítico dos estudantes, as chamadas ‘habilidades cognitivas de alta ordem’. Finalmente, o trabalho de revisão de Jones, Jordan e Stillings (2005) mostra o poder da visualização no aprendizado, após a síntese de uma força-tarefa do *National Science Foundation*. E com relação à modelagem? Trabalhos como o de Reeve (2004) mostram que a modelagem pode facilmente servir de plataforma para se desvincular o trabalho no laboratório de química com as maçantes tarefas de preencher relatórios baseados em um modelo de experimentação vinculada à simples confirmação experimental de princípios teóricos. Estes autores partem de um modelo de ensino baseado na aprendizagem por descoberta e conseguem bons resultados de aprendizado. Mas o que mais a modelagem molecular propriamente dita pode trazer ao ensino de química? Esta pergunta está longe de ser respondida e acreditamos que esta tarefa de pesquisa é de grande importância para o desenvolvimento do uso das TIC no aprendizado de conceitos químicos.

REFERÊNCIAS

- AKSELA, M.; LUNDELL, J. Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. *Chemistry Education Research and Practice*, 9(4), 301, 2008.
- BARNEA, N.; DORI, Y. J. Computerized molecular modeling-the new technology for enhancing model perception among chemistry educators and learners. *Chemistry Education Research and Practice*, 1(1), p.109–120, 2000.
- BLOOM, B. S. *Taxonomy of Educational Objectives: Handbook I the cognitive domain*. New York: Mckay, 1956.

⁷ Teoria dos Campos Conceituais de Gerard Vergnaud.

BODGAN, R.; BIKLEN, S. K. *Investigação Qualitativa em Educação*. Porto: Porto Editora, 1994.

CLAUSS, A. D.; NELSEN, S. F. Integrating Computational Molecular Modeling into the Undergraduate Organic Chemistry Curriculum. *Journal of Chemical Education*, 86(8), 955, 2009.

CODY, J. A.; WISER, D. C. Laboratory Sequence in Computational Methods for Introductory Chemistry. *Journal of Chemical Education*, 80(7), 793, 2003.

COOK, G.; FELTMAN, P. M. Determination of Solvent Effects on Keto – Enol Equilibria of 1, 3-Dicarbonyl Compounds Using NMR Revisiting a Classic Physical Chemistry Experiment. *Journal of Chemical Education*, 84(11), p.1827–1829, 2007.

HABATA, Y.; AKABORI, S. Teaching ¹H NMR Spectrometry Using Computer Modeling. *Journal of Chemical Education*, 78(1), p.121–123, 2001.

JOHNSON, L. E.; ENGEL, T. Integrating Computational Chemistry into the Physical Chemistry Curriculum. *Journal of Chemical Education*, 88, p.569–573, 2011.

JONES, L.; JORDAN, K.; STILLINGS, N. A. Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 6(3), p.136–149, 2005.

JONES, M. Molecular modeling in the undergraduate chemistry curriculum. *Journal of Chemical Education*, 78(7), p.867–868, 2001.

KABERMAN, Z.; DORI, Y. J. Question posing, inquiry, and modeling skills of chemistry students in the case-based computerized laboratory environment. *International Journal of Science and Mathematics*, 7(3), p.597–625, 2007.

KIM, H.; SULAIMON, S.; MENEZES, S.; SON, A.; MENEZES, J. C. A Comparative Study of Successful Central Nervous System Drugs Using Molecular Modeling. *Journal of Chemical*, 4, p.1389–1393, 2011.

MORTON, M.; REYES, J.; DOWNUM, K.; HOFFMAN, G. G.; O'SHEA, K. E. Isolation and Spectral Analysis of Naturally Occurring Thiurubrine A. *Journal of Chemical Education*, 78(6), p.781–783, 2001.

PASELK, R. A.; ZOELLNER, R. W. Molecular Modeling and Computational Chemistry at Humboldt State University. *Journal of Chemical Education*, 79(10), 1192, 2002.

PURSER, G. H. Lewis Structures in General Chemistry: Agreement between Electron Density Calculations and Lewis Structures. *Journal of Chemical Education*, 78(7), 981, 2001.

REEVE, A. M. A Discovery-Based Friedel-Crafts Acylation Experiment: Student-Designed Experimental Procedure. *Journal of Chemical Education*, 81(10), 1497, 2004.

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, 2001.

SAARI, H.; VIIRI, J. A research-based teaching sequence for teaching the concept of modelling to seventh-grade students. *International Journal of Science Education*, 25(11), 1333–1352, 2003.

SHUSTERMAN, A. J.; MITCHELL, T. A.; FINOCCHIO, D.; KUA, J. Molecular Modeling Exercises and Experiments Predicting the Stability of Hypervalent Molecules. *Journal of Chemical Education*, 84(4), p.629–634, 2007.

SHUSTERMAN, A. J.; PATALINGHUG, W. C.; CHANG, M.; SOLIS, J. Molecular Modeling Exercises and Experiments Predicting the Shifts of Absorption Maxima of Azulene Derivatives Using Molecular Modeling and ZINDO CI Calculations of UV – Vis Spectra W. *Journal of Chemical Education*, 84(12), p.1945–1947, 2007.

WU, H.-K.; KRAJCIK, J. S.; SOLOWAY, E. Promoting understanding of chemical representations: Students' use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching*, 38(7), p.821–842, 2001.

YURIEV, E.; CHALMERS, D.; CAPUANO, B. Conformational Analysis of Drug Molecules: A Practical Exercise in the Medicinal Chemistry Course. *Journal of Chemical Education*, 86(4), 477, 2009.

van STRIJDONCK, G. P. F.; KAMER, P. C. J.; van LEEUWEN, P. W. N. M.; van HAAREN, R. J.; REEK, J. N. H.; OEVERING, H.; COUSSENS, B. B. Teaching Bonding in Organometallic Chemistry Using Computational Chemistry. *Journal of Chemical Education*, 79(5), 588, 2002.

Recebido em: jun. 2012

Aceito em: ago. 2013