

UNIVERSIDADE LUTERANA DO BRASIL
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DIRETORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE
CIÊNCIAS E MATEMÁTICA



**Um estudo de caso sobre a compreensão de conceitos
químicos mediante visualização de representações computacionais
3D utilizando o referencial de Campos Conceituais.**

Daniele Trajano Raupp

Orientador: Prof. Agostinho Serrano de Andrade Neto

CANOAS

2010

DANIELE TRAJANO RAUPP

Um estudo de caso sobre a compreensão de conceitos químicos mediante visualização de representações computacionais 3D utilizando o referencial de Campos Conceituais.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós - Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil como parte dos requisitos na obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Orientador: Prof. Agostinho Serrano de Andrade Neto

CANOAS

2010

Um estudo de caso sobre a compreensão de conceitos químicos mediante visualização de representações computacionais 3D utilizando o referencial de Campos Conceituais.

Daniele Trajano Raupp

Dissertação apresentada ao Programa de Pós - Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil para obtenção do título de mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

BANCA EXAMINADORA:

Prof^ª. Célia Maria Soares Gomes de Sousa
UnB

Prof. José Cláudio Del Pino
UFRGS

Prof. Luiz Antonio Mazzini Fontoura
ULBRA

Canoas, 18 de maio de 2010.

"[...] acho que só há um caminho para a ciência - ou para a filosofia: encontrar um problema, ver a sua beleza e apaixonarmo-nos por ele; casarmo-nos com ele, até que a morte nos separe - a não ser que obtenhamos uma solução. Mas ainda que encontremos uma solução poderemos descobrir, para nossa satisfação, a existência de toda uma família de encantadores, se bem que talvez difíceis, problemas-filhos, para cujo bem-estar poderemos trabalhar, com uma finalidade em vista, até ao fim dos nossos dias." Karl Popper

AGRADECIMENTOS

Meu agradecimento especial aos estudantes que participaram voluntariamente dos experimentos; ao Coordenador Daniel Jacobus do Curso Técnico em Química da Fundação Liberato Salzano Viera da Cunha e ao professor Carlos Wolf do Curso de Química da Ulbra, por oportunizarem a realização dessa pesquisa.

Agradeço à orientação e dedicação do professor Agostinho Serrano de Andrade Neto, que me auxiliou não só no desenvolvimento da pesquisa, mas também no início da minha carreira como pesquisadora em Ensino de Ciências.

Aos meus familiares, em especial meus pais João Carlos e Silvia e meus irmãos Suélen, Gabriele e irmão Lucas pela companhia e incentivo.

Aos professores do PPGEICIM pelo aprendizado e pela agradável convivência e aos meus colegas de mestrado: Helena, Mariana e Rohde pela parceria durante esse período.

Registro meu muito obrigada à Paramount Têxteis S.A e todos meus colegas, por possibilitar a flexibilização dos meus horários para que eu pudesse cumprir todas as atividades do mestrado, em especial à minha supervisora e amiga Angela Kohl pela confiança e apoio.

E finalmente meu sincero agradecimento aos integrantes da banca examinadora pela disponibilidade e preciosas observações que foram fundamentais não só para conclusão dessa dissertação, mas também para meus próximos passos na área de Ensino de Ciências.

RESUMO

A Química é considerada a mais visual das ciências por fazer uso de uma grande variedade de representações como forma de expressar conceitos. No século XIX a descoberta da isomeria revelou a relação entre a estrutura espacial das moléculas e a conectividade com as propriedades das substâncias. Conseqüentemente, a fórmula química que antes apenas ilustrava de forma qualitativa e quantitativa os elementos combinados, passou a ser representada espacialmente. Isso fez com que as representações evoluíssem naturalmente de simples desenhos no espaço 2D do papel à modelos 3D construídos em ambientes computacionais. Apesar do uso extensivo de modelos 2D e projeções (como a de Fischer ou Newman) no ensino, tantos estudantes iniciantes como avançados apresentam grande dificuldades em compreender e fazer uso da estrutura 3D da molécula. Assim sendo, representações moleculares 3D podem ser de grande auxílio na resolução de problemas em estereoisomeria. A compreensão dessas representações está relacionada com a capacidade de visualização e com uma habilidade cognitiva em especial: a habilidade visuoespacial, que consiste na manipulação de problemas visuais complexos, geralmente representados por símbolos. A importância da representação simbólica na cognição humana pode ser abordada pela ótica de um teórico cognitivista - Gerard Vergnaud - que considera a representação como mediadora da comunicação e do pensamento. Sua Teoria dos Campos Conceituais considera que as representações podem ajudar o estudante a resolver problemas que eles não conseguiriam resolver sem este tipo de suporte e que alguns tipos de representações podem ser “mais poderosos” que outros no processo de conceitualização. Essa dissertação tem como objetivo realizar um estudo de caso interpretativo sobre a evolução do conceito de isomeria geométrica de dois grupos de estudantes de Química (um do Ensino Médio e outro do Ensino Superior) após a manipulação de representações computacionais moleculares 3D. Os resultados centram-se num primeiro experimento na análise da evolução representacional dos estudantes de Ensino Médio. Em um segundo experimento, a análise é sobre os relatos dos estudantes de Ensino Superior (obtidos através de entrevistas baseadas na técnica *Think Aloud*) sobre como a visualização e manipulação dessas representações auxiliaram no desenvolvimento das tarefas relativas à isomeria geométrica. De maneira geral, há uma evolução no conceito de estrutura molecular dos estudantes, e conseqüentemente, na sua capacidade de resolver problemas de estereoisomeria. Essa evolução, conforme discutimos nos resultados apresenta-se centrada na evolução sistêmica e dialógica do triplete representação, situação e invariantes operatórios, o que indica, segundo Vergnaud, uma evolução do conceito como um todo.

Palavras-chave: Teoria dos Campos Conceituais, Representações Moleculares, Habilidades visuoespaciais, Isomeria, Química Computacional.

ABSTRACT

Chemistry is considered the most visual of the sciences because it makes use of a great variety of representations as a way to express concepts. In the XIX century the discovery of Isomers revealed the relation between the molecular spatial structure and connectivity with the properties of substances. Consequently the chemical formulae, that before only illustrated qualitatively and quantitatively the combination of the elements, were represented also spatially. This has made that representations evolved naturally from simple drawings in the 2D space of a plain sheet of paper to 3D models constructed in computational environments. Although there is an extensive usage of 2D models and projections (like Fisher and Newman's) in teachings, both advanced and initiate students present great difficulties in understanding and making use of the 3D structure of the molecule. Therefore, 3D molecular representations can be of great help in the resolution of stereoisomery problems. The comprehension of those representations is related to the capacity of visualization and with a special cognitive ability: the visuospatial ability that consists in the manipulation of complex visual problems, usually represented by symbols. The importance of the symbolic representation in human cognition can be approached by the framework of a cognitive theorist - Gerard Vergnaud - that considers the representation as a mediator of the communication and thinking. His theory of Conceptual Fields considers that the representations can help the student to solve problems that they wouldn't be able to solve without this kind of help and that some kind of representations are "more powerful" than others in the process of conceptualization. The objective of this dissertation is to do an interpretative case study of the evolution of the concept of Geometric Isomerism of two groups of chemistry students (one of high school and the other of undergraduate students) after the manipulation of computational 3D molecular representations. The results are centered, in the first experiment, in the analysis of the representational evolution of high school. In a second experiment, the analysis is performed on the reports of undergraduate students (obtained through interviews based in the *Think Aloud* technique) regarding how the visualization and manipulation of those representations can help the resolution of the tasks related to geometric isomerism. Generally speaking, there is an evolution in the concept of molecular structure of the students, and, consequently, in their ability to solve stereoisomerism problems. This evolution, like discussed in the results section, is centered in the systemic and dialogic evolution of the triplet representation, situation and operational invariants, that indicates, according to Vergnaud, in the evolution of the concept as a whole.

Keywords: Conceptual Field Theory, Molecular Representations, Visuospatial Abilities, Isomerism, Computational Chemistry

PUBLICAÇÕES DECORRENTES DESTE TRABALHO

1. RAUPP, D.; MARTINS, T. L. C. Estudo da Percepção Espacial Auxiliado por software no Ensino de Isomeria em Química Orgânica. In: XV Encontro de Química da Região Sul (XV SBQSul), Ponta Grossa - Paraná. CD de Resumos do XV Encontro de Química da Região Sul, 2007.
2. RAUPP, D.; SERRANO, A. Ligação Química - A origem dos compostos através da associação de átomos como vista por Pauling e Mulliken e sua implicação para o ensino de química. In: XV SSBEC - Simpósio Sulbrasileiro de Ensino de Ciências, Canoas, RS. CD de Atas do SV SSBEC, 2008.
3. RAUPP, D.; SERRANO, A. Oficina de Aprendizagem - O uso do ChemSketch no desenho computacional de moléculas. In: XV SSBEC - Simpósio Sulbrasileiro de Ensino de Ciências, Canoas, RS. CD de Atas do SV SSBEC, 2008.
4. RAUPP, D.; SERRANO, A. Representações externas, habilidades visuoespaciais e aprendizado de conceitos químicos: Uma revisão da literatura em ensino. In: XV SSBEC - Simpósio Sulbrasileiro de Ensino de Ciências, Canoas, RS. CD de Atas do SV SSBEC, 2008.
5. RAUPP, D.; SERRANO, A. Um panorama do uso de métodos computacionais no ensino de química com ênfase no desenvolvimento de habilidades visuoespaciais. In: XV SSBEC - Simpósio Sulbrasileiro de Ensino de Ciências, Canoas, RS. CD de Atas do SV SSBEC, 2008.
6. RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da Química Computacional e sua contribuição para educação em química. Revista Liberato, p. 13 - 22, 30 out. 2008.
7. RAUPP, D.; SERRANO, A., MOREIRA, M. A. Desenvolvendo habilidades visuoespaciais: uso de software de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica em química. Experiências em Ensino de Ciências – v4(1), p.65-78, 2009
8. RAUPP, D.; SERRANO, A.; MOREIRA, M. A. A evolução histórica da linguagem representacional química: uma interpretação baseada na Teoria dos Campos Conceituais. ENPEC, 2009 (Trabalho completo, publicado).
9. RAUPP, D.; MARTINS, T. L. C.; SOUZA, B. C.; SERRANO, A.; Uso de ferramentas visuoespaciais computacionais no ensino de isomeria geométrica: um estudo baseado na teoria de mediação cognitiva. Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias- v. 9(1),p. 18-34 ,2010.
10. RAUPP, D.; SERRANO, A.; MOREIRA, M. A.; A case study of the operating invariants acquired after using a computer molecular model building tool in geometric isomerism. A ser submetido à Computers & Education.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Casa dos planetas	15
Figura 2: Representações alquímicas	16
Figura 3: Estruturas de Couper	21
Figura 4: Projeção de Fischer.	22
Figura 5: Projeção de Cavalete	22
Figura 6: Projeção de Newman	22
Figura 7: Subdivisão dos isômeros	25
Figura 8: Moléculas com estrutura rígidas	26
Figura 9: Representação de olefinas e cicloalcanos	26
Figura 10. Evolução na representação de isômeros	27
Figura 11: <i>cis</i> -2-buteno e <i>trans</i> -2-buteno	32
Figura 12: Representação de isômeros	34
Figura 13: Representação de isômeros	35
Figura 14: Representação do CH ₄ e ligação extra (b)	61
Figura 15: Fórmula do etano (a) e opção “nomear estruturas” (b)	61
Figura 16: Opção "Otimização da estrutura" (a) e representação <i>wireframe</i> (b)	62
Figura 17: Representações 3D	62
Figura 18: Pré-teste JS	71
Figura 19: Pós-teste JS	72
Figura 20: Pré-teste LB	73
Figura 21: Pós-teste LB	74
Figura 22: Pré-teste TN	75
Figura 23: Pós-teste TN	75
Figura 24: Pré-teste GL	80
Figura 25: Pré-teste RG	83
Figura 26: Pré-teste LC	84
Figura 27: Pré-teste DL	85
Figura 28: Pré-teste LC	87
Figura 29: Representação de compostos cíclicos DL	90
Figura 30: Representações de RG no pré e pós-testes	92
Figura 31: Representação estudante DL no pós-teste	93
Figura 32: Representação dos compostos cíclicos estudante GL no pós-teste	97

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	11
1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	14
1.1 O USO E A EVOLUÇÃO DAS REPRESENTAÇÕES MOLECULARES EM QUÍMICA	14
1.1.1 Da Alquimia à Química.....	15
1.1.2 A reforma de Lavoisier	17
1.1.3 As representações de Berzelius	18
1.1.4 O caso específico da Química Orgânica.....	19
1.1.5 As representações dos compostos orgânicos.....	20
1.1.6 Isomeria em compostos orgânicos	23
1.1.7 Representações de isômeros por Werner e Smith	26
1.2 APRENDIZAGEM E VISUALIZAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA	28
1.2.1 O significado de visualização.....	29
1.2.2 Habilidades Espaciais e Visuoespaciais.....	30
1.2.3 Sistemas Representacionais.....	31
1.2.4 O pensamento visual e o Ensino de Química	32
1.2.5 O ensino de isomeria geométrica	33
1.2.6 O papel da representação 3D no ensino	36
1.3 USO DE SOFTWARE NO ENSINO DE QUÍMICA.....	38
1.3.1 Uso de computadores no desenvolvimento das habilidades visuoespaciais.....	40
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	42
2.1 A TEORIA DOS CAMPOS CONCEITUAS DE VERGNAUD.....	42
2.2 A UTILIDADE DA REPRESENTAÇÃO QUÍMICA NA CONCEITUALIZAÇÃO	50
2.3 TCC EM ENSINO DE CIÊNCIAS - REVISÃO DA LITERATURA	52
3. DELINEAMENTO DA PESQUISA	54
3.1 PROBLEMA DE PESQUISA.....	54
3.2 HIPÓTESES	54
3.3 OBJETIVOS	54
3.3.1 Objetivo Geral.....	55
3.3.2 Objetivos específicos	55
3.4 JUSTIFICATIVA.....	55
4 METODOLOGIA	58
4.1 CARACTERIZAÇÃO DA AMOSTRA EXPERIMENTO I.....	58
4.2 EXPERIMENTO I	58
4.3 CARACTERIZAÇÃO DA AMOSTRA EXPERIMENTO II	65
4.4 EXPERIMENTO II.....	65

5 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS DADOS	68
5.1 EXPERIMENTO I	68
5.1.1 Análise Representacional	70
5.1.2 Análise geral.....	76
5.2 EXPERIMENTO II.....	78
5.2.1 Análise Pré-testes Experimento II.....	79
5.2.2 Análise Pós-testes experimento II.....	88
6 CONCLUSÃO	99
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	102
ANEXOS e APÊNDICES.....	108

INTRODUÇÃO

A visualização desempenha um importante papel na compreensão de conceitos científicos devido ao grande número de representações utilizadas como forma de expressá-los. A Química é considerada a mais visual das ciências (HABRAKEN, 1996) e a utilização de representações como forma de expressão de conceitos e procedimentos químicos já era realizada desde o surgimento da alquimia.

Para investigar os fenômenos naturais por intermédio de idéias de átomos, moléculas e partículas subatômicas, os químicos desenvolveram uma variedade de representações, como modelos moleculares, estruturas químicas, fórmulas, equações e símbolos (WU; SHAH, 2004, p.465, tradução nossa).

O desenvolvimento dessa variedade de representações faz da Química um belo exemplo de como a ciência pode usar as representações e de como imagens são capazes de transmitir informações sutis que são difíceis de descrever em palavras (JONES; JORDAN; STILLINGS, 2001).

Na estereoquímica - ramo da química que estuda os aspectos tridimensionais da molécula - encontramos um caso típico da demonstração dessa sutileza: os estereoisômeros. Segundo a IUPAC (sigla em inglês para União Internacional de Química Pura e Aplicada) os estereoisômeros possuem constituição idêntica, mas diferem no arranjo de seus átomos no espaço e dividem-se em enantiômeros – entidades moleculares que são imagens especular uma da outra e não-sobreponíveis - e diastereoisômeros – que não são relacionadas como imagens especulares.

A descoberta da isomeria no século XIX trouxe consigo a necessidade de se ter uma representação espacial que ilustrasse a realidade molecular, o que resultou na evolução das representações de simples projeções no papel até os atuais modelos tridimensionais computacionais. No caso dos estereoisômeros as representações tridimensionais melhor ilustram a estrutura espacial. Por isso: “é bem documentado que a compreensão e o desempenho em química, e em particular, estereoquímica, são fortemente relacionadas com a visualização 3D” (PAVLINIC ET AL., 2007, p.1, tradução nossa).

A visualização 3D em Química envolve habilidade de compreender e expressar-se por meio da fórmula espacial a fim de representar compostos. Neste sentido as habilidades espaciais são um dos fatores cognitivos que podem ser relevantes para o domínio de conceitos de química (WU; SHAH, 2004; GILBERT, 2005).

As habilidades espaciais são formadas por um conjunto de fatores, sendo um deles a visualização espacial (daí o termo visuoespacial) que utiliza uma seqüência complexa de manipulação mental para a resolução de problemas. Desta forma, torna-se evidente que habilidades visuoespaciais são um importante componente no aprendizado em Química (WU; SHAH, 2004). “Na química o pensamento visuoespacial nunca foi tão dominante como hoje” (HABRAKEN, 2004, P. 1, tradução nossa) e por esta razão a investigação química está cada vez mais centrada em fenômenos que são compreendidos e comunicados por meio de representações visuais.

Sendo assim, ferramentas para estimular a visualização mediante o uso de representações estão se tornando amplamente disponíveis, principalmente por meio do uso de computadores, que estão sendo utilizados desde a década de 60 no Ensino de Química. A pesquisa sobre impacto das representações computacionais em estudantes pode auxiliar na compreensão do papel das tecnologias de informação e comunicação no mundo atual. Dentre as ferramentas tecnológicas, os softwares de visualização e construção de modelos moleculares têm ajudado não só os alunos de maneira efetiva, mas também os cientistas, como as pesquisas na área de Educação Química e Química Pura têm mostrado. Investigações atuais sobre nanotubos de carbono, polímeros condutores, *design* de fármacos, dentre outras são realizadas e comunicadas com a ajuda de imagens geradas por computador (JONES, JORDAN, STILLING, 2005).

A importância da representação para a compreensão do universo químico e o papel que o uso de modelos tridimensionais desempenha no aprendizado de determinados tópicos - como o caso da Isomeria - motivou-nos na busca de uma interpretação cognitivista para a dinâmica representação simbólica - conceitualização - desenvolvimento cognitivo, dinâmica que pode ser interpretada sob a ótica do teórico Gerard Vergnaud.

A Teoria dos Campos Conceituais (TCC) por ele desenvolvida, considera que o processo de formação de conceitos envolve três conjuntos: o das situações, o dos invariantes operatórios e o das representações (VERGNAUD, 1996c). Nosso maior foco está no conjunto das representações, baseado nos pressupostos da TCC que considera que elas podem ajudar o estudante a resolver problemas que eles não conseguiriam resolver sem este tipo de suporte e que alguns tipos de representações podem ser “mais poderosos” que outros no processo de conceitualização (VERGNAUD, 1982).

Sendo assim, esta pesquisa consiste no estudo de caso interpretativo de dois grupos de estudantes de Química, com o objetivo de avaliar se o uso de modelos tridimensionais computacionais auxilia o aprendizado do conceito de isomeria geométrica.

Para realizar esse estudo optamos por utilizar um software de construção de modelos moleculares (ChemSketch da ACD Labs)¹ já que esse tipo de ferramenta tem sido considerada por pesquisadores como uma alternativa eficiente para desenvolver habilidades visuoespaciais e, conseqüentemente, a capacidade de compreender conceitos químicos fortemente vinculados à visualização espacial.

Como nosso objetivo não é ensinar o conteúdo isomeria geométrica, e sim utilizar uma metodologia que acreditamos apresentar aos estudantes representações mais poderosas às comumente utilizadas em sala de aula (modelos bidimensionais e projeções), participaram da pesquisa apenas estudantes que já haviam cursado as disciplinas que contemplavam este tópico sem qualquer contato com ferramentas computacionais de química. A coleta de dados para o estudo de caso iniciou com a aplicação de um teste para verificar o nível de representação tridimensional que cada estudante era capaz de representar no papel baseado apenas em seus conhecimentos prévios. Após realizamos instrução com software para que cada estudante construísse e visualizasse diversos modelos moleculares 2D e 3D para finalmente aplicarmos um último teste semelhante ao primeiro. No segundo experimento além dos testes, realizamos entrevistas baseadas na técnica *Think Aloud*.

Os resultados centram-se, primeiramente, na capacidade dos estudantes representarem tridimensionalmente as estruturas, sem auxílio de modelos, ou seja, evolução representacional dos estudantes após a visualização e manipulação de representações tridimensionais computacionais. Em um segundo experimento, foi mais direcionada aos relatos dos estudantes sobre como a visualização e manipulação dessas representações auxiliaram no desenvolvimento das tarefas relativas à isomeria geométrica, visto que uma evolução na representação poderá ser traduzida, segundo Vergnaud, como uma evolução na compreensão do conceito.

¹ Disponível no site <http://www.acdlabs.com>

1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O desenvolvimento da Química ocasionou o surgimento não só de uma linguagem específica como também a construção de um conjunto de representações simbólicas que evoluiu com o passar dos anos. As descobertas realizadas a partir da segunda metade do século XIX acerca da estrutura espacial das moléculas fizeram os químicos desenvolverem representações mais próximas da realidade molecular, de modo a comunicar o conceito da forma mais fiel possível (MORTIMER, 1996).

Moléculas que antes eram representadas no espaço do papel, hoje podem ser visualizadas por meio de modelos tridimensionais computacionais. Dependendo do conceito químico envolvido as representações computacionais podem ser consideradas mais poderosas e representam melhor o problema facilitando a visualização de detalhes da estrutura molecular.

Com a evolução das representações, as habilidades cognitivas necessárias para operá-las também foram sendo modificadas, exigindo cada vez mais o domínio da visualização espacial.

1.1 O USO E A EVOLUÇÃO DAS REPRESENTAÇÕES MOLECULARES EM QUÍMICA

A Química é considerada uma ciência visual por conter diversos tipos de representações que requerem o uso de habilidades visuoespaciais para fins de compreensão de conceitos: fórmulas, estruturas moleculares, modelos atômicos, reações químicas, etc. Essas visualizações são utilizadas na comunicação de conceitos para estudantes de Química (WU; SHAH, 2004).

Representações, nesta área, vem sendo utilizadas desde a Alquimia. A simbologia na linguagem alquímica foi inicialmente criada para restringir a compreensão da linguagem aos iniciados garantindo seu caráter oculto (HOLMYARD, 1990).

Posteriormente, com separação entre Alquimia e Química, os químicos, durante anos, procuraram formas de expandir essa linguagem, em especial a linguagem escrita, mas não havia um padrão entre os químicos de diferentes países.

Acredita-se que unificação da linguagem química foi possível a partir de 1921 quando a IUPAC, uma organização científica, internacional e não-governamental, que por

meio de uma série de comitês e comissões, passou a fazer recomendações sobre a nomenclatura e símbolos que devem ser usados em publicações técnicas e científicas.

Buscamos, a seguir, apresentar de forma sucinta um panorama desta evolução.

1.1.1 Da Alquimia à Química

A visualização é um fenômeno considerado tardio na Alquimia Medieval. Segundo Obrist (2003), praticamente não existem elementos pictóricos em documentos que datam da introdução da Alquimia que ocorreu por volta de 1140 até meados do século XIII. Mas após esse período ocorreu uma mudança no padrão de linguagem alquímica:

Durante os próximos 150 anos, o modo de representação primário permaneceu lingüístico e proposicional; formas pictóricas foram desenvolvidas de forma lenta e não contínua. Este estado das coisas mudou no início do século quinze quando ilustrações não mais meramente pontuavam textos alquímicos, mas eram organizadas em séries completas e em representações pictóricas sintéticas dos princípios governando a disciplina (OBRIST, p. 1, tradução nossa).

Essa autora comenta que no “Livro dos Segredos da Alquimia”, podemos perceber que astrologia desempenha um papel importante para ajudar a entender a Alquimia como ciência e também para orientar suas operações. A Figura 1 contém uma tabela listando qualidades comuns entre planetas e metais. Segundos os alquimistas, para adquirir os conhecimentos era necessário conhecer a ordem dos planetas em relação aos metais como consta na chamada “Casa dos Planetas”.



Figura 1: Casa dos planetas
Fonte: Obrist, 2003, p. 11

Assim a partir do século XV as representações simbólicas passaram a ser parte integrante do universo alquímico, em especial da linguagem. Por motivo de segurança, os alquimistas utilizavam uma linguagem enigmática para descrever suas teorias, materiais e operações. Essa linguagem tratava os tópicos dentro da filosofia esotérica usando, por

exemplo, uma notação na qual os signos planetários indicavam os metais (HOLMYARD, 1990).

Com exceção da representação dos sete metais conhecidos (ouro, prata, cobre, ferro, mercúrio, chumbo e estanho), havia pouca uniformidade nos esquemas adotados pelos diferentes alquimistas. Na Figura 2 encontramos alguns dos sinais freqüentemente utilizados. Os sinais dos materiais (Figura 2, esquerda) estão associados aos sinais dos planetas devido a uma relação astrológica. Os símbolos do sol e da lua (ouro e prata, respectivamente) são meramente representacionais, os demais são interpretados diferentemente de acordo com o texto alquímico lido e optamos por não discuti-los aqui.

Além dos materiais, algumas operações ou estágios de preparação também estavam associados aos signos (HOLMYARD, 1990). Na Figura 2, à direita, podemos observar a simbologia para as seguintes operações: calcinação, congelamento, fixação, digestão, destilação, sublimação, separação, ceração², fermentação, multiplicação e projeção.

☉ gold [Sun]	♁ sulphur	♁ sal ammoniac	1. Calcination	♈ Aries, the Ram
☾ silver [Moon]	♁ salt	♁ sublimation	2. Congelation	♉ Taurus, the Bull
♀ copper [Venus]	♁ water	♁ sublimate of mercury	3. Fixation	♊ Gemini, the Twins
♂ iron [Mars]	♁ fire	♁ realgar	4. Solution	♋ Cancer, the Crab
♁ mercury	♁ aqua fortis	♁ vitriol	5. Digestion	♌ Leo, the Lion
♁ lead [Saturn]	♁ earth	♁ retort	6. Distillation	♍ Virgo, the Virgin
♁ tin [Jupiter]	♁ air	♁ common salt	7. Sublimation	♎ Libra, the Scales
			8. Separation	♏ Scorpio, the Scorpion
			9. Ceration	♐ Sagittarius, the Archer
			10. Fermentation	♑ Capricornus, the Goat
			11. Multiplication	♒ Aquarius, the Water-carrier
			12. Projection	♓ Pisces, the Fishes

Figura 2: Representações alquímicas
Fonte: Holmyard, 1990, p.153, 154.

Ao mesmo tempo, a simbologia alquímica precisava ser difundida entre os alquimistas, mas restrita para manter seu caráter hermético. Por isso a Alquimia usou e abusou de signos e símbolos incompreensíveis para qualquer pessoa que não fosse iniciada. Essa linguagem foi criada pelos estudiosos da Alquimia, que associavam os materiais e cada fase de seus trabalhos, a imagens ou formas que lhe eram familiares, criando assim, verdadeiros códigos de interpretação (HOLMYARD, 1990).

Mais tarde, no século XVII os chamados mecanicistas propuseram um novo modelo de mundo. Esse novo modelo teria suas bases na clareza e na mensurabilidade de uma

² “ceração” é realizada adicionando-se continuamente um líquido à substância enquanto aquecida. Isto tipicamente resulta em uma substância mais macia ao mesmo tempo em que dá a ela uma aparência encerada.

máquina, contrariando os princípios da Alquimia considerados indefinidos e ocultos. Goldfarb (2001) enfatiza a mudança que ocorreu quanto às interpretações analógicas e simbólicas que apresentavam uma relação animística e mágica com a natureza. Essas interpretações cederam lugar para uma descrição analítica e específica do fenômeno em si, pois o caráter holístico e místico da alquimia foi finalizado e, em seu lugar, surgiu uma interpretação quantitativa e mecanicista do mundo e da matéria.

A simbologia, no entanto não deixou de ser utilizada. A diferença é que as representações químicas passaram a ser aplicadas para demonstrar unicamente o conceito químico envolvido, sem uma possível interpretação dualista como ocorria na Alquimia. Com o passar dos anos, a representação em Química tornou-se mais do que um simples desenho, “[...] tornou-se um modo de pensar e um dominante modo de pensar” (HABRAKEN, 2004, p.90, tradução nossa).

Essa mudança pode ser percebida ao longo do tempo, observando que com expansão da Química, a comunidade científica foi criando cada vez mais representações sem um consenso entre os químicos de diferentes países; fato anteriormente observado nos alquimistas que não apresentavam uma uniformidade na linguagem simbólica.

1.1.2 A reforma de Lavoisier

A proliferação de representações ocorreu por conta de dois motivos básicos: em primeiro lugar, o número de compostos cresceu consideravelmente e, portanto, representações cujo vínculo era principalmente sensorial (e em especial visual) já estavam atingindo seu limite de descrição de diferentes substâncias. Em segundo lugar, este crescimento do número de compostos ocorreu concomitantemente com a expansão do Iluminismo francês (ANDERSON, 1984 apud KOZMA, 2000), que passou a não aceitar mais nomes alquímicos que tivessem conotações místico-religiosas (CROSSLAND, 1962).

Lavoisier³ sugeriu uma nova forma de denominar os compostos químicos, confrontando a já conhecida nomenclatura alquímica. Lavoisier era muito influenciado por Etienne Bonnot Condillac, filósofo francês que tinha uma preocupação especial de que cada palavra em nossa linguagem tivesse seu significado bem conhecido e explicitado (CROSSLAND, 1962). Como bem observa Anderson, (1984 apud KOZMA, 2000), Condillac tinha uma posição específica acerca do papel da linguagem: “Análise é realizada e apenas

3 Antoine Laurent Lavoisier (1743-1794), químico francês, é considerado o pai da Química. Sempre adotou uma abordagem moderna baseado na experimentação. Tentou ainda encontrar uma linguagem própria para a química. Disponível em <<http://scienceworld.wolfram.com/biography/topics/Chemists.html>>.

pode ser realizada usando signos. Nós apenas raciocinamos bem ou raciocinamos mal na medida em que nossa linguagem é bem ou mal construída” (tradução nossa).

Assim, no livro *Méthode de Nomenclature Chimique*, de autoria de Lavoisier, Guyton de Morveau, Fourcroy e Berthollet, publicado em 1787, a proposta era de que a nomenclatura química fosse (re-) construída a partir dos constituintes de um determinado composto. Dessa forma, a idéia central da construção dessa nova representação era indicar como os compostos são criados.

Lavoisier e os demais autores romperam com as idéias alquimistas ao propor a desmistificação da Química por intermédio da criação de uma linguagem apropriada, que não se baseasse exclusivamente em propriedades sensoriais das substâncias. Essa linguagem mais apropriada facilitaria a relação representação – conceito (FLOR, 2008). Dessa forma a linguagem expressaria as relações químicas e não seria uma atribuição arbitrária como era grande parte da terminologia alquímica (BELL, 2007). Lavoisier iniciou a revolução na nomenclatura química e anos mais tarde Berzelius também deixou sua importante contribuição.

1.1.3 As representações de Berzelius

A linguagem proposta por Berzelius⁴ no século XIX (BERZELIUS, 1814 apud CROSSLAND, 1962) contrastava com a linguagem de Lavoisier que era uma nomenclatura descritiva que só previa quais substâncias iriam resultar de uma reação. A proposta de Berzelius trouxe à sua maneira uma linguagem matemática que podia prever as quantidades relativas que estavam envolvidas na reação (STRATHERN, 2002). Um exemplo da diferença entre ambas pode ser exemplificado pela representação da reação do zinco com ácido clorídrico:

Lavoisier: zinco + ácido clorídrico = cloreto de zinco + hidrogênio

Berzelius: $\text{Zn} + 2 \text{HCl} = \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$

A criação da simbologia de Berzelius para os elementos possibilitou a criação da escrita dos compostos. O cloreto de sódio, por exemplo, poderia ser escrito como NaCl e para

4 Jons Jakob Berzelius (1779-1848) químico sueco é considerado um dos fundadores da Química moderna e um dos maiores químicos do século XIX. Determinou as massas atômicas de cerca de 43 elementos. Descobriu vários elementos e reconheceu a existência de isômeros.
Disponível em <<http://scienceworld.wolfram.com/biography/topics/Chemists.html>>.

os casos nos quais se observa mais de um elemento, o número subscrito indicaria a quantidade como no caso do dióxido de carbono, poderia ser escrito como CO_2 que contém “duas unidades” de oxigênio.

Berzelius é o pai da atual simbologia para identificação dos elementos químicos, por meio de uma notação simbólica. Ele conclui que a representação gráfica de cada elemento deveria utilizar a primeira letra de seu nome latino. Para o potássio (kalium) seria a letra K, para o fósforo (phosphorum) a letra P. Quando necessário, uma segunda letra diferenciadora deveria ser acrescentada como, por exemplo, o ouro (aurum) que se tornou Au e o cobre (cuprum) que se tornou Cu. A criação desta representação para os elementos possibilitou a escrita dos compostos químicos numa forma simbólica simples, e finalmente deu a Química uma linguagem universal, como a Matemática (STRATHERN, 2002).

Segundo Mortimer (1996) a idéia de fórmula química surgiu como uma forma de expressar as quantidades das substâncias elementares que se combinam. As fórmulas químicas retratam por meio de sua simbologia a composição qualitativa e quantitativa das substâncias e são, em resumo, formas abreviadas de representar a composição das mesmas.

A transformação da linguagem mística e incompreensível dos alquimistas em um sistema sem restrições e compreensível até mesmo por pessoas com pouca educação formal revolucionou a Química. O resultado foi um grande aumento no número de pessoas interessadas em química, o que proporcionou inúmeros descobrimentos na área. A simbologia química de Berzelius, em particular ofereceu um novo auxílio à Química Orgânica (CROSSLAND, 1962). Mesmo químicos mais conservadores creditavam valor ao seu trabalho na área.

1.1.4 O caso específico da Química Orgânica

A Química Orgânica tornou-se uma especialidade da Química por volta de 1850. Contudo, o termo *orgânico* surgiu anos antes em 1807, quando Berzelius denominou os compostos derivados de organismos vivos como orgânicos, e *inorgânicos* os compostos não derivados de coisas vivas.

A definição atual considera que compostos orgânicos⁵ são constituídos principalmente por carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O) e nitrogênio (N). Esses compostos possuem uma peculiaridade: como o carbono exibe uma vasta diversidade não só nos modos como

5 Há compostos classificados como orgânicos que não possuem carbono em sua constituição, como por exemplo os silanos, compostos análogos dos alcanos, de fórmula geral $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$.

forma as ligações, mas também no número de outros elementos com os quais é capaz de se ligar, existe um número consideravelmente maior de compostos de carbono em relação aos demais elementos combinados (LE COUTEUR;BURRESON, 2006).

Essa diversidade de combinações gerou a necessidade do uso de uma linguagem específica. Pois segundo Roque e Silva: “A falta de homogeneidade dos pesos atômicos, dos nomes e das fórmulas moleculares, além do grande número de isômeros observados para os compostos orgânicos, tornava a comunicação dos trabalhos na área bastante difícil e, com isto, o seu desenvolvimento era prejudicado” (2008, p.922).

Em meados do século XIX, os cientistas tinham uma variedade exagerada de representações que poderiam ser utilizadas em Química. A representação simbólica da água, por exemplo, podia ser escrita como HO, H₂O, HO ou OH. Em 1867 Kekulé (apud ROQUE; SILVA, 2008) comenta que, somente para o ácido acético, em 1861, haviam 19 diferentes representações. Para sanar esta dificuldade fazia-se necessário a criação de uma linguagem homogênea na Química, caso contrário sua expansão poderia ser prejudicada, especialmente na Química Orgânica.

A linguagem escrita e falada dos compostos orgânicos só começou a ser organizada após o Congresso de Karlsruhe (Alemanha) em 1860. Participaram desses encontros 140 importantes químicos dos diferentes continentes, envolvendo representantes de doze países. O principal objetivo do congresso era encontrar um consenso, de uma comunidade científica em expansão, em relação à linguagem e às representações utilizadas pelos químicos (OKI, 2009). Contudo, após esta contribuição, foram necessários outros desenvolvimentos para evolução representacional de compostos orgânicos, iniciando pela contribuição de Couper.

1.1.5 As representações dos compostos orgânicos

Até meados de 1860 a maioria dos químicos usava fórmulas meramente como representações convenientes de compostos orgânicos. Essas fórmulas não tinham a intenção de representar o arranjo dos átomos na molécula. Em 1861, o químico russo Butlerow, em um congresso, formalmente introduziu o conceito de estrutura. Butlerow não defendia a originalidade se sua idéia e em particular mencionou a estrutura do químico escocês Couper (CROSSLAND, 1962). Couper foi um dos pioneiros da descoberta das múltiplas valências do carbono. Sugeriu que cada valência do carbono fosse representada por um traço dando origem à formula estrutural plana. As ligações do carbono, quando da divulgação do trabalho de Couper, eram classificadas em três tipos: simples, dupla ou tripla, na qual cada ligação é

representada por um traço conectando ambos os átomos ligantes conforme ilustrado na Figura 3.

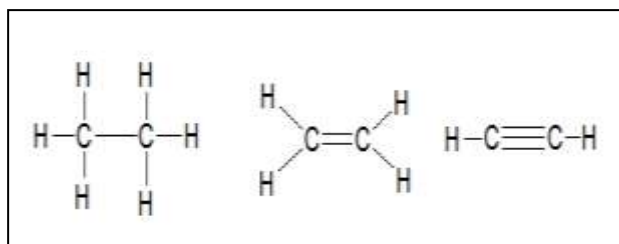


Figura 3: Estruturas de Couper

Couper introduz elementos representacionais que refletem o conceito de ligação, devido à suas experiências com situações-problema nas quais múltiplas valências poderiam ocorrer para o carbono. Assim, o conceito de composto químico incorporaria, portanto, o de ligação química (ou tipo de ligação química), permitindo a solução de uma gama maior de situações-problema que envolviam o conceito de valência. Mais uma vez, esta reconstrução representacional incorporava conceitos novos (ligação química) ao conceito de composto químico, bem como novos invariantes.

Porém com as descobertas realizadas acerca da estrutura espacial dos compostos, a estrutura proposta por Couper não representava de maneira adequada a molécula. Para isso foi necessário criar uma representação tridimensional que melhor representasse essa situação.

A partir da segunda metade do século XIX, os químicos começaram a usar as fórmulas como uma representação espacial da molécula, que poderia explicar várias propriedades das substâncias. As fórmulas químicas passavam a representar não só as quantidades combinadas mas também a realidade molecular, permitindo antever como os átomos que constituíam a molécula estavam distribuídos no espaço e de que forma se ligavam uns aos outros (MORTIMER, 1996, p.19).

As representações espaciais passaram a ter grande utilidade para a Química, pois permitem a percepção de detalhes estruturais sutis mais facilmente. Para facilitar a compreensão das estruturas moleculares químicas, algumas convenções foram criadas para representar, bidimensionalmente, no papel, objetos que estão no espaço tridimensional (BALABAN, 1999).

Foi então que os químicos desenvolveram as projeções que são usadas para mostrar a estrutura tridimensional dos compostos de diferentes formas. As projeções tridimensionais em papel auxiliam na compreensão do arranjo espacial molecular, quando não é possível se utilizar outros meios como modelos concretos ou computacionais.

[...] as fórmulas tridimensionais são evidentes e podem ser manipuladas, no papel, da maneira que se quiser, desde que não se rompam as ligações. Além disso, nos ensinam a ver (na imaginação) as moléculas em três dimensões e esta capacidade tem bastante serventia (SOLOMONS, 1996, p.217).

Citaremos resumidamente três tipos de projeção conforme definição e ilustração encontrada no Compendio de Terminologia Química da IUPAC (1997).

- Projeção de Fischer: A Figura 4 mostra uma forma de projeção na qual ligações desenhadas verticalmente são consideradas se situando abaixo de um plano de projeção e ligações horizontais se situando acima deste plano.

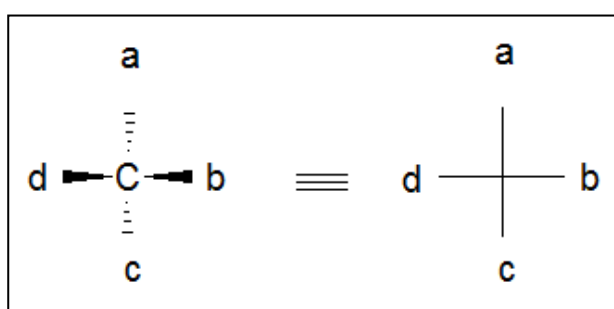


Figura 4: Projeção de Fischer.

Projeção de Cavalete: A Figura 5 mostra uma forma de projeção indicando o arranjo especial de ligações em dois átomos de carbono adjacentes.

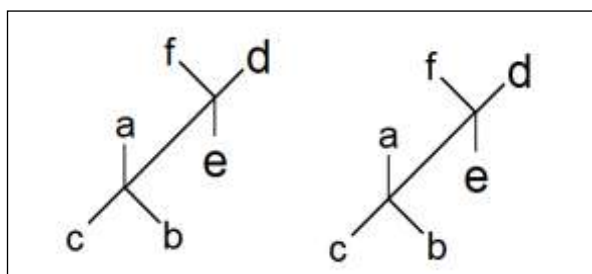


Figura 5: Projeção de Cavalete

- Projeção de Newman: A Figura 6 mostra uma forma de projeção representando o arranjo especial de ligações em dois átomos adjacentes em uma molécula.

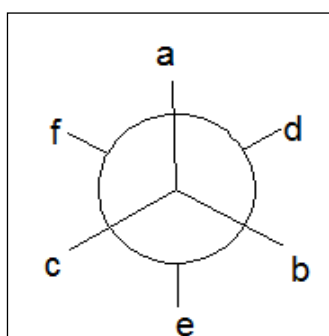


Figura 6: Projeção de Newman

Roque e Silva (2008) comentam sobre como essas projeções facilitam a compreensão da estrutura. O uso de projeções propiciou uma maneira de se estudar e entender melhor a estrutura molecular invisível a nossos olhos, uma vez que proporcionou uma forma de representá-las. Com o aprendizado dessa forma de representação o químico não precisa mais ter o modelo concreto em suas mãos, ele consegue imaginá-lo a partir da fórmula estrutural desenhada. Mas em alguns casos específicos e com determinados estudantes as projeções não são suficientes para fazer a conexão com a estrutura tridimensional como veremos mais adiante.

1.1.6 Isomeria em compostos orgânicos

Milhões de compostos químicos são conhecidos, e em sua grande maioria pertencem ao domínio da Química Orgânica. As inúmeras possibilidades de ligação trazem consigo uma característica particular – o arranjo espacial que nos permite observar o comportamento químico das moléculas em função da estrutura. A isomeria é caracterizada pela existência de duas ou mais substâncias que apresentam fórmulas moleculares idênticas, mas que diferem em suas fórmulas estruturais ou espaciais. A constatação da isomeria mostrou que as propriedades das substâncias químicas não dependem unicamente de sua composição, mas também de sua conectividade e do arranjo espacial dos átomos dentro da molécula. Essa constatação ocorreu em 1820 quando, segundo Esteban (2008), Liebig⁶ e Wöhler⁷ emergiram como parte de uma segunda geração de importantes químicos que eram discípulos de grandes mestres como Berzelius e Gay-Lussac⁸. Liebig trabalhou com derivados do ácido fulmíaco, que o mesmo determinou ser fulminato de prata (um forte reagente explosivo). Wöhler, durante o mesmo período de 1820, trabalhando no laboratório de Berzelius, analisou um composto de prata, o cianato de prata, e concluiu que era um sal de prata de derivado um ácido desconhecido (mais tarde identificado como ácido cianídrico).

O resultado da análise quantitativa de composição química realizada por Wöhler para o cianato de prata (Ag-NCO) era a mesma da análise quantitativa de composição obtida por Liebig para o fulminato de prata (Ag-CNO). Assim, estes dois compostos diferentes tinham a

6 Justus von Liebig (1803-1873) químico alemão e um dos maiores professores de química da sua época.*

7 Friedrich Wöhler (1800 -1882) pedagogo e químico alemão precursor no campo da química orgânica. Famoso por sua síntese da uréia. Mediante sua contribuição demonstrou que, ao contrário do pensamento científico da época, um produto dos processos vitais (orgânico) pode ser obtido em laboratório a partir de matéria inorgânica começando, assim, a queda da teoria da força vital. Essa obtenção ficou conhecida como síntese de Wöhler.*

8 Joseph Louis Gay-Lussac (1778-1850) físico e químico francês. Conhecido por sua contribuição às leis dos gases.*

*Disponível em <<http://scienceworld.wolfram.com/biography/topics/Chemists.html>>.

mesma composição e a conclusão óbvia, na época, da discordância entre os resultados era que um dos dois tinha de estar errado. Como Liebig tinha um caráter agressivo, acusou Wöhler de resultados errôneos. Wöhler então enviou seu composto ao concorrente que admitiu abertamente, depois de analisar, que cometera um erro ao acusar Liebig. E curiosamente, este foi o início de uma amizade e colaboração científica entre os dois cientistas (ESTEBAN, 2008).

Essa conclusão contraditória criou um dilema, já mencionado: dois compostos com muitas propriedades diferentes tinham a mesma composição. Até então, era fato consumado na Química que existia uma correspondência biunívoca entre a composição de uma substância (de acordo com a lei de proporções definidas) e suas propriedades. Gay-Lussac argumentou que as diferenças entre as propriedades poderiam ser devido a diferentes arranjos dos elementos, e outros químicos, eram da mesma opinião. Mas nenhuma explicação realmente satisfatória foi fornecida.

A resposta foi fornecida por Berzelius, o orientador de Wöhler. Vários outros fatos químicos semelhantes também emergiram em outros laboratórios, resultante da pesquisa de diferentes químicos. Foi então que Berzelius propôs o conceito de Isômero, e que era compreensível dentro da teoria atômica de Dalton. A primeira explicação da isomeria envolvia diferenças de conectividade. Com o tempo, a isomeria se tornou um conceito mais complexo, pois compostos com a mesma conectividade mostravam também propriedades diferentes. Estas moléculas só poderiam ser compreendidas dentro da perspectiva da Estereoquímica, que estuda como os átomos se arranjam espacialmente dentro de uma mesma molécula. Isto levou ao conceito hoje denominado configuração, que explicava a diferença em algumas moléculas como, por exemplo, as duas formas do ácido tartárico ou os ácidos maleico e fumárico.

A constatação da Isomeria representou o início da química estrutural, abrindo caminho para o estabelecimento das fórmulas estruturais e contribuindo para explicar a abundância dos compostos orgânicos, assim, tornando a Química Orgânica mais clara, e não mais “uma floresta escura com poucas ou nenhuma trilha” (ESTEBAN, 2008,p.1202, tradução nossa).

Graças a contribuição destes químicos sabemos que os isômeros apresentam a mesma composição química, tendo seus átomos conectados de forma diferente ou da mesma forma e podem ser subdivididos conforme Figura 7.

Segundo a IUPAC (1997) o estereoisomerismo ocorre devido a diferenças no arranjo espacial dos átomos sem eventuais diferenças de conectividade ou multiplicidade de ligação entre os isômeros. Por conta disso os estereoisômeros são isômeros que possuem

constituição idêntica, mas que diferem no arranjo de seus átomos no espaço. Existem diversos tipos de estereoisômeros classificados como enantiômeros e diastereoisômeros.

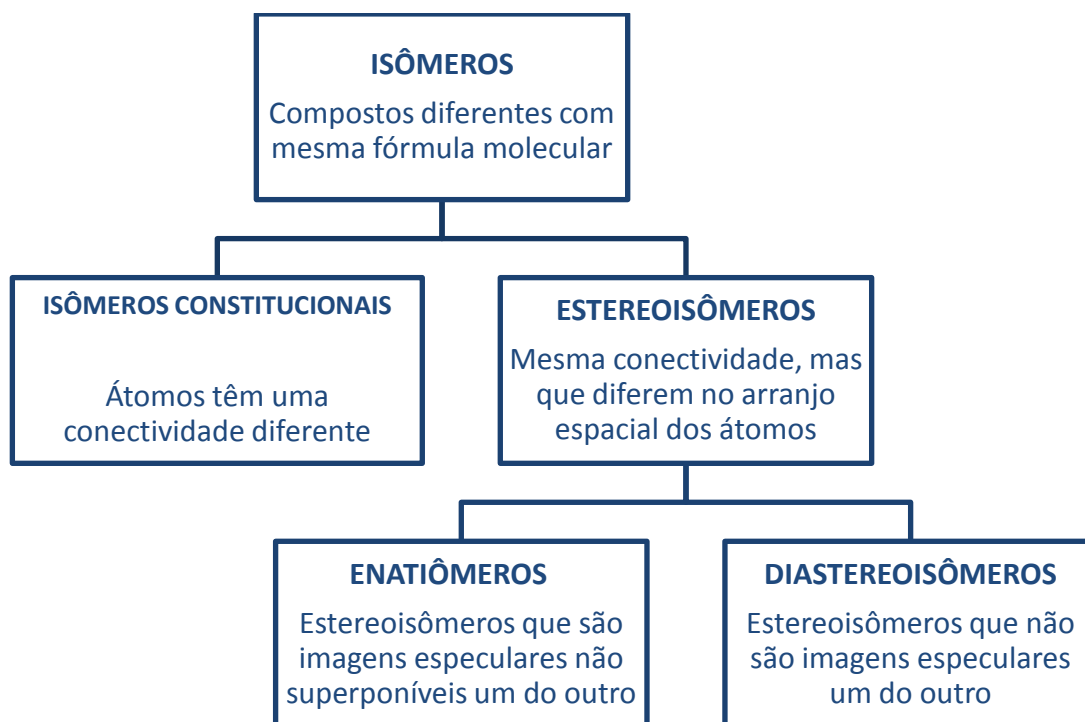


Figura 7: Subdivisão dos isômeros

Quando duas moléculas são imagens especulares uma da outra e não-sobreponíveis são denominadas enantiômeros. Quando dois estereoisômeros não são relacionados com imagens especulares, são denominadas diastereoisômeros. Os diastereoisômeros são caracterizados por diferenças nas propriedades físicas e por algumas diferenças de comportamento químico, ao contrário dos enantiômeros que possuem propriedades químicas e físicas idênticas (com exceção do comportamento frente à luz polarizada e velocidade de reação com substâncias quirais).

Em nosso estudo experimental a atenção está voltada para um caso de diastereoisomerismo - a isomeria *cis-trans* que ocorre em olefinas ou cicloalcanos⁹. Esse tipo de isomeria mostra a relação entre dois grupos substituintes ligados à átomos separados por uma ligação dupla (olefinas) ou que estão contidas em um anel. O que difere esses isômeros é a posição dos átomos (ou grupos) em relação a um plano de referência: no isômero *cis* os átomos estão no mesmo lado, no isômero *trans* eles estão em lados opostos. O plano de

⁹ Em alguns casos o termo *cis* e *trans* pode ser ambíguo, e tem sido substituído pela nomenclatura *E,Z* uma convenção para a nomenclatura de compostos orgânicos. Em nosso caso optamos pela nomenclatura *cis-trans* mais utilizada no Ensino Médio por uma das amostras ser de estudantes do Ensino Médio.

referência adequado de uma dupla ligação é o plano perpendicular ao da ligação σ . Para o anel consideramos o plano médio do anel (IUPAC, 1997).

Em qualquer um destes dois casos não é possível haver rotação entre os átomos de carbono sem romper as ligações entre eles como mostra a Figura 8. Nos casos das olefinas, qualquer tentativa de rotação entre os átomos da ligação dupla é impedida pela ligação π e no caso dos compostos cíclicos quebraria o anel.

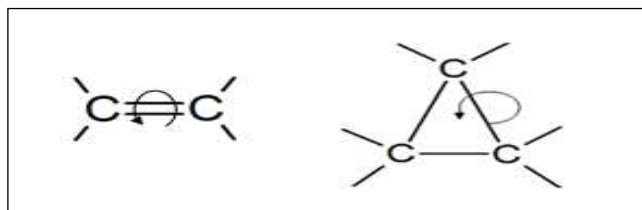


Figura 8: Moléculas com estrutura rígidas

A Figura 9 apresenta ambos os casos, à esquerda encontramos a representação de olefinas (*cis*-1,2-dicloroeteno, *trans*-1,2-dicloroeteno) e à direita cicloalcanos (*cis*-1,2-dibromociclopropano e *trans*-1,2-dibromociclopropano).

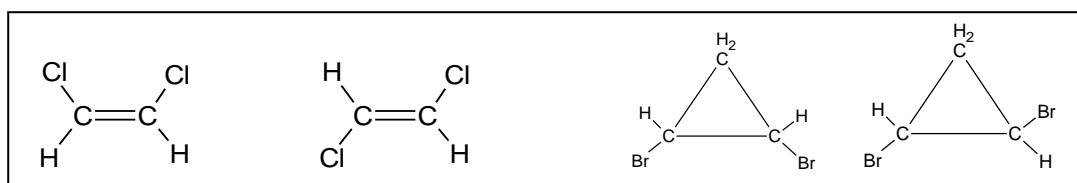


Figura 9: Representação de olefinas e cicloalcanos

Contudo a representação das moléculas de isômeros nem sempre foi assim. A constatação da Estereoisomeria fez com que os químicos desenvolvessem com o passar dos anos estruturas cada vez mais capazes de demonstrar as diferenças tridimensionais, como veremos a seguir.

1.1.7 Representações de isômeros por Werner e Smith

Em 1890, Alfred Werner, demonstrou pictoricamente que os diferentes pontos fusão encontrados para os três isômeros era atribuído às diferenças estruturais das moléculas. Todas essas representações foram desenvolvidas com base nas estruturas de Couper e aprimoradas com o passar do tempo. Dessa forma, para resolver uma situação-problema em particular (ponto de fusão da benzil-dioxima), Werner criou representações vinculadas ao conceito de isomeria. A solução desta situação-problema, portanto, envolvia o desenvolvimento de uma

nova representação, que incorporasse informação estrutural importante na representação. Utilizando elementos dessa representação externa, Werner resolveu a situação-problema.

O desenvolvimento dessa representação foi apenas possível, pois o meio de divulgação de comunicação química (revistas e livros) era capaz de expressar estas representações; dito de outro modo, a indústria de impressão de livros e revistas era capaz de imprimir estas estruturas. Note que até a descoberta dos isômeros, não se utilizava a estrutura geométrica molecular no estudo das propriedades químicas (relação estrutura-propriedade). Assim, para resolver o problema – ou o conjunto de situações-problemas que indicavam que um mesmo composto apresentava diferentes propriedades levou à criação de mais um conceito dentro do já vasto campo conceitual da Química Orgânica, o conceito de isomeria.

Esse conceito foi melhor descrito com a criação das representações de Werner em 1890. Assim, a resolução daquela situação-problema envolvia a aplicação de um conceito cuja representação evoluiu dentro da comunidade dos químicos até incorporar informação estrutural (geométrica). Essa foi segundo o que os autores conhecem, a primeira vez que isto ocorreu na Química. A Figura 10 traz as representações dos isômeros *alpha*, *beta* e *gamma* derivados do composto benzil-dioxima representados por Werner em 1890 (a), Smith em 1960 (b) e uma das possibilidades de representação atual (c).

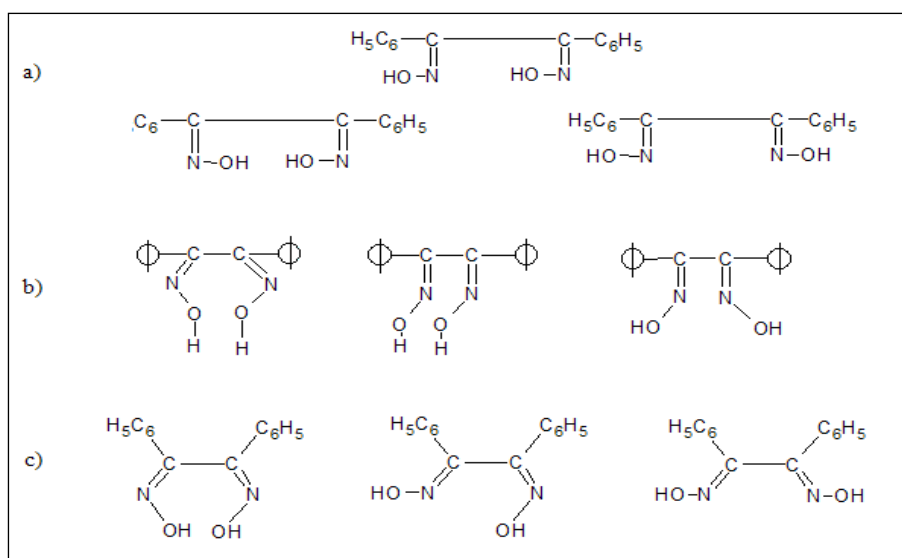


Figura 10. Evolução na representação de isômeros

Esses exemplos demonstram como as representações evoluíram, buscando explicitar os conceitos de uma forma cada vez mais concisa. A fórmula química que antes apenas ilustrava de forma qualitativa e quantitativa os elementos combinados passou a ter um papel mais importante quando começaram a ser representadas espacialmente. A representação

espacial é de grande utilidade para a Química, pois permite a percepção de detalhes sutis que sem elas não seria possível compreender. “A utilidade da representação gráfica reside no fato de que ela constitui uma espécie de impressão digital tridimensional para cada um dos diferentes compostos químicos.” (HABRAKEN, 2004, p. 90, tradução nossa).

A representação gráfica é, portanto, o fruto do desenvolvimento da química orgânica estrutural, que culmina no que se vem a chamar de “estereoquímica”. O desenvolvimento desta área, inclusive, foi o fruto do esforço de várias gerações de químicos (BALABAN, 1999).

De forma sucinta, podemos observar que a evolução histórica do foco representacional da química, digamos, no “papel” passa por representações de/dos:

- Alquimistas - atributos herméticos e práticos;
- Lavoisier - foco na simbologia dos elementos;
- Berzelius - simplificação do nome químico para o símbolo químico;
- Couper - incorpora a representação das ligações na fórmula química;
- Werner - incorpora a estrutura geométrica de forma simplificada na discussão de isômeros;
- Smith - representa os ângulos de ligação de forma mais fidedigna na representação estrutural (veja a Figura 10, por exemplo).

A evolução histórica das representações trouxe consigo a necessidade de uma mudança na forma de enxergar o universo microscópico. Estruturas 2D foram substituídas por estruturas em 3D e representadas por meio de projeções ou modelos (concretos ou computacionais). A partir desta mudança a necessidade da compreensão das estruturas fora do plano do papel passou a ter grande importância no Ensino de Química.

1.2 APRENDIZAGEM E VISUALIZAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA

Notoriamente, diversas habilidades cognitivas estão relacionadas com a aprendizagem de conceitos (e eventual resolução de problemas) em ciências e matemática, em especial à química. Recentemente, tem sido dada grande ênfase ao estudo das representações externas e de habilidades visuoespaciais e sua relação com o desenvolvimento de competências na área de educação química, devido à característica fortemente visual das representações utilizadas nesta área do conhecimento. O uso de representações requer uma série de operações cognitivas, tais como o reconhecimento de convenções gráficas e manipulação da informação

espacial para que o sujeito seja capaz de imaginar uma estrutura molecular, mentalmente seguindo regras baseadas em conceitos.

Assim é provável que aprender química envolva as habilidades visuoespaciais dos estudantes que dão suporte para executar determinadas operações cognitivas espacialmente. Em ciência, a inteligência espacial envolvendo memória visual, imaginação visual, e processamento mental visuoespacial de informações tem sido há muito tempo reconhecido. Temos como exemplos famosos Kekulé, que criou a estrutura hexagonal do benzeno, e Watson e Crick com a estrutura de DNA, ambos usando a inteligência visuoespacial (GILBERT, 2005).

1.2.1 O significado de visualização

Ao se procurar o significado do termo “visualização”, pode-se encontrar no Dicionário Houaiss da Língua Portuguesa três significados para o verbo *visualizar*:

“1.tornar visual, convertendo (algo abstrato) em imagem mental ou real.2.tornar (algo) visível mediante determinado recurso.3. formar uma imagem visual mental de (algo que não existe ou não está diante dos olhos), imaginar” (HOUAISS, VILLAR, FRANCO, 2004, p.2872).

Seu significado não é muito diferente para a Educação. Dentro de publicações científicas pertencentes à Educação Química, Jones, Jordan e Stillings (2001) utilizam o termo visualização para referir-se às atividades de imaginação visual, mas cujo significado tem sido estendido para uso na criação de imagens externas que ampliam nossa experiência visual ou imaginação. A visualização preenche a lacuna entre a visão ordinária que depende da presença de partes relevantes do mundo real, e da imaginação visual que funciona sem o uso dos sentidos, mas com capacidade mais limitada. Desta forma tornam-se claro os dois principais significados que termo *visualização* possui: “[...] ‘visualização externa’ cujos modelos são representados por percepção visual, e ‘visualização interna’ em que os resultados da percepção estão representados na mente” (GILBERT, 2005, p.2, tradução nossa).

As visualizações externas promovem uma espécie de suporte para toda a percepção enquanto as visualizações internas desempenham um papel fundamental no processo cognitivo. Segundo Tversky (2005), as visualizações são um elemento essencial para o ensino, compreensão e criação de idéias científicas. Em especial, a manipulação mental das representações espaciais é requisito para a resolução de problemas químicos. A habilidade de compreender e expressar-se por meio da estrutura espacial geométrica, a fim de representar compostos orgânicos, é particularmente importante porque, na maioria dos casos, uma

fórmula molecular bidimensional pode representar vários diferentes compostos, como no caso dos isômeros geométricos.

1.2.2 Habilidades Espaciais e Visuoespaciais.

“A habilidade ou inteligência espacial envolve pensar em imagens, bem como a capacidade de perceber, transformar e recriar diferentes aspectos do mundo visual e espacial” (SEABRA; SANTOS, 2004, p.2). As habilidades espaciais compreendem três categorias distintas (CHOI, 2001).

→ Rotação mental: é a habilidade de manipular, rotacionar, torcer ou inverter objetos tridimensionais. O indivíduo deve ser capaz de visualizar e rotacionar mentalmente os objetos em posições diferentes.

→ Percepção espacial: refere-se à habilidade de determinar relacionamentos espaciais a partir de informações visuais.

→ Visualização espacial: consiste na manipulação de problemas visuais complexos imaginando os movimentos relativos das partes internas de uma imagem.

Para Gilbert (2005) a visualização espacial é a capacidade para compreender objetos tridimensionais a partir de representação bidimensionais e vice versa. Para ele, as habilidades espaciais são um dos fatores cognitivos que podem ser relevantes para o domínio de conceitos de química. Em Química, por exemplo, identificar se uma substância, a partir de sua fórmula estrutural, apresenta isomeria requer esse tipo de raciocínio espacial. Para identificar e diferenciar determinadas as estruturas, os estudantes precisam rotacionar mentalmente a molécula, fazer as devidas relações entre elas e manipulá-las.

Do conceito de visualização espacial deriva o conceito de pensamento ou habilidade visuoespacial. Segundo Mathewson:

Pensamento visuoespacial inclui visão - o processo de usar os olhos para identificar, localizar, e pensar em objetos e orientar-nos no mundo, e imagens - a formação, inspeção, transformação e manutenção de imagens no "olho da mente", na ausência de um estímulo visual (1998, p.33, tradução nossa).

O autor comenta ainda que a visão é uma adaptação biológica adiantada e geral na evolução. Desenvolvemos um conjunto de ferramentas para coordenar, armazenar, e usar a informação sensorial, e um número de capacidades mentais para orquestrar o comportamento que inclui a habilidade espacial. As habilidades visuoespaciais requerem o desempenho de uma seqüência completa de manipulação mental e a manipulação mental de representações

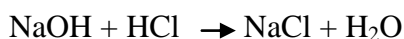
espaciais é requerida na resolução de problemas químicos (WU; SHAH, 2004). Com base nisso, todas as habilidades referentes à visualização parecem ser fundamentais para compreensão da Química dentro dos denominados sistemas representacionais.

1.2.3 Sistemas Representacionais

A Química pode ser descrita em termos de sistemas representacionais. Nessa perspectiva Gabel (1999) classifica os sistemas representacionais em três níveis: macroscópico, microscópico e simbólico. Estes três níveis são detalhados por Johnstone (1991) da seguinte forma:

- O nível macroscópico corresponde às representações mentais adquiridas a partir da experiência sensorial direta, é construído mediante a informação proveniente dos sentidos;
- O nível microscópico está correlacionado às representações abstratas, como modelos;
- O nível simbólico expressa os conceitos químicos a partir de fórmulas, equações entre outros.

Em alguns casos utilizamos um ou outro nível de representação para resolver problemas químicos, como por exemplo, quando um sujeito trabalha com análise visual de compostos, seu foco está concentrado no nível macroscópico, pois ele precisa identificar apenas características sensoriais como cor ou estado físico do mesmo. Mas quando o mesmo sujeito pensa na reação de neutralização do hidróxido de sódio com o ácido clorídrico, é a equação química (nível simbólico) a seguir que representa esta situação:



Porém estes dois níveis – macroscópico e simbólico - não são capazes de representar toda a gama de situações que a química nos traz. No caso dos estereoisômeros a representação simbólica não é suficiente para explicar o fenômeno. Somente os modelos moleculares (nível microscópico) que podem ilustrar o arranjo espacial dos átomos na molécula são capazes de trazer a tona a diferença entre os compostos, possibilitando assim a identificação dos isômeros.

Vejamos o caso dos isômeros do 2-buteno: a fórmula para ambos é C_4H_8 . A representação simbólica não é o suficiente para explicar o fenômeno, pois através dessa representação podemos dizer que o composto C_4H_8 é exatamente igual à outro composto

também com a mesma fórmula. Mas ao visualizarmos suas fórmulas estruturais e/ou 3D modelos como na Figura 11, a seguir, somos capazes de diferenciá-los. À direita podemos visualizar isômero *cis* e à esquerda o *trans*.

Os exemplos supracitados mostram que os diversos sistemas de classificação utilizados em química tanto para fazer previsões, quanto para construir explicações, são baseados na identificação de características desses diferentes níveis de representação (STAINS; TALANQUER, 2007).

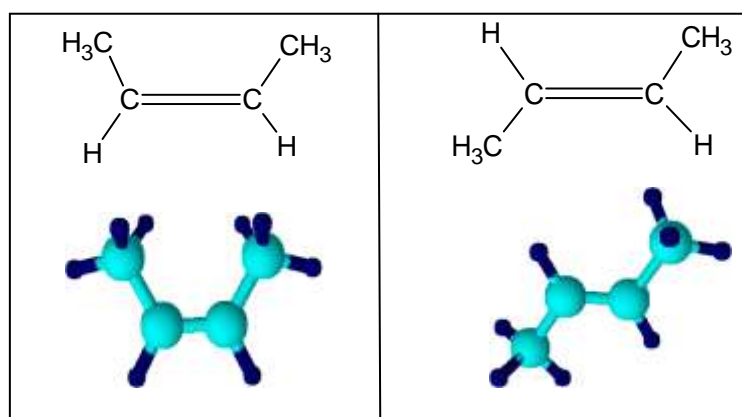


Figura 11: *cis*-2-buteno e *trans*-2-buteno

1.2.4 O pensamento visual e o Ensino de Química

Freqüentemente, estudantes apresentam dificuldades na compreensão dos fenômenos físicos e químicos nos níveis microscópico e simbólico conforme afirmam Andreu e Recena (2007). Isso porque em alguns casos é necessária a compreensão de mais de um nível para resolver o problema em questão. Essa dificuldade também pode ser atribuída ao nível de abstração envolvido na resolução do problema e ao fato dos pensamentos dos alunos serem essencialmente baseados em informações sensoriais (WU; KRAJCIK; SOLOWAY, 2001).

Dessa forma podemos considerar que uma parcela das dificuldades de aprendizagem da química está relacionada ao fato das representações químicas serem tipicamente abstratas e da necessidade da compreensão de uma gama de diferentes representações. Torna-se necessário, além da compreensão destas representações abstratas, transitar entre os níveis macroscópico, microscópico e simbólico, para compreender os conceitos químicos por eles representados. Considera-se que se o aluno não souber como explicar a química utilizando-se de ferramentas ideacionais no nível microscópico, ele efetivamente não aprendeu química (NAKHLEH, 1992).

Comumente concepções errôneas de estudantes no nível simbólico e microscópico frequentemente envolvem o raciocínio visuoespacial. Uma capacidade limitada de raciocínio visuoespacial pode restringir a formação de imagens mentais tridimensionais a partir de representações bidimensionais utilizadas no quadro negro, por exemplo (WU;SHAH, 2004). Ainda no mesmo artigo, os autores lembram o trabalho de Bodner e Guay que, resumindo uma revisão na literatura sobre o tema, sugerem que a correlação entre raciocínio visuoespacial e o desempenho de estudantes de química foi significativo para problemas que exigiam a habilidade de manipular representações 2D de uma molécula. Entretanto, a correlação entre habilidade espacial e o escore dos estudantes não é significativo para problemas que podem ser respondidos apenas se usando memorização (aprendizagem não-significativa) ou pela aplicação de algoritmos simples.

Prosseguindo a análise da relação raciocínio visuoespacial e aprendizagem, nos deparamos com proposição de Gabel (1993) que atribui as dificuldades que os novatos têm em desenvolver a compreensão conceitual em química a três causas:

- O ensino da química pode simplesmente forçar a “resolução de problemas a nível simbólico” em detrimento dos fenômenos em nível microscópico.
- “Se o ensino da química ocorre nos níveis microscópicos, macroscópico e simbólicos, (de forma compartimentada), insuficientes conexões são feitas entre os três níveis e informação permanece compartimentada na memória de longo prazo dos alunos”
- Os estudantes podem não compreender, mesmo com uma instrução que enfatiza a relação transversal em todos os três níveis se "fenômenos não foram considerados relacionados ao cotidiano do aluno".

Para sanar estas dificuldades torna-se necessário desenvolver aspectos relativos à visualização que contemplem todos os níveis, possibilitando não só a compreensão destes níveis separadamente, mas a capacidade de transitar entre eles, para assim compreender os conceitos químicos por eles representados de forma integrada.

1.2.5 O ensino de isomeria geométrica

Considerando os diferentes níveis de classificação dos sistemas representacionais podemos afirmar que o tópico isomeria é ensinado e compreendido predominantemente

dentro do nível de representação microscópico (GABEL, 1984). A transição do nível simbólico (fórmulas químicas) para o microscópico (modelos) permite a compreensão do conceito na medida em que facilita a visualização das diferenças entre os isômeros. Para auxiliar a representação do nível microscópico, além dos modelos moleculares, as projeções citadas no item 1.1.5 são utilizadas.

Para Romero (1998) as projeções são muito úteis no ensino, pois enfocam as moléculas em três dimensões. Porém, no início do aprendizado de estereoquímica, os estudantes ainda não estão familiarizados com as projeções e por esse motivo o uso de modelos moleculares desempenha um papel importante para a compreensão da realidade molecular, pois ressaltam, entre outros detalhes, as distâncias inter-atômicas e posição dos átomos ou grupo de átomos. Como os modelos moleculares fornecem concretamente uma imagem aproximada da molécula, são de grande utilidade para a resolução de problemas estereoquímicos. Mas Romero conclui que “[...] na prática, freqüentemente há a necessidade de se dispensarem os modelos moleculares trocando-os por representações no papel, feitas no plano, que simulam o espaço e que se chamam *projeções*” (ROMERO, p.3).

Esse fato pode ser observado em alguns livros didáticos que selecionamos¹⁰. No Ensino Superior as representações concentram-se fórmulas estruturais (Figura 12) e nos livros utilizados no Ensino Médio aparecem representação do tipo bolas e palitos tridimensionais como podemos observar na Figura 13.

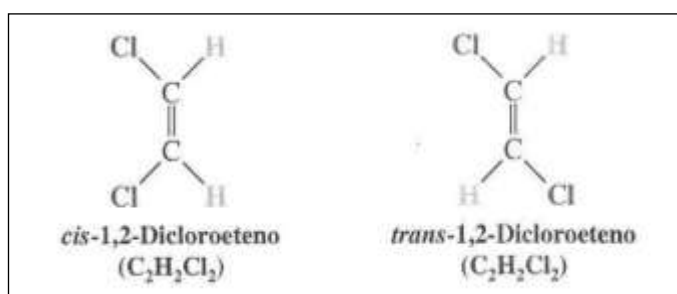


Figura 12: Representação de isômeros
Fonte: Solomons, 1996, p. 183

¹⁰ Para Ensino Superior optamos pelo autor Solomons por ser parte da bibliografia recomendada para estudantes dos cursos de graduação em Química da Ulbra. Para o Ensino Médio optamos por Feltre um dos aprovados no PNLEM 2008.

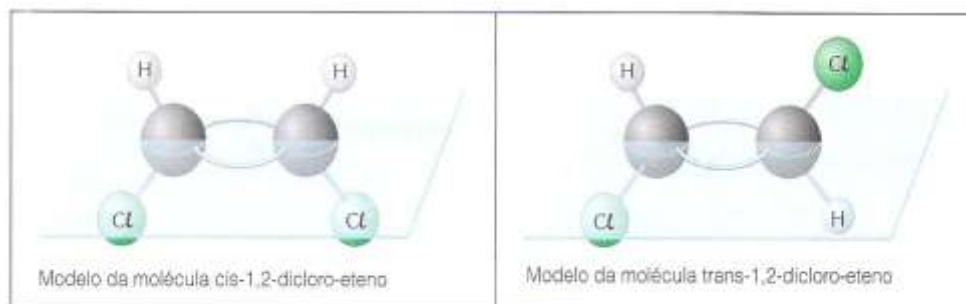


Figura 13: Representação de isômeros
Fonte: Feltre, 2004, p. 183

Por meio desta análise superficial¹¹, podemos observar que já se esboça uma preocupação nos autores dos livros de Ensino Médio com a inserção de modelos moleculares para representar os isômeros. Vale ressaltar que, no Ensino Médio, a divisão da isomeria apresentada aos estudantes não é a mesma contida na Figura 7 apresentada anteriormente. Considera-se essa divisão de um modo bem mais amplo. Segundo Feltre (2004) a isomeria pode ser dividida em:

- Isomeria plana, que depende da localização dos átomos na molécula e que pode ser explicada por **fórmulas estruturais planas**;
- Isomeria espacial ou estereoisomeria, que depende da orientação dos átomos no espaço e só pode ser explicada por **fórmulas estruturais espaciais**.

Os isômeros planos apresentam, portanto, diferentes fórmulas estruturais planas, dessa forma a diferença entre compostos é muito clara, e não exige nenhum outro tipo de representação para diferenciá-las, ou até mesmo de construção ou manipulação mental por parte dos estudante. A diferença é percebida visualmente. Ainda mais em se tratando de isômeros de função que além de ter uma fórmula estrutural diferente, pertencem a uma função química diferente, tornando ainda mais explícita a diferença entre ambos. Ao contrário da estereoisomeria em que os compostos têm estruturas espaciais diferentes.

A utilização apenas das fórmulas estruturais, em detrimento do uso de modelos tridimensionais, pode dificultar a compreensão de estudantes que não estão familiarizados com a visão tridimensional de átomos e moléculas. Estes estudantes poderiam se beneficiar do uso de modelos moleculares tridimensionais até que suas habilidades visuoespaciais estivessem desenvolvidas o suficiente para então dispensá-los e substituí-los pelas projeções ou fórmulas estruturais. Seu uso, portanto, em livros de Ensino Médio, deve ser incentivado.

¹¹ Esse fato foi observado em outros livros, mas para ilustração selecionamos apenas estes

Em outras palavras, o problema do ensino de química, segundo Habraken (1996) é que apesar da Química estar evoluindo para uma ciência muito dependente da inteligência visuoespacial, fazendo uso intensivo de diferentes representações, utiliza-se a mesma abordagem de 40-50 anos atrás. Uma abordagem que poderia ser benéfica para a compreensão de conceitos químicos seria a utilização de modelos concretos, ilustrações, animações e simulações, como por exemplo, a modelagem química, uma prática de ensino comum que envolve os alunos a desenvolverem os seus próprios modelos mentais¹² de compostos químicos (TASKER; DALTON, 2006; CHITTLEBOROUGH; TREAGUST, 2007).

1.2.6 O papel da representação 3D no ensino

Analisando historicamente, o desenvolvimento de modelos tridimensionais, percebemos que esse tipo de representação só surge após a descoberta de Pasteur do desvio do plano da luz polarizada provocado pelos ácidos tartárico, , no século XIX. Aliada à forma tetraédrica proposta , também no século XIX, para o átomo de carbono por Van't Hoff e Le Bell (BALABAN, 1999). A partir daí tornou-se necessário imaginar e representar as moléculas em três dimensões. Essa é uma tarefa difícil, que exigiu a elaboração de modelos moleculares, construídos, não apenas com bolas e palitos, mas também com bolas e molas.

Hoje, modelos virtuais somam-se aos demais, constituindo uma nova ferramenta no estudo da química. A analogia entre os modelos e as estruturas moleculares facilita o estudo da constituição, da configuração (estrutura tridimensional) e das diferentes conformações que uma molécula pode assumir. É importante distinguir esses três termos: a constituição é meramente a conectividade dos átomos em uma molécula, sem se preocupar com diferentes arranjos de ordem espacial. A configuração define moléculas que são estereoisômeros, ou seja, que as barreiras rotacionais são significativas a ponto de serem não intercambiáveis normalmente devido ao fato da ligação ser dupla ou um anel cíclico, a barreira rotacional emerge já dos átomos conectados. Já as diferentes conformações de uma molécula são típicas de rotações em torno de ligações simples, mas que uma barreira rotacional emerge devido a repulsões entre grupos químicos substituintes que se aproximam/afastam durante esta rotação. De uma maneira mais simples, se retirarmos os substituintes ligados a átomos de diferentes conformações, a barreira desaparece por ser uma ligação simples; e esta barreira não desaparece se estivermos falando de diferentes configurações (IUPAC,1997).

12 Aqui estamos utilizando o termo "modelo mental" em uma asserção genérica, sem vínculo com formalizações a respeito de "modelos mentais" tais como utilizados por Johnson Laird e outros autores.

A representação da estrutura tridimensional da molécula é decerto fundamental – e em alguns casos é imprescindível. Cada uma dessas representações gráficas implica em uma perspectiva de observação do modelo e contém uma série de requisitos necessários para que o sujeito entenda a estrutura em questão. O modelo molecular propiciou uma maneira de se estudar e entender melhor a estrutura molecular invisível a nossos olhos, uma vez que proporcionou uma forma de representá-las. Com a internalização dessa forma de representação, o químico não precisa mais ter o modelo concreto em suas mãos, ele consegue imaginá-lo a partir da fórmula estrutural desenhada.

Destacamos a importante discussão que pode ser lida no trabalho de Stieff, Bateman Jr. e Uttal (2005): Dizer que a visualização é importante para o aprendizado das ciências químicas é quase que subestimar o papel fundamental que estes processos cognitivos têm em todos os níveis de estudo destes domínios. Por exemplo, a compreensão da natureza e importância das relações espaciais é tão somente a componente mais básica da cognição espacial nas ciências químicas.

À medida que a compreensão do estudante avança, compreender os detalhes particulares das relações espaciais em diagramas relevantes, modelos e imagens fica cada vez mais importante. Não apenas, precisam os estudantes, estar cientes que estas relações existentes, mas precisam também apreender as implicações que a estrutura molecular pode apresentar nas interações moleculares e na reatividade química.

Enquanto a tarefa pode ser simples para moléculas pequenas com cinco ou menos átomos, fica consideravelmente mais difícil quando estudantes precisam lidar com moléculas biológicas que podem conter milhares de átomos, cada um dos quais possui uma relação única com os outros. Por exemplo, quando consideramos uma molécula enzimática, um estudante pode ser solicitado a compreender como a posição de um átomo de oxigênio em particular afeta a relação entre milhares de outros átomos na enzima e como aquela forma controla a atividade química da enzima. Para compreender isso, o estudante precisa considerar – geralmente simultaneamente – propriedades como ângulo de ligação, tamanho de ligação, forma do orbital, conectividade e quiralidade, só para nomear algumas características.

Particularmente na sala de aula da química, a instrução tradicional pode inibir ou complicar a compreensão necessária porque confia em diagramas bidimensionais para representar estruturas moleculares tridimensionais. Mesmo que professores estejam adeptos à seleção e uso de diferentes representações bidimensionais para descrever estruturas moleculares tridimensionais, os estudantes raramente têm sucesso na interpretação ou manipulação das várias representações disponíveis (KEIG; RUBBA, 1993; KOZMA; CHIN;

RUSSEL; MARX, 2000). Por exemplo, estudantes geralmente dizem ter grande dificuldade na compreensão da projeção de Fischer que demonstra a mesma molécula que pode ser representada em um modelo de bolas e palitos. Apesar dos modelos de bolas e palitos enfatizarem as relações tridimensionais entre átomos na molécula, a projeção de Fisher destaca a conectividade entre átomos; o estudante precisa compreender os formalismos da representação (de Fischer) para perceber as relações tridimensionais que estão embebidas no diagrama bidimensional.

Mesmo que estas representações estejam geralmente restritas à sala de aulas de química orgânica, a dificuldade em perceber e compreender relações tridimensionais é universal entre estudantes avançados de Nível Superior e estudantes iniciantes de Ensino Médio.

1.3 USO DE SOFTWARE NO ENSINO DE QUÍMICA

Segundo Jones, Jordan e Stillings “A química é um campo extraordinariamente fértil para a aprendizagem visual. O sistema visual é, portanto, um poderoso recurso educacional (2001, p.6, tradução nossa). Por esse motivo ferramentas para estimular o uso de representações estão se tornando amplamente disponíveis, principalmente por meio do uso de computadores, nessa perspectiva a habilidade de manipular mentalmente modelos ganha especial destaque nos domínios da Química. Na educação química, a pronta disponibilidade de computadores poderosos com, especialmente modelos dinâmicos e simulações, podem ser visualizados e manipulados em um formato virtuais é um fato novo e muito bem recebido conforme Gilbert (2005). Este autor, Gilbert, comenta que o desenvolvimento rápido destas ferramentas tecnológicas ocorreu nas mãos de quatro grupos de pessoas muito diferentes:

- a) especialistas do software de computador, que têm um comando técnico do que poderia ser feito por meio de representação;
- b) cientistas, que se preocupam que a educação científica prepare melhor os alunos a serem cientistas;
- c) educadores, que têm um grande interesse em o que deve ser feito na preparação;
- d) cientistas cognitivos, que estão interessados em encontrar as conseqüências para a aprendizagem das ações tomada.

A soma das preocupações destes profissionais tem contribuído para o avanço do uso de tecnologias no ensino. No caso da Química a vantagem do uso do computador para

visualização de representações tridimensionais, consiste no fato do esforço cognitivo que é menor em relação à visualização de estruturas representadas no papel. Ao visualizar representações no papel o estudante precisa construir mentalmente algo que não viu, e como não temos acesso a essas representações internas do estudante, não podemos ter certeza de sua acurácia, não sabemos se a partir da projeção no papel o estudante construiu mentalmente a estrutura 3D que representa, de fato, o problema. Em contrapartida, quando utilizamos as representações computacionais 3D ou modelos moleculares concretos, o estudante tem acesso a uma das possíveis representações simbólicas da estrutura molecular, seu único trabalho é internalizar essa estrutura. Como não há necessidade de realizar todo o processamento mental para a formação de uma imagem que o estudante desconhece, ele pode concentrar-se na compreensão do conceito associado à representação visualizada.

Mas o uso de computadores no Ensino de Química, não é uma abordagem recente. Na verdade eles vêm sendo utilizados desde a década de 60. Raupp, Serrano e Martins (2008) esclarecem que em 1972, o uso de computadores na educação química já era foco de pesquisas, e os comentários gerais acerca desta nova modalidade já eram favoráveis. Em 1998, Walter Kohn e John A. Pople receberam o Prêmio Nobel de Química por terem um papel importante no desenvolvimento de métodos computacionais em química quântica.

Aconteceu que, “a partir de então, o progresso no desenvolvimento de softwares e hardwares aliado a uma redução constante de custo dos materiais informáticos, torna a química computacional uma das áreas mais promissoras deste novo século” (RAUPP; SERRANO; MARTINS, 2008, p.14). Os modelos computacionais serviram para, de forma prática, dar acesso às estruturas tridimensionais dos compostos químicos. Assim, como lembra Balaban (1999), os químicos de hoje são treinados para compreender isomerismo em termos de modelos visuais. Estes modelos visuais podem ser desenhados pelo usuário em um computador e serem então utilizados em mecanismos de busca em bancos de dados com milhares de estruturas (BALABAN, 1976; TRINAJSTIC, 1992 apud BALABAN, 1999).

A utilidade das representações construídas continua a ser aumentada com o surgimento da capacidade de processamento externo computacional. Este processamento externo é capaz de realizar bilhões de operações aritméticas por segundo e a química computacional faz uso extensivo desta capacidade de processamento, fruto de um desenvolvimento histórico notável, discutido em detalhes por Park (2003). Muitos químicos acreditam que o verdadeiro poder dos computadores e visualização em química é a sua utilização para ajudar os estudantes a entender a dinâmica envolvida na química. Visualizações neste contexto são importantes na medida em que o efeito da interação sutil

entre as moléculas, que é complexa e difícil de descrever, simplesmente pode ser entendido em um piscar de olhos (JONES; JORDAN; STILLINGS, 2001).

1.3.1 Uso de computadores no desenvolvimento das habilidades visuoespaciais

Tasker e Dalton (2006) explicam que a utilização de modelos concretos, ilustrações, animações e simulações demonstraram ser benéficas para a compreensão de conceitos químicos. Gilbert (2005), no seu extensivo trabalho de revisão sobre o tópico de raciocínio visuoespacial, chega a afirmar que, para a compreensão das estruturas 3D, o uso de modelos desempenha um papel fundamental. Os modelos utilizados podem variar desde construção de moléculas com materiais simples (palitos e bolas de isopor) até modelos construídos computacionalmente, o importante é tornar os compostos mais acessíveis para a compreensão dos estudantes.

Mathewson (1998) considera que um ambiente visualmente rico irá ajudar a aquisição das habilidades visuoespaciais assim como um rico ambiente verbal aumenta competências lingüísticas. Esse ambiente pode ser a tela do computador que vem substituindo as representações feitas com papel e lápis. Para Habraken a evolução dos primeiros desenhos primitivos para os desenhos gerados por computador é “uma clara demonstração da evolução simultânea de uma ciência e sua linguagem científica” (1996, p.91, tradução nossa) e essa evolução deve fazer parte do ensino, já que “[...] estudantes podem se beneficiar de representações computacionais tridimensionais de eventos químicos (FLEMING; HART; SAVAGE 2000, p.790, tradução nossa)”

O uso de computadores pode auxiliar a compreensão de tópicos que se referem à visualização como é o caso da Estereoquímica:

Computadores são uma plataforma particularmente atrativa para o ensino de estereoquímica por conta da possibilidade de gerar experiências interativas que modelam o mundo microscópico da molécula. É bem documentado que a compreensão e o desempenho em química, e em particular, estereoquímica, são fortemente relacionadas com a visualização 3D (PAVLINIC ET AL., 2007, p.1, tradução nossa).

Como Pavlinic, outros autores são unânimes em afirmar que o desenvolvimento das habilidades relativas à visualização ocorre mediante a utilização de modelos. Segundo Gabel (1998) ferramentas como diagramas ou imagens podem fornecer ao aluno uma forma de visualizar o conceito e, portanto, desenvolver um modelo mental para o conceito. Quando os estudantes usam uma ferramenta de construção, eles constroem modelos e podem transformar a estrutura 2D no papel em um modelo 3D na tela do computador.

Estas operações de modelos 3D são muito similares às tarefas que testes de habilidade solicitam que estudantes resolvam. Os estudantes podem internalizar estas experiências de visualização¹³ que eventualmente os levam a manipular mentalmente estruturas e melhorar suas habilidades visuoespaciais (WU;SHAH, 2004, p.479, tradução nossa).

De forma similar aos modelos concretos, as ferramentas de construção de modelos moleculares podem auxiliar nas dificuldades que os estudantes possuem em visualizar estruturas moleculares 3D. Com mais capacidade tecnológica, como representações múltiplas linkadas, ferramentas de construção baseadas em computadores externalizam as relações visuais ou conceituais entre representações químicas e auxiliam os estudantes a fazer translações entre vários tipos de representações. Wu e Shah (2004) afirmam que a experiência com a manipulação de modelos, bem como uso de ferramentas de construção de modelos moleculares parecem ser cruciais no desenvolvimento das habilidades visuoespaciais e esse desenvolvimento ocorrendo, conseqüentemente auxilia os alunos na resolução de problemas químicos e representação de conceitos no nível microscópico e simbólico.

13 Deve-se entender o sentido de "internalizar experiências de visualização", dentro do referencial teórico utilizado neste trabalho como a internalização de elementos de conceito(s) como representações, invariantes e situações. Isto será tratado de forma mais adequada na análise de resultados.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A fundamentação teórica da pesquisa tem sua base no aporte cognitivista da Teoria dos Campos Conceituais do francês Gerard Vergnaud. A escolha foi realizada devido ao importante papel que a representação simbólica desempenha no processo de aprendizagem de conceitos segundo esta teoria, o que vem de encontro com nossos objetivos de pesquisa.

2.1 A TEORIA DOS CAMPOS CONCEITUAS DE VERGNAUD

A Teoria dos Campos Conceituais (TCC) desenvolvida pelo psicólogo francês e discípulo de Piaget, Gerard Vergnaud “é uma teoria cognitivista, que busca propiciar uma estrutura coerente e alguns princípios básicos ao estudo do desenvolvimento e da aprendizagem de competências complexas, sobretudo as que dependem da ciência e da técnica” (VERGNAUD, 1993, p.1).

Como toda a teoria cognitivista, a ênfase está nos processos cognitivos; ocupa-se de como o indivíduo constrói sua estrutura cognitiva. A TCC busca entender melhor quais são os problemas de desenvolvimento específicos de um determinado campo de conhecimento.

Vergnaud considera que o âmago do desenvolvimento cognitivo é a conceitualização¹⁴ (VERGNAUD, 1996a). Por isso é uma teoria psicológica de conceitos, na qual a conceitualização é considerada a pedra angular da cognição (VERGNAUD, 1998). Assim, nossa definição de aprendizagem está firmada neste aporte teórico.

A formação e evolução de conceitos em Vergnaud, contudo, é o objeto de discussão nosso agora.

A tese subjacente à Teoria do Campos Conceituais é, todavia a de que um bom desempenho didático baseia-se necessariamente no conhecimento da dificuldade relativa das tarefas cognitivas, dos obstáculos habitualmente enfrentados, do repertório de procedimentos disponíveis e das representações possíveis (1993,p.17).

Sendo assim, parece-nos que a dificuldade do tópico isomeria geométrica está relacionada à tarefa cognitiva de transformar a fórmula química em sua estrutura molecular, visualizar a configuração 3D para, finalmente, comparar as estruturas. Os obstáculos enfrentados na aquisição de conceitos relativos à isomeria geométrica são as dificuldades relativas à visualização e a operação mental de modelos moleculares.

14 Tomamos, aqui, o significado de conceitualização como o processo de formação ou construção de conceitos.

Uma das características marcantes neste aporte teórico é que não se vêem conceitos como entidades isoladas, mas entrelaçadas entre si. Conforme discutiremos adiante, “uma situação não se analisa apenas com um conceito”; ou seja, Vergnaud tende a focar sua análise em um conjunto de conceitos que forma o que ele chama de Campo Conceitual.

A seguir trataremos dos principais conceitos desta Teoria: Campo Conceitual; Esquema; Conceitualização; Conceito e seu triplete situação – representação – invariantes.

Campo Conceitual

Para Vergnaud o conhecimento está organizado em um conjunto de situações e conceitos, denominado Campo Conceitual. Na qual a palavra situação não tem o sentido de situação didática, mas de tarefa cognitiva (1993).

Vergnaud considera o campo conceitual como uma unidade de estudo para dar sentido às dificuldades observadas na conceitualização do real e, como foi dito antes, a teoria dos campos conceituais supõe que a conceitualização é a essência do desenvolvimento cognitivo (MOREIRA, 2002, p.10).

Os campos conceituais são caracterizados pela presença de conceitos, procedimentos, linguagens e representações simbólicas e podem ser definidos como um conjunto informal e heterogêneo de problemas, situações, conceitos, relações, estruturas, conteúdos e operações de pensamento, conectados uns aos outros e, provavelmente, entrelaçados durante o processo de aquisição (VERGNAUD, 1982, p. 40).

Vergnaud (1983 a, p. 393, 2007, p.288) apresenta três justificativas para que se utilize o conceito de campo conceitual como forma de análise para a questão da obtenção de conhecimento:

- a) Um conceito não se forma a partir de um só tipo de situação;
- b) Uma situação não se analisa com um só conceito;
- c) A construção e apropriação de todas as propriedades de um conceito ou todos os aspectos de uma situação é um processo de muito fôlego que se estende ao longo dos anos, às vezes uma dezenas de anos, com analogias e mal entendidos entre situações, entre concepções, entre procedimentos, entre significantes.

Essa é a razão pela qual se estudam os Campos Conceituais e não situações isoladas ou conceitos isolados. Segundo Moreira (2002, p.10), Vergnaud considera útil falar em distintos campos conceituais se eles puderem ser consistentemente descritos. Pode-se falar do campo conceitual das estruturas aditivas e multiplicativas na Matemática, estes originalmente

definidos e delimitados pelo próprio autor. Na Física pode-se falar do campo conceitual da Mecânica, ou do Eletromagnetismo. Na Química, do campo conceitual da Química Inorgânica ou da Físico-química e no nosso caso específico, no subcampo conceitual da isomeria geométrica que pertencente ao campo conceitual da Estereoquímica.

Os campos conceituais não são campos independentes, totalmente distintos. Determinados campos podem ser imprescindíveis para a compreensão de outros. Vergnaud considera que é praticamente impossível estudar um conceito de maneira isolada, compartimentada. Estes campos conceituais menores são unidades substancialmente proveitosas para possibilitar a evolução dos conhecimentos (VERGNAUD, 1983a). O domínio progressivo desse conjunto demanda uma variedade de conceitos, de esquemas e de representações simbólicas em estreita conexão (VERGNAUD, 1996a).

Pode parecer que a definição de campo conceitual é demasiadamente “fluida” e imprecisa. Nossa interpretação a partir do que lemos de Vergnaud é que a delimitação de um particular campo conceitual se dá em torno de um conjunto de conceitos centrais (além de situações, representações, etc.) que são imprescindíveis para a compreensão individual de cada um destes conceitos em particular. Vale a máxima exposta acima: é necessário mais que apenas um determinado conceito para a própria compreensão deste conceito. Como um exemplo, no caso da isomeria, antes de compreender como a mesma fórmula molecular dá origem a diferentes compostos é preciso compreender conceitos como átomo, molécula, ligações química (simples, duplas); e representações como as de fórmulas químicas, fórmulas estrutural plana e espacial, estruturas bi e tridimensionais, para então compreender o conceito de isomeria geométrica.

Assim o campo conceitual que engloba o conceito de isomeria geométrica é delimitado pelos conceitos, situações, representações que fazem a área da Estereoquímica. Para que esse processo ocorra os estudantes devem utilizar seus esquemas de assimilação, ponto do referencial de Vergnaud que é herdado de Piaget.

Esquema

A definição de esquema para Vergnaud é semelhante ao encontrado na obra de Piaget: organização invariante do comportamento para uma determinada classe de situações (1990, 1993). A diferença entre os dois teóricos é que para Piaget, o foco reside na interação sujeito-objeto e para Vergnaud, os esquemas referem-se a situações (1996c), e seu foco é na interação esquema-situação. Como o autor declara, “Sem esquemas e sem situações não se pode compreender o desenvolvimento do pensamento” (VERGNAUD, 2007, p.288, tradução

nossa). Assim, o desenvolvimento de esquemas gerais organizadores do pensamento abstrato, foco piagetiano do desenvolvimento cognitivo passa a ser, em Vergnaud, no desenvolvimento de esquemas específicos capazes de lidar com situações específicas a cada campo particular de conhecimento.

Tomando nosso campo conceitual em particular de Estereoquímica, o foco está nas situações que abrangem o conceito de isomeria geométrica, como situações nas quais problemas a serem resolvidos envolvem moléculas cuja fórmula química é idêntica.

Como os esquemas estão associados às situações, quanto maior o repertório de esquemas utilizado para resolver uma determinada situação, maior o desenvolvimento cognitivo do indivíduo.

Decorre daí que o desenvolvimento cognitivo consiste sobretudo, e principalmente, no desenvolvimento de um vasto repertório de esquemas. Este repertório afeta esferas muito distintas da atividade humana e quando analisamos, por exemplo, os conteúdos da competência profissional de um indivíduo freqüentemente observamos que junto a competências técnicas e científicas, propriamente ditas, estão, com peso considerável, competências sociais e afetivas.(MOREIRA, 2002, p.12).

Para especificar o conceito de esquema Vergnaud utiliza os chamados de ingredientes dos esquemas (1990, p. 136, 142; 1994, p. 46; 1996a, p. 113-114; 1996b, p. 11; 1996c, p. 201-202-206; 1998, p. 173) que são:

- **metas e antecipações** (um esquema se dirige sempre a uma classe de situações nas quais o sujeito pode descobrir uma possível finalidade de sua atividade e, eventualmente, submetas; pode também esperar certos efeitos ou certos eventos);
- **regras de ação do tipo "se ... então"** que constituem a parte verdadeiramente geradora do esquema, aquela que permite a geração e a continuidade da seqüência de ações do sujeito; são regras de busca de informação e controle dos resultados da ação;
- **invariantes operatórios** (teoremas-em-ação e conceitos-em-ação) que dirigem o reconhecimento, por parte do indivíduo, dos elementos pertinentes à situação; são os conhecimentos contidos nos esquemas; são eles que constituem a base, implícita ou explícita, que permite obter a informação pertinente e dela inferir a meta a alcançar e as regras de ação adequadas;
- **possibilidades de inferência** (ou raciocínios) que permitem "calcular", "aqui e agora", as regras e antecipações a partir das informações e invariantes operatórios de que dispõe o sujeito, ou seja, toda a atividade implicada nos três outros ingredientes requer cálculos "aqui e imediatamente" em situação.

Conceitualização

Para Vergnaud (1990,1998) o problema central da cognição é a conceitualização e considera que “A conceitualização pode ser definida como a identificação de objetos do mundo, suas propriedades, relações e transformações; essa identificação pode ser direta ou semi-direta, ou resultantes de uma construção” (2007, p.299, tradução nossa)

Existe uma relação entre a conceitualização e a resolução de problemas como comenta Vergnaud: “Um problema não é um problema para um indivíduo a menos que ele ou ela tenha conceitos que o/a tornem capaz de considerá-lo como um problema para si mesmo” (1994, p. 42, tradução nossa).

Toda vez que um sujeito resolve um problema, significa que ele desenvolveu um eficiente esquema para tratá-lo, desaparecendo assim o caráter problemático referente à esta situação. Deste modo da próxima vez que o sujeito estiver diante de um novo problema, será capaz de reconhecer ou considerar como um novo problema. Por isso a conceitualização é considerado um processo cíclico e dialético (GASTALDO, 2007).

Para Vergnaud, a conceitualização é sempre referente ao que o mesmo chama de “real”, ou seja, não em categorias lógicas gerais piagetianas, mas em cima de situações específicas e apenas referentes a elas e não a outras. O processo de conceitualização do real permite localizar e estudar continuidades e rupturas entre conhecimentos do ponto de vista de seu conteúdo conceitual (1990). Segundo Vergnaud, conceitualização é a identificação dos objetos do mundo e suas propriedades e relações diretamente acessíveis.

O domínio do conceito ou a conceitualização ocorre em longo prazo, assim, o conhecimento é construído ao longo do tempo, durante toda a vida. O domínio de determinado campo conceitual desenvolve-se durante um longo período de tempo por meio da experiência, maturação e aprendizagem que resulta em uma progressiva compreensão deste campo.

O conhecimento dentro do paradigma da TCC é considerado como adaptação. O desenvolvimento do conhecimento é sistemático e oportunista. Sistemático por que ocorre ao longo de um período de tempo, não determinado, como os estágios de desenvolvimento mental de Piaget e oportunista porque os recursos utilizados para devem ser adaptáveis a nova situação. Um conceito não se aprende sozinho, mas apoiado a outros conceitos.

Pode-se perceber, a partir do que foi discutido, comparando-se Piaget e Vergnaud no que se refere à conceitualização e à noção de esquema, que Vergnaud, ao contrário de Piaget, não procura construir uma teoria geral para o desenvolvimento. Ao contrário, procura

relacionar o desenvolvimento do sujeito com as tarefas que este é levado a resolver. Nota-se que, para ele, a cognição possui um componente fortemente ligado às situações. O autor afirma que o processo de desenvolvimento cognitivo, por ser fortemente dependente das situações a serem enfrentadas pelo sujeito, tem como cerne a construção de conceitos. A conceitualização é um processo longo, que requer uma diversificação das situações. Vergnaud diz que “na verdade, os conceitos se desenvolvem por meio da resolução de problemas, e esse desenvolvimento é lento” (1983b, p. 172, tradução nossa).

Quanto à aquisição do conhecimento científico pelo ser humano, Vergnaud (1990) afirma que a aquisição se dá mediante um processo de construção, no qual a conceitualização do real tem um papel fundamental. Segundo este autor, é pela conceitualização que o conhecimento se torna operatório, generalizável, características genuínas ao conhecimento científico, que o distancia de um conhecimento de senso comum, sempre circunscrito a um referencial específico.

Vergnaud ao descrever o processo de conceitualização (do real), define três componentes que, de forma interdependente, constituem o conceito de ‘conceito’ e descrevem esse processo.

Conceito de “Conceito”

Vergnaud define conceito de uma forma especialmente peculiar, que reflete a importância das representações, situações didáticas e das operações (com estas representações) que são invariantes dentro da ação psicológica do sujeito ao se deparar com uma classe de situações semelhantes.

A Teoria dos Campos Conceituais considera que um conceito é uma tríade que envolve um conjunto de situações que dão sentido ao conceito; um conjunto de invariantes operatórios associados ao conceito e um conjunto de significantes que podem representar os conceitos e as situações que permitem aprendê-los” (VERGNAUD, 1983A, P. 393, tradução nossa).

Essa tríade pode ser representada da seguinte forma: C= SIR. O fato de considerar o conceito como uma tríade de diferentes conjuntos tem a implicação de que deve-se considerar sempre esta tríade simultaneamente (MOREIRA, 2002).

Mas o que são, especificamente, cada um destes elementos de um conceito?

Situação

A situação ou referente é o “conjunto das situações que dão sentido ao conceito” (VERGNAUD, 1993,p.8). E o sentido dos conceitos está na situação em si. “Um conceito se torna significativo para um sujeito através de uma variedade de situações e de diferentes aspectos de um mesmo conceito que estão envolvidos nestas situações” (VERGNAUD, 1994, p.46). Outro sentido utilizado para definir situação é o mesmo atribuído pelos psicólogos: os processos cognitivos e as respostas do sujeito ocorrem em função das situações com as quais são confrontados (1990, p.150 ,1993 p.12) .

Os esquemas se referem necessariamente a situações, ou classes de situações, Vergnaud (1990, p.136,tradução nossa, 1993, p. 2) considera a existência de duas classes de situações que ele distingue entre:

→ Aquelas para as quais o sujeito dispõe em seu repertório das competências necessárias para o tratamento imediato da situação.

→ Aquelas para as quais o sujeito não dispõe de todas as competências necessárias, o que lhe obriga um tempo de reflexão e de exploração de todas as tentativas abordadas e lhe conduz eventualmente ao êxito ou ao fracasso.

Dessa forma, considerando a influência de Piaget na TCC, talvez seja possível considerar as situações supracitadas como sendo divididas naquelas em que o resultado cognitivo é uma equilibrção minorante (na qual não há modificação em seus esquemas de assimilação) e majorante (na qual há modificação), respectivamente.

Conforme comentado, as situações dão sentido ao conceito, ou seja, as situações é que são responsáveis pelo sentido atribuído ao conceito (BARAIS; VERGNAUD, 1990). Pode-se, por exemplo, pensar que o conceito de isomeria espacial só surgiu após a comunidade química se deparar com o “problema dos isômeros geométricos”, ou seja, uma classe de situações psicológicas na qual um mesmo composto, com a mesma fórmula e composição química apresentava funções físicas, químicas e até mesmo biológicas diferentes. Dessa forma, é impossível atribuir um sentido ao conceito de isomeria geométrica sem que as situações científicas de diferenciação de isômeros sejam reconhecidas como situações psicológicas pelo sujeito.

Invariantes operatórios

Os invariantes operatórios ou significado do conceito são “conjunto das [operações] invariantes em que se baseia a operacionalidade dos esquemas” (VERGNAUD,1993,p.8)

Os invariantes operatórios podem estar associados ao conceito, ou o conjunto de invariantes podem ser reconhecidos e usados pelos sujeitos para analisar e dominar as situações. São componentes essenciais dos esquemas (VERGNAUD,1998) e determinam as diferenças entre eles; são classificados em dois tipos: conceito-em-ação e teorema-em-ação designam os conhecimentos contidos nos esquemas.

“Teorema-em-ação é uma proposição tida como verdadeira sobre o real. Conceito-em-ação é um objeto, um predicado, ou uma categoria de pensamento tida como pertinente, relevante” (1996c, p. 202; 1998, p. 168). Aqui, neste trabalho, iremos dar preferência à denominação geral de invariantes operatórios. A razão que nos leva a isto é que Vergnaud, ao definir teoremas e conceitos em ação, investiga as operações realizadas por estudantes mentalmente ou em um papel ao resolver situações matemáticas (estruturas aditivas e multiplicativas). Assim, ele observa o uso e atribuições do conceito de soma ou multiplicação em ação (operar com representações de números), e define o que são conceitos e teoremas em ação. Neste trabalho, existe, de fato, a atribuição de conceitos básicos (por exemplo, átomo) à representações mentais (esferas coloridas).

Contudo, o nosso foco de investigação é mais abrangente e reside na capacidade de visualizar e manipular moléculas tridimensionalmente. Poder-se-ia descrever, neste trabalho, os invariantes correspondentes ao campo conceitual da estereoquímica – deste a atribuição do conceito em ação de átomo até a operação mental com moléculas. Contudo, como será possível observar nos resultados, aparentemente os invariantes relacionados com operações mentais tridimensionais são os que são adquiridos durante o contato com o software (como rotacionar moléculas mentalmente). Ademais, de acordo com a revisão da literatura em Educação Química realizada, parecem-nos que as operações, invariantes são específicas à visualização e manipulação mental de moléculas. Um exemplo que poderíamos citar de invariante é, por exemplo, a rotação mental de um objeto espacial (molécula), a fim de visualizar grupos em locais não visíveis inicialmente. Uma vez que o estudante seja capaz de construir e manipular um isômero geométrico mentalmente, ele pode ser capaz de repetir as mesmas operações mentais para a mesma classe de isômeros (ou olefinas ou cicloalcanos). Eventualmente, poderemos classificar (ou não) estas operações em teoremas e conceitos em ação. Contudo, por enquanto, as classificaremos apenas como operações mentais invariantes durante a ação de resolver uma situação de isomeria geométrica, ou seja, invariantes operatórios.

Representação

O conjunto das representações simbólicas ou significantes é “conjunto das formas de linguagem (ou não) que permitem representar simbolicamente o conceito, suas propriedades, as situações e os procedimentos de tratamento” (VERGNAUD,1993,p.8).Esse conjunto de representações simbólicas pode conter linguagem natural, gráficos e diagramas, sentenças formais, etc. que podem ser usadas para indicar e representar os invariantes e, conseqüentemente, representar as situações e os procedimentos para lidar com elas (MOREIRA, 2002). Em Química, existe um conjunto de formas linguagem que representam simbolicamente os conceitos da área e que são vastamente utilizados como fórmulas, modelos, gráficos, reações, etc.

Por esse motivo a questão da representação simbólica que é uma questão essencial para o ensino de Química. Franchi (1999) comenta que Vergnaud faz parte dos teóricos que consideram a existência de uma medição entre os modos simbólicos de representação e os objetos do mundo material. Segundo ele, as representações simbólicas podem ajudar o estudante a resolver problemas que eles não conseguiriam resolver sem a ajuda delas (VERGNAUD, 1982). Sendo assim, as representações simbólicas mantêm um vínculo estreito com o desenvolvimento conceitual. Vergnaud (1982) aborda esse assunto, enfatizando a importância da representação simbólica. A representação simbólica não é apenas uma linguagem que permite a conceitualização, a representação simbólica deve representar o problema e deve ajudar os estudantes a resolver problemas que, sem o auxílio dessas representações não seria capaz de resolver.

Vergnaud explica que, assim como há problemas mais facilmente resolvíveis do que outros, ou procedimentos mais fáceis do que outros, haveria representações simbólicas mais potentes do que outras. Esta idéia nos soa bastante poderosa e nos convida a explorar tipos e formas de representações diversas que podem ser mais potentes para determinadas situações-problema em química. Esta exploração ocorre de forma natural no seio da comunidade científica ao se fazer uso de computadores para representar de inúmeras formas fenômenos e estruturas químicas.

Em resumo, são as situações que dão sentido ao conceito, os invariantes operatórios que constituem seu significado, e as representações simbólicas o seu significante (MOREIRA, 2002).

2.2 A UTILIDADE DA REPRESENTAÇÃO QUÍMICA NA CONCEITUALIZAÇÃO

No estudo da aprendizagem de conceitos científicos segundo a TCC

[...] é preciso identificar e classificar situações adequadas à aprendizagem de determinado conceito, pesquisar os invariantes operatórios usados pelos alunos e **procurar entender como, por que, e quando uma certa representação simbólica pode ajudar na conceitualização**. (MOREIRA,2002, p.27) [grifo nosso].

Habraken em um de seus artigos publicados comenta que a utilidade da representação gráfica reside no fato de que ela constitui uma espécie de impressão digital tridimensional para cada um dos diferentes compostos químicos. E complementa:

Cada substância tem sua própria individualidade e singularidade espacial. A representação estrutural é mais do que apenas um rótulo gráfico de identificação molecular. Informações sobre, entre outras coisas, cor, estado físico, solubilidade, e, mais importante, a reatividade química podem ser comunicadas apenas pelos elementos gráficos formalizados (2004, p.90, tradução nossa).

A linguagem química contém inúmeras representações e o tipo de representação utilizada para comunicar conceitos químicos pode interferir diretamente na compreensão dos estudantes. Interpretando os diferentes níveis de representação química segundo Gabel (1993), à luz do referencial de TCC, a situação-problema de nomear ou atribuir signos a diferentes compostos químicos foi resolvida utilizando-se a idéia de que os constituintes de cada composto deveriam ser a base da representação. Assim, a representação foi (re-)construída para expressar esta concepção. Com este passo, o foco representacional na química deixa de ser o nível macroscópico-sensório, conforme descrito por Gabel (1993) e passa a ser o que hoje chamamos de nível simbólico, assim criado. Ao invés de focar no sensório, a Química passa a focar no resultado da análise e síntese de cada substância.

O papel da representação química vai além de uma simples representação visual. A imagem representa o conceito de uma forma simplificada. Habraken (1996) comenta que não surpreende o fato de que quando questionados sobre como consultam revistas científicas, os químicos dizem que concentram-se nas imagens. Sendo assim, podemos considerar que as representações, como parte da linguagem química, desempenham um papel importante na conceitualização. Com base na evolução histórica das representações químicas podemos compreender que analisar a representação e sua evolução histórica é importante para compreender a própria evolução sócio-histórica-cultural dos conceitos em Química. De fato, as representações foram alteradas por razões que eram, na ordem, filosóficas, pragmáticas, procedimental, para tornar a escrita mais sucinta, para introduzir o conceito de ligação na compreensão do composto e finalmente para introduzir aspectos geométricos na sua compreensão. A própria compreensão do que era um composto químico foi evoluindo com o tempo, enriquecendo este conceito com outros conceitos auxiliares (ligação, isomeria) que refletiram no desenvolvimento de novas representações, que de certa forma permitissem uma

diminuição da carga cognitiva ao se comunicar o conceito. E assim, permitissem que a mente do químico pudesse utilizar os elementos da representação para pensar sobre aqueles compostos. (RAUPP; SERRANO; MOREIRA, 2009b). Machado e Moura (1995) ressaltam que a linguagem é de fundamental importância na elaboração conceitual. E não tem como objetivo meramente comunicar idéias. A aquisição de conceitos químicos está intrinsecamente ligada à compreensão da linguagem segundo Roque e Silva “[...] a aprendizagem da química se caracteriza pela apropriação de uma linguagem específica e apropriada para a descrição dos fenômenos materiais” (2008,p.923).

Na química os signos simbólicos fazem a ponte entre o abstrato e o real por meio de representações, e conforme Freitas (2005, p.111) “A capacidade de lidar com representações que substituem o real possibilita ao homem libertar-se do espaço e do tempo presentes, efetuar relações mentais na ausência das coisas, imaginar e planejar intencionalmente”. Dessa forma, a utilização de representações simbólicas permite raciocinar em categorias abstratas, não disponíveis imediatamente aos sentidos, e, portanto, ambientes inacessíveis por meio de representações não simbólicas.

2.3 TCC EM ENSINO DE CIÊNCIAS - REVISÃO DA LITERATURA

Basicamente, o uso do referencial teórico de Campos Conceituais é preferido quando a temática do papel da situação ou do uso de representações é evocada na explanação da aprendizagem. A princípio, este referencial foi criado para a investigação no campo da Educação Matemática, contudo, o próprio Vergnaud (1984) argumenta “[...] em resposta a teorias de aprendizado que tentam ‘se livrar do conteúdo’”, existem dois argumentos básicos que mostram que o desenvolvimento do conhecimento ocorre da mesma forma para diferentes campos do saber humano. O primeiro é que estudos empíricos mostram que as maiores dificuldades encontradas por estudantes dependem fortemente no conteúdo das situações a serem dominadas. O outro argumento fornecido no artigo é que a busca por “teorias gerais” peca em esquecer um aspecto epistemológico importante: que conceitos e competências são soluções a problemas bem específicos.

A partir desse artigo, podemos observar um uso crescente deste referencial no ensino de ciências. Contudo, o referencial de Campos Conceituais, até pouco tempo, não era frequentemente utilizado na investigação em Ensino de Ciências, em especial em Educação Química. Alguns exemplos do uso deste referencial estão no trabalho de Ganaras, Dumon e Larcher (2007), sobre aprendizado de Equilíbrio Químico. Apesar de discutir com detalhes o

referencial de Campos Conceituais na sua descrição de referencial teórico (em uma boa revista da área), os autores não integram este referencial aos seus resultados – provenientes do uso de um instrumento quantitativo na avaliação do conhecimento. Além disto, segundo os autores, o resultado geral é que o “aprendizado do conceito de equilíbrio químico não foi ‘abrangente’ e esteve fortemente vinculado às situações de reações químicas utilizadas (*sic*)”, o que decorre naturalmente, segundo nosso ponto de vista, ter sido lido dentro do referencial de Vergnaud.

Outro trabalho na área foi publicado por Pekdag e Le Maréchal (2003), que estuda o impacto do uso de filmes na Educação Química e da relação entre imagens e texto. Os autores utilizam o referencial de Campos Conceituais não como base para sua definição de aprendizagem - que é realizado pelo modelo de mudança conceitual de Duit/Posner (DUIT, 1998, APUD PEKDAG; LE MARÉCHAL, 2003). A utilização de Vergnaud é centrada na sua definição de “objetos perceptíveis”, que, segundo os autores, do ponto de vista cognitivo, é considerado como uma relação do significado (invariante), do significante (representação) e do referente empírico (situação). No caso de um tubo de ensaio, por exemplo, o significado (invariante) é o conceito de tubo de ensaio definido como uma peça cilíndrica de vidro fechada em uma ponta que pode conter substâncias químicas; o significante (representação) pode ser a palavra “tubo de ensaio” ou o desenho de um tubo de ensaio, por exemplo; o referente empírico (situação) pode ser um tubo de ensaio específico, ou um maior, ou um menor. Outros exemplos do uso deste referencial na Educação Química não foram encontrados em nossa revisão.

No campo do Ensino de Física, são populares os trabalhos de Moreira e colaboradores. Dentro do Ensino de Ciências, foi este autor que trouxe a idéia de utilizar este referencial nesta área, como base para a definição de aprendizagem na avaliação da mesma. Alguns dos seus trabalhos estudam a identificação de invariantes operatórios em termodinâmica; ou na conceitualização noções de movimento rotacional sem deslizamento; ou no conhecimento-em-ação em movimento de corpos rígidos. De fato, em uma publicação recente sobre a produção de conhecimento em Ensino de Física no século XXI, Vergnaud é citado como um (novo) referencial teórico na área de Ensino de Física. Em particular, a autora deste trabalho tem publicado, juntamente com seu orientador e com a colaboração de Moreira na temática desta investigação, como pode ser vista na lista de publicações na contracapa desta dissertação.

3. DELINEAMENTO DA PESQUISA

3.1 PROBLEMA DE PESQUISA

O uso de modelos tridimensionais computacionais auxilia o aprendizado do conceito de isomeria geométrica em estudantes do Ensino Médio e Superior?

3.2 HIPÓTESES

Hipótese 1: O aprendizado de representações tridimensionais deve ter um importante impacto no aprendizado de conceitos químicos, em especial dentro da estereoquímica (WU; SHAH, 2004).

Hipótese 2: Segundo Balaban (1999), modelos moleculares são extremamente úteis para a familiarização dos estudantes com o estereoisomerismo, e modelos de bolas e palitos melhor representam a mensagem tridimensional.

Hipótese 3: O uso de representações tridimensionais de espécies químicas estimula o desenvolvimento de habilidades visuoespaciais em estudantes (WU ;SHAH, 2004).

Hipótese 4: Após a internalização da representação e desenvolvimento dos invariantes o estudante será capaz de resolver melhor situações problemas que envolvam o uso de pensamento visuoespacial.

Hipótese 5: O processo de evolução dos conceitos e representações ocorreu de uma forma que pode ser lida dentro do referencial de Campos Conceituais, no sentido que foram se aperfeiçoando e incorporando elementos representacionais importantes à resolução de situações-problema em Química, como elementos estruturais tridimensionais com o advento da estereoquímica (RAUPP, SERRANO, MOREIRA, 2009b).

Hipótese 6: Se a representação vinculada ao conceito evolui, consideramos que ocorreu uma evolução conceitual.

3.3 OBJETIVOS

3.3.1 Objetivo Geral

O propósito deste estudo de caso é investigar o impacto do uso de modelos tridimensionais computacionais no processo de aprendizagem do conceito de isomeria geométrica em estudantes de Nível Médio Superior.

3.3.2 Objetivos específicos

→ Descrever a evolução sócio-histórico-cultural das representações em Química sob a ótica do referencial de Campos Conceituais.

→ Investigar a importância das representações no processo de aprendizagem, bem como essas representações podem auxiliar no desenvolvimento das habilidades relativas à visualização.

→ Investigar a evolução das representações dos estudantes do Ensino Médio, após uso de ferramentas computacionais de visualização molecular (ChemSketch).

→ Investigar se ocorre uma evolução das habilidades relativas à visualização espacial e se as representações 3D auxiliam a resolução de problemas de estereoisomerismo sob o ponto de vista dos estudantes de Ensino Superior.

3.4 JUSTIFICATIVA

Como e porque as representações químicas evoluíram? Por que a visualização desempenha um papel tão importante na compreensão de conceitos? De que forma desenvolver habilidades relativas à visualização? Todas essas perguntas motivaram a pesquisa, além da minha própria dificuldade em Química Orgânica, desde o Ensino Médio. Dificuldade que me acompanhou no início da Graduação, até que, com o uso de modelos moleculares concretos e a utilização de software de visualização pelos professores desta disciplina, compreender o universo microscópico da Química deixou de ser um desafio para transformar-se em minha área de preferência dentre tantas possibilidades que a Química oferece.

Justificamos a seguir a escolha do tópico Estereoisomeria e da metodologia da pesquisa que consiste no uso de ferramentas computacionais.

Justificativa com relação ao conteúdo químico.

Escolhemos Estereoisomeria, pois sabíamos que a questão da estrutura espacial é fundamental para a compreensão dos conceitos relativos a esse tópico. Ao realizar a revisão bibliográfica constatamos que a Estereoisomeria¹⁵ já havia sido extensivamente utilizada em investigações referentes ao raciocínio visuoespacial de estudantes de química, pelas razões listadas a seguir:

- A diferenciação entre os isômeros geométricos é mais “sutil” quando comparado com os outros casos de isomeria. Os químicos hoje em dia, são treinados desde o início para compreender isomeria em termos de modelos visuais (BALABAN,1999).
- Para identificar isômeros geométricos, os estudantes precisam transformar a fórmula química em sua estrutura molecular, visualizar a possível configuração tridimensional e comparar as estruturas. Por conta dessa seqüência de operações, ser capaz de compreender e manipular mentalmente representações são um ponto crítico para os estudantes (WU ; SHAH, 2004).
- A representação tridimensional – importante para a compreensão dos diferentes isômeros geométricos – não é dominada por todos os estudantes (KEIG; RUBBA, 1993); em especial a transição 2D (fórmula estrutural plana) para 3D (forma geométrica).
- Diferentes isômeros podem apresentar propriedades radicalmente diferentes e isto é um fator instrucional e motivacional importante para os estudantes.

Método Didático

Para a investigação optamos pela utilização de um software, pois acreditamos que a capacidade de raciocínio visuoespacial dos alunos pode ser melhorada pelo uso de software de construção de modelos moleculares computacionais, auxiliando os estudantes a desenvolverem a capacidade de representar tridimensionalmente as espécies químicas.

→ Os atuais softwares de representação molecular são capazes de formar imagens tridimensionais em que é possível se perceber claramente a diferença entre estes tipos de isômeros.

¹⁵ Optamos por restringir nossa pesquisa aos diastereoisômeros *cis-trans*, uma vez que trabalhar com enantiômeros (isômeros ópticos) não seria adequado aos estudantes de Ensino Médio, por esse tópico ser abordado muito superficialmente ou nem mesmo abordado.

→ Visualizações externas prestam apoio para a visualização interna e desempenham um papel fundamental na cognição, por isso existe uma necessidade de desenvolver sistematicamente as capacidades de visualização de todos os alunos -cientistas principiantes- até o padrão de profissionais - cientistas especializados (GILBERT, 2005).

→ Visualizar os aspectos tridimensionais de moléculas e suas relações com outras moléculas é difícil. Ao lidar com os princípios que são particularmente difíceis de visualizar ou conceituar, como estereoquímica, o apoio pedagógico e dispositivos mnemônicos¹⁶ tem sido inestimáveis para o processo de aprendizagem (KURBANOGLU; TASKESENLIGIL; SOZBILIR, 2006).

→ Atualmente, as ciências naturais fazem uso de computadores que, freqüentemente, como ferramentas, após utilizarem grande capacidade de processamento numérico, são programadas para apresentarem os resultados em forma de representações. Estas representações são, portanto, também utilizadas por cientistas para resolver problemas em seus respectivos campos de pesquisa, e devem ser úteis para o ensino destas ciências, da mesma forma que raciocinado acima, só que as ferramentas agora são programas de modelagem computacionais de fenômenos químicos.

→ Considerando o estágio atual de informatização das escolas e universidades e o fato de que o software escolhido é de livre acesso, o método didático proposto é viável e de fácil implementação.

¹⁶ Dispositivos mnemônicos – são dispositivos utilizados com fins de melhorar a capacidade de memorização de símbolos e sintaxes simbólicas mais difíceis.

4 METODOLOGIA

4.1 CARACTERIZAÇÃO DA AMOSTRA EXPERIMENTO I

Participaram voluntariamente do Experimento I, 10 estudantes (9 do sexo feminino e 1 do sexo masculino) do 4º ano do Curso Técnico de Química da Fundação Escola Técnica Liberato Salzano Vieira da Cunha¹⁷ na cidade de Novo Hamburgo-RS, em Junho de 2007.

A Fundação Liberato há 42 anos possui uma estrutura voltada à educação profissional de nível técnico. Possui cursos diurnos (Química, Mecânica, Eletrotécnica e Eletrônica) articulados com o Ensino Médio, com duração de quatro anos mais 720 h de estágio supervisionado em empresas, os cursos de educação profissional noturnos são dirigidos a alunos que já possuem o Ensino Médio, com duração de cinco semestres, mais 720 horas de estágio (além dos cursos diurnos oferecidos, há Segurança do Trabalho e Automotivo).

4.2 EXPERIMENTO I

Para responder ao problema de pesquisa utilizamos uma metodologia de estudo de caso interpretativo a fim de investigar a evolução das representações produzidas pelos estudantes, bem como habilidade visuoespacial de cada um deles. Para tanto, propusemos situações (RAUPP; SERRANO; MOREIRA, 2009a) que permitissem a análise do processo de conceitualização (construção do conceito-em-ação) de isomeria geométrica mediante a aquisição e posterior re-construção de representações químicas pertinentes (bi e tridimensionais). As situações didáticas propostas tinham a forma de problemas a serem resolvidos tanto antes como após o experimento.

As atividades relativas ao experimento estavam incluídas em um curso de Química Computacional, que foi aplicado em cinco módulos de 4 horas-aula.

A investigação foi dividida em 3 etapas:

→ Pré-teste - Na primeira etapa do experimento aplicamos um pré-teste de resolução de problemas que se realizou antes de qualquer contato com as ferramentas computacionais, e foi respondido com base nos conhecimentos prévios de cada

¹⁷ A escolha da amostra foi realizada por conveniência, devido atuação da autora em cursos de extensão na Fundação Liberato. Como análise dos dados possui características qualitativas, a amostra foi composta por apenas 10 estudantes do 4º ano, pois nessa etapa eles já haviam cursado todas as disciplinas necessárias para completar o Ensino Médio.

estudante. Esperávamos que os estudantes utilizassem representações satisfatórias para isômeros, já que este tópico é abordado na disciplina de Química Orgânica, previamente cursada.

→ Instrução e utilização do Software ChemSketch – Realizamos aulas na qual os estudantes foram instruídos sobre as ferramentas do ChemSketch e em um segundo momento executaram exercícios de modelagem.

→ Pós-teste – Após instrução com as ferramentas, da mesma forma que no pré-teste.

A seguir detalhamos a metodologia deste Experimento I.

Etapa 1 – duração 2 horas

Como o domínio de um Campo Conceitual é progressivo e por essa razão, considera os conhecimentos prévios dos sujeitos, inclusive suas concepções alternativas, iniciamos o experimento aplicando um pré-teste de resolução de problemas realizado antes de qualquer contato com as ferramentas computacionais. O teste era composto por quatro questões sobre isomeria geométrica, no qual os estudantes deveriam representar em três dimensões as formas *cis/trans*¹⁸ dos seguintes compostos:

- 1) *cis/trans*-2-buteno;
- 2) *cis/trans* -1,2-dibromociclopropano;
- 3) *cis/trans* -3-cloro-2-buteno;
- 4) *cis/trans*-1-bromo-1,2-dimetilciclopentano.

Estes compostos são de fácil construção para um estudante de química orgânica que possua as competências necessárias adquiridas mediante prévia conceitualização de isomeria geométrica. Contudo, a representação utilizada pelos estudantes pode não apresentar características tridimensionais (imprescindíveis para a conceitualização satisfatória) adequadas, fruto de um processo de ensino que não explora adequadamente estas representações geométricas. Os compostos 1 e 3 são olefinas, enquanto os compostos 2 e 4 são cicloalcanos. Estes dois pares de exemplos representam as duas classes na qual a chamada isomeria geométrica pode ocorrer. Todos os grupos funcionais conectados aos carbonos

¹⁸ A nomenclatura *cis trans* refere-se à posição dos ligantes, quando os ligantes são grupos alquila, refere-se aos grupos alquila e quando são halogênios refere-se à posição dos halogênios.

centrais unidos por uma ligação dupla das olefinas são simples suficientes para serem compreendidos na sua nomenclatura, bem como na construção da representação bidimensional e também na sua representação tridimensional. Dessa forma, consideramos que o pré-teste é suficientemente bem-construído a fim de permitir uma execução sem maiores percalços pelos estudantes, mesmo antes de ter contato com o processo instrucional em si. Do ponto de vista psicológico, naturalmente há de se perguntar como trabalhamos para que os estudantes respondessem o pré-teste logo no início das atividades de um curso fora de suas atividades didáticas usuais. Os estudantes foram avisados de que a atividade não ia ser utilizado na avaliação final (e posterior certificação dos estudantes) e que tinha apenas o intuito de colher dados para uma investigação em aprendizagem de conceitos químicos.

Para representar as estruturas disponibilizamos aos estudantes os materiais relacionados: folhas de desenho, régua, lápis e borrachas, canetas esferográficas, conjunto de lápis de cor com 12 cores, conjunto de canetas hidrográficas com 12 cores. Após conclusão do pré-teste, os estudantes utilizaram um software não relacionado com o experimento, dando seguimento ao curso que estava sendo ministrado.

Etapa 2 - duração 6 horas

Os esquemas se desenvolvem a partir da exposição a situações- problema, por isso não basta apresentar um modelo molecular pronto, é preciso propor uma série de situações com diferentes níveis de complexidade que permitam o sujeito desenvolver seu repertório de esquemas e representação. Por esse motivo realizamos a instrução com o ChemSketch, na qual os alunos individualmente resolveram as tarefas propostas conforme detalhamos a seguir.

→ Aula 1 (duração 4 horas) - Iniciamos a aula explanando as ferramentas do software escolhido para ser utilizado durante os experimentos: ACD/ChemSketch da ACDLabs¹⁹. Cada estudante trabalhou individualmente. Todos os microcomputadores possuíam o software instalado previamente e os estudantes foram instruídos em como executar o programa, durante a explanação supracitada. Ao iniciar o software, o estudante observa a tela inicial ou interface do programa com várias funções. A seguir detalhamos a seqüência instrucional de construção de moléculas que foi utilizada em nosso experimento.

Para construir a molécula de etano ($\text{CH}_3\text{-CH}_3$), por exemplo, o usuário deve clicar na opção de selecionar o átomo de carbono no menu à esquerda (Figura 14 a). Em seguida, ao

19 A versão freeware disponível para download no endereço: <http://www.acdlabs.com>

clicar no espaço em branco na tela o programa escreverá CH₄, respeitando a valência do carbono e a necessidade de se preencher com átomos de hidrogênio as ligações restantes. Em seguida, pode-se clicar diretamente no grupamento desenhado e “arrastar” para a direita, e o programa desenhará uma linha, indicando a ligação deste grupo com outro a ser desenhado (Figura 14 b).

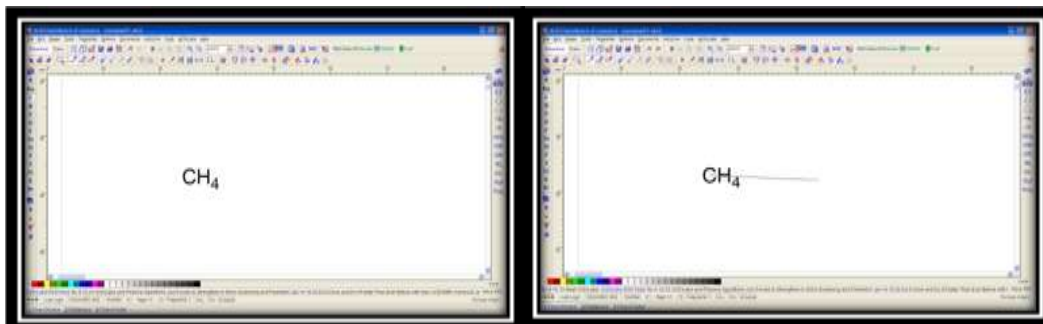


Figura 14: Representação do CH₄ e ligação extra (b)

Na Figura 14, no final da nova ligação construída, selecionamos também um átomo de carbono, que foi descrito pelo programa como CH₄, visto que já existe uma ligação preenchida com o grupamento anterior. Imediatamente o programa ajustará a valência do CH₄ para acomodar a ligação recém construída, alterando-o para CH₃ (Figura 15a). Pode-se colocar o nome da estrutura molecular, utilizando a opção de nomear estruturas (Figura 15b).

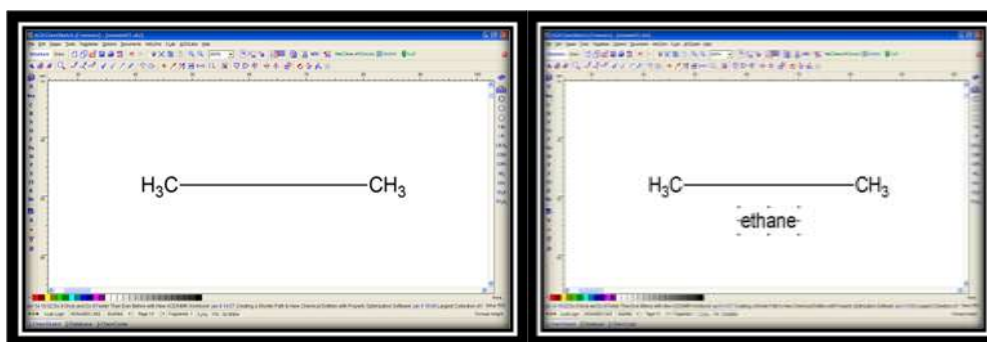


Figura 15: Fórmula do etano (a) e opção “nomear estruturas” (b)

Agora, pode-se solicitar a “otimização” da estrutura. Assim, o programa utilizará algoritmos específicos para encontrar a estrutura química otimizada, que se pode ver na Figura 16a. Neste ponto, estamos com a estrutura desejada construída e otimizada. Esta estrutura muito provavelmente é tridimensional, mas não se pode observar corretamente com a visualização escolhida. Assim, podemos solicitar que a estrutura 3D seja mostrada. A figura 16b mostra a opção de visualização 3D chamada “*wireframe*”, em referência à uma estrutura feita de “arames”, sem uma representação específica diferenciada para átomos, apenas ligações com coloração terminal indicando o tipo de átomo ali presente.

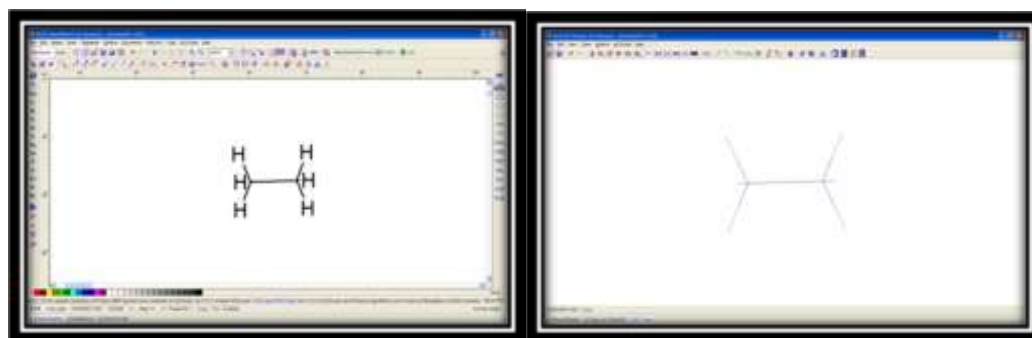


Figura 16: Opção "Otimização da estrutura" (a) e representação *wireframe* (b)

Uma nova janela do programa é criada, surgindo esta estrutura 3D *wireframe* nesta janela. Pode-se agora solicitar a visualização em outros esquemas representacionais, como a “Balls and Sticks” ou bolas e palitos, tipicamente semelhantes aos modelos utilizados em sala de aula (Figura 17a). As Figuras 17b, 17c e 17d mostram outros tipos de representação, a saber: *Spacefill* - neste caso, não se representam ligações, sendo esta representação o extremo oposto da *wireframe*, na qual apenas as ligações são mostradas; “Sticks only” que representam apenas as ligações, semelhantemente ao *wireframe*, mas com a visualização tridimensional destas ligações, o que permite uma apreciação do caráter geométrico da estrutura, o que é praticamente impossível com a *wireframe* apenas; finalmente a representação de “nuvem eletrônica” mostra o que seria o raio médio dos orbitais de valência como uma “casca esférica” em torno de cada átomo, dentro uma representação de “balls and sticks”.

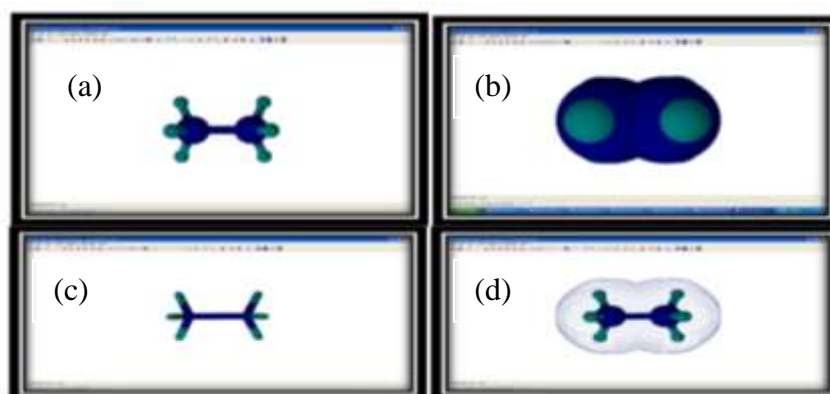


Figura 17: Representações 3D

À esquerda, na Figura 17 (a) a representação “balls and sticks”, 17 (b) “spacefill”. À esquerda, 17 (c), “sticks only” e finalmente, 17 (d), a representação com “nuvens eletrônicas”.

Após a explanação das ferramentas utilizamos o ChemSketch para a representação de moléculas-exemplo cuja complexidade varia desde modelos simples até formas complexas (na ordem, Cloroetano, Propanol, Butanal, 3-metil-2-butanona, Ácido pentanóico, Ácido

oxálico, Antraceno, Éter etílico, Butanoato de etila, 2,4-dicloro-2-penteno, Anidrido Propanóico, Etanamida, *N,N*-dimetilpropanamida, 2,3,3-trimetilbutanonitrila, Tolueno e Vitamina B3), os alunos foram incentivados a interagir com as fórmulas planas e os seus respectivos modelos 3D exibidos no computador. Utilizamos também o programa Microsoft Word. Após a construção de cada uma das moléculas acima, tanto a fórmula estrutural quanto a 3D foram transferidas para o Microsoft Word (Pacote Microsoft Office) para que os mesmos observassem a aplicabilidade do ChemSketch na confecção de trabalhos, relatórios, artigos etc.

→ Aula 2 – Construção de isômeros (duração 2 horas)

Após a manipulação das ferramentas do ChemSketch, os testes foram devolvidos aos alunos para que os mesmos isômeros fossem construídos em 3D no ChemSketch e comparados com suas construções prévias.

Etapa 3 - duração 2 horas



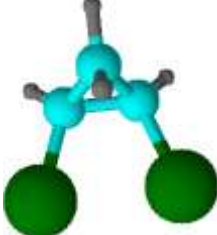
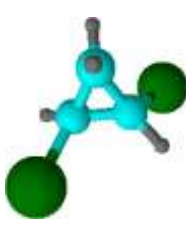






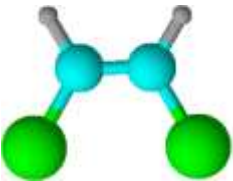

Pós teste - Após uma semana de intervalo na qual foi dado seguimento ao curso com outros softwares²⁰, finalizamos a pesquisa aplicando um segundo teste na qual, sem o uso do ChemSketch, com os mesmos materiais os alunos representaram por meio de desenhos os seguintes pares de isômeros:

- 1) *cis/trans*-1-cloro-2-bromociclobutano
- 2) *cis/trans*-1,2- dicloroeteno

Para auxiliar a análise das representações criamos a Tabela 1 que contém todas os modelos moleculares trabalhados durante pré e pós teste.

20 Os demais softwares utilizados durante o curso foram: Chemlab da Model Science Software e o ChemWindow.

Tabela 1: Representação computacional 3D dos isômeros utilizados no Experimento I

Isômeros Pré-teste		
1. <i>cis/trans</i> -2-buteno		
2. <i>cis/trans</i> - 1,2- dibromo ciclopropano;		
3. <i>cis/trans</i> -3-cloro-2-buteno		
4. <i>cis/trans</i> -1-bromo-1,2-dimetilciclopentano		
Isômeros Pós-teste		
1. <i>cis/trans</i> -1-cloro-2-bromociclobutano		
2. <i>cis/trans</i> -1,2- dicloroeteno		

4.3 CARACTERIZAÇÃO DA AMOSTRA EXPERIMENTO II

Participaram voluntariamente da pesquisa 6 estudantes (5 do sexo feminino e 1 do sexo masculino) dos cursos de graduação de Engenharia Química, Química Industrial e Licenciatura em Química da Universidade Luterana do Brasil na cidade de Canoas, RS, Brasil.²¹

4.4 EXPERIMENTO II

No segundo experimento aplicamos uma metodologia semelhante ao Experimento I com exceção das entrevistas²² que foram realizadas após a conclusão de cada um dos testes.

A realização das entrevistas envolveu gravações em vídeo com posterior transcrição e análise das mesmas. A estratégia *THINK ALOUD* serviu como base para o entrevistador. Para utilizar esta técnica os investigadores são aconselhados a dar instruções de um modo muito geral, simplesmente para o estudante “pensar em voz alta” enquanto executa a tarefa ou relata uma tarefa anteriormente executada verbalizando "tudo que passa pela sua cabeça". Dessa forma evitamos a perturbação do processo de pensamento (COTTON ;GRESTY,2006).

A finalidade deste método é fazer explícito o que está implicitamente sendo feito durante a execução de uma tarefa específica e o objetivo é investigar o processo mental que cada pessoa utiliza para resolução destes problemas. O Think Aloud possibilita dessa forma, a compreensão de como os estudantes constroem os significados. Willhelm (2001) observa que: “Essa técnica tem a vantagem de fornecer um registro da atividade que pode ser partilhado, manipulado, gravado, avaliado, em comparação com as anteriores e posteriores esforços para medir e demonstrar melhoria.” A seguir detalhamos cada etapa da metodologia.

Etapa 1 – duração 4 horas

21 A amostra foi escolhida por conveniência. Como o domínio de um Campo Conceitual é progressivo, optamos por estudantes de nível superior por acreditar que estes possuem um conceito de isomeria mais sólido devido o tópico ter sido abordado novamente na disciplina de Química Orgânica I. Todos foram voluntários.

22 As entrevistas foram realizadas pelo Prof. Agostinho com o objetivo de não haver nenhum tipo de interferência da parte da autora na resposta dos estudantes.

Nessa etapa aplicamos um teste composto por três questões sobre isomeria geométrica, no qual os estudantes tiveram de representar em três dimensões as formas *cis/trans* dos seguintes compostos:

- a) *cis*-2-buteno e *trans*-2-buteno;
- b) *cis*-1,2-dibromociclopropano e *trans*-1,2-dibromociclopropano;
- c) Ácido *cis*-butenodióico (maleico) e Ácido *trans*-butenodióico (fumárico).

Além de representar os isômeros os estudantes receberam uma folha em branco com a seguinte instrução:

Imagine que você vai explicar a um outro colega tudo o que sabe sobre Isomeria. Você pode utilizar texto, equações, fórmulas, desenhos, tabelas, da forma que desejar.

Após a conclusão do pré-teste os estudantes receberam um texto sobre a técnica utilizada Think Aloud (ver em Anexos) e foram entrevistados individualmente em uma sala que ficava isolada do grupo.

Etapa 2 – Idem à Etapa 2 do Experimento I.

Etapa 3 – duração 4 horas

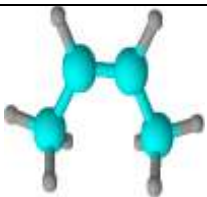

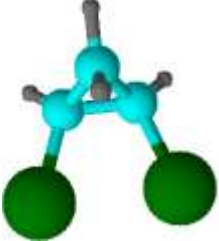
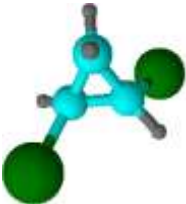




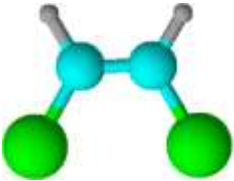



Posteriormente, sem o uso do software, aplicamos um segundo teste no qual, com os mesmos materiais os alunos representaram através de desenhos os seguintes pares de isômeros:

- a) *cis/trans*-2-bromo-1-clorociclobutano;
- b) *cis/trans*-1,2- dicloroeteno;
- c) *cis/trans*-3-cloro-2-buteno.

Da mesma forma que no pré-teste os estudantes receberam uma folha em branco com a instrução para escrever sobre isomeria. Imediatamente após a conclusão do pós teste os estudantes foram entrevistados individualmente nas mesmas condições do pré-teste²³. A tabela 2 traz a representação computacional 3D construída no ChemSketch dos isômeros utilizados no Experimento II.

23 Dois dos seis estudantes não compareceram no dia do pós-teste por motivo de saúde e acabaram realizando o pós teste uma semana após os demais estudantes. Em função disso, esses dados não foram considerados para a pesquisa.

Tabela 2: Representação computacional 3D dos isômeros utilizados no Experimento II

Isômeros Pré-teste		
<i>cis</i> -2-buteno e <i>trans</i> -2-buteno		
<i>cis</i> -1,2-dibromociclopropano e <i>trans</i> -1,2-dibromociclopropano		
Ácido <i>cis</i> -butenodióico (maleico) e Ácido <i>trans</i> -butenodióico (fumárico).		
Isômeros Pós-teste		
<i>cis</i> -2-bromo-1-clorociclobutano e <i>trans</i> -2-bromo-1-clorociclobutano		
<i>cis</i> -1,2-dicloroeteno e <i>trans</i> -1,2-dicloroeteno		
<i>cis</i> -3-cloro-2-buteno e <i>trans</i> -3-cloro-2-buteno		

5 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS DADOS

5.1 EXPERIMENTO I

Ao se comparar os pré e pós-testes do Experimento I, analisamos os resultados em torno de diferenças representacionais que ocorreram após manipulação das moléculas com o ChemSketch. Rapidamente percebemos que os testes eram incapazes de fornecer informações metodologicamente reproduzíveis sobre os invariantes operatórios adquiridos durante o processo instrucional. Assim, tivemos que nos restringir à análise das representações, categorizando as diferenças representacionais específicas:

Categorias 1 e 2: Representação dos Átomos: Utilização de cores e/ou tamanhos distintos para diferenciar átomos; tipo de representação utilizadas para os diferentes átomos; correta conversão da estrutura 2D em 3D.

Categoria 3: Representação das Ligações: Número de ligações por átomo (respeitando a valência); tipo de representação de ligação utilizada (*wireframe*, bolas e palitos, etc.); distribuição espacial das ligações.

Categorias 4, 5 e 6: Perspectiva 3D: estruturação e desenho das ligações e átomos de forma a causar a impressão tridimensional da molécula.

Após analisar as diferenças entre os testes e categorizar os estudantes de acordo com o nível de evolução, os marcos apresentados na Tabela 1 foram levantados. Neste caso, utilizamos a idéia de evolução representacional, ou seja, quanto mais as representações utilizadas pelos estudantes estivessem se aproximando das utilizadas pelo software de construção de modelos moleculares, tanto melhor a evolução do estudante.

Contudo, de um ponto de vista da Teoria de Campos Conceituais, não devemos esquecer que os estudantes irão desenvolver suas representações frente às situações específicas apresentadas durante os testes e o processo instrucional. Assim, esperamos que a evolução seja mais marcante no que toca explicitamente o conceito de isomeria geométrica e das representações adequadas para a compreensão deste conceito, bem como suas características fundamentais: aquelas que indiquem diferenças geométricas entre os pares de isômeros.

Os estudantes então foram classificados em três grupos distintos: os que apresentaram vários elementos identificados como de excelente evolução entre o pré e o pós-teste (sendo assim aqueles que apresentaram uma equilíbrio melhor dos elementos assimilados advindos do ChemSketch); os que apresentaram boa evolução; e os que apresentaram evolução modesta pela análise dos desenhos, à luz do referencial teórico. Aqui entendemos equilíbrio, assimilação e acomodação em um sentido neo-piagetiano, tal qual assumido por Vergnaud; ou seja, não buscamos estudantes que desenham átomos exatamente como desenhados pelo programa, mas os que compatibilizem a lógica assimilada com sua própria capacidade de desenhar as moléculas anteriormente. Para sumarizar nossa avaliação, criamos a Tabela 1 já mencionado:

Tabela 3. Categorias para análise da evolução representacional

	Nível de Evolução	Excelente Evolução	Boa Evolução	Evolução Modesta
Características analisadas	1 - Quanto à diferenciação relativa ao tamanho dos átomos (a)	Diferença de tamanho entre heteroátomos, carbonos e hidrogênios é significativa.	Diferença de tamanho entre heteroátomos e hidrogênios é suficiente.	Diferença de tamanho entre heteroátomos e hidrogênios é não é observada.
	2 - Quanto à diferenciação relativa às cores dos átomos (a)	Cores são mais intensas, diferenciando bem os átomos	Utilizam algumas cores para diferenciar os átomos	Cores claras ou ausência de cor para diferenciar átomos
	5 - Quanto à representação das ligações (b)	As ligações são retas perfeitas (desenhadas com régua) e os átomos círculos quase perfeitos.	As ligações são cilindros (sticks) e os átomos círculos.	As ligações são retas não tão bem desenhadas e os átomos nem sempre são circulares. Há átomos que não foram desenhados
	3 - Quanto à geometria das moléculas (c)	Ângulos de ligação são mais definidos	Ângulos de ligação não bem definidos, mas obedecendo TRPEV	Ângulos de ligação são mal definidos, com átomos claramente não obedecendo à regra TRPEV
	4 - Quanto à representação dos átomos no plano (c)	A representação de átomos para frente ou para fora do plano é bem explícita	A representação de átomos para frente ou para fora do plano é tênue	A representação de átomos para frente ou para fora do plano não é explícita e nem sempre utilizada adequadamente
	6 - Quanto à perspectiva tridimensional (c)	Há perfeita clareza de perspectiva	Não há clareza na perspectiva	O desenho não apresenta uma perspectiva tridimensional

Nossa análise gerou um total de seis categorias representacionais levantadas, quatro que eram fortemente vinculadas ao conceito-em-ação de isomeria geométrica, as que observavam características geométricas (nomeadas 'c') e uma que observava a existência e identificação de ligações duplas (nomeada 'b'). A primeira vinculada à representações

tridimensionais em si enquanto a última vinculada à presença de ligações duplas, característica necessária para ocorrência de isomeria geométrica em olefinas. Também levantamos duas categorias que não são essenciais (aos nossos olhos) à conceitualização de isomeria geométrica, contudo, são importantes cognitivamente para uma boa representação interna e externa de uma molécula, e estas duas categorias são nomeadas ‘a’.

Para realizar a análise, os desenhos foram individualmente, para todos os estudantes, analisados à luz do referencial teórico adotado. O objetivo foi observar uma evolução, causada pela utilização do ChemSketch como instrumento, na capacidade de representar internamente e, conseqüentemente, externamente, isômeros geométricos. Esta evolução, quando detectada, deve de ser causada pela equilibração de elementos inerentes à lógica externa de representações assimilados durante a interação com o ChemSketch e a posterior acomodação de suas lógicas pré-existentes em função da assimilação das lógicas recém-assimiladas. Estas lógicas lidam com a maneira de representar moléculas embutida no programa (lógica assimilada) e pelo estudante (lógica pré-existente).

Estas lógicas, interpretadas à luz da TCC, são partes do esquema de assimilação de como se imaginar uma molécula tridimensionalmente, e cujos componentes contém representações e invariantes operatórios. Como é de se esperar, nossa análise foca-se exclusivamente no que pode ser inferido dos testes escritos: as representações externas utilizadas pelos estudantes quando deparados com as situações fornecidas nos testes. Não há como se ter acesso direto aos invariantes operatórios.

Todas as características supracitadas são características marcantes do software ChemSketch 10.0 utilizado, sendo, provavelmente assimiladas pela estrutura cognitiva dos alunos pertencentes a este grupo após o uso do programa de forma regular.

5.1.1 Análise Representacional

Elegemos um estudante de cada nível apresentado na Tabela 1 para discutirmos detalhadamente suas representações.

Excelente evolução (JS, DN):

Durante o pré-teste, ou seja, antes do uso do programa, este grupo caracteriza-se por apresentar desenhos moleculares que demonstram elementos do uso de perspectiva tridimensional, mas ainda com diversos erros representacionais. Frequentemente fazem uso de cores, mas não de maneira consistente (mesma cor para o mesmo elemento químico) e sistemática (utilização de cores para todos os elementos químicos) em todos os desenhos. Já após a intervenção, este subgrupo

apresenta as melhores imagens, desenhadas em geral com utilização de instrumentos como régua e cores diferenciadas. Consideramos o uso de régua e esquema de cores, pois no pré-teste observamos a utilização, em alguns casos de lápis/caneta monocolorida para executar a tarefa e sem muita preocupação em representar as ligações, representando as moléculas apenas com as representação advindas da assimilação original de sala de aula. Ao utilizar o programa, o estudante sofre uma acomodação piagetiana, refazendo seus esquemas de assimilação original ao perceber que o Chems sketch, ao utilizar linhas retas promove uma visualização 3D melhor e a utilização de cores para átomos distintos facilita a identificação das espécies atômicas. Evidência de acomodação piagetiana: A partir daí o estudante incorpora o uso de linhas retas para ligações e cores para átomos por facilitar a tarefa cognitiva de reproduzir espécies moleculares.

Sua representação permanece a *Bolas e palitos* tanto antes como após a intervenção. Esta evolução pode ser melhor compreendida analisando os desenhos de JS.

Na figura 18 à esquerda temos o (*cis/trans*) 3-cloro-2-buteno e à direita o 1,2-dibromociclopropano desenhados pelo estudante JS no pré-teste. A forma estrutural plana está acima e sua projeção 3D, abaixo. Os círculos vermelhos realçam grupamentos mal desenhados (este ponto será discutido abaixo).

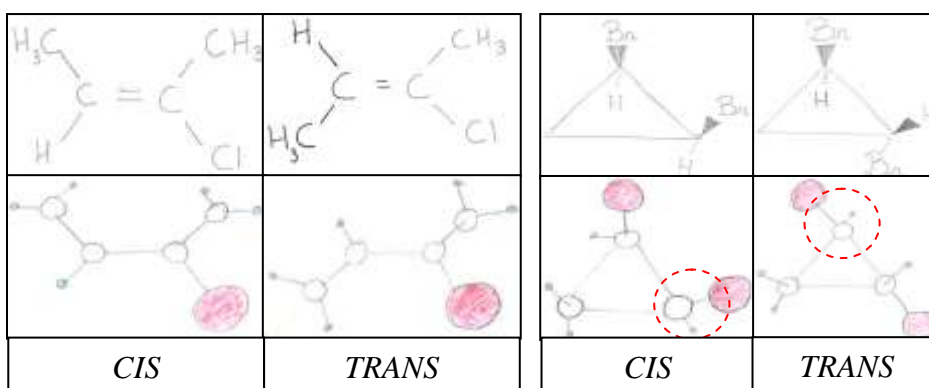


Figura 18: Pré-teste JS.

Conforme pode ser observado na figura 18, o estudante JS demonstra dominar a representação plana para o 3-cloro-2-buteno no pré-teste. O desenho da estrutura plana não é solicitado na questão, mas a maioria dos estudantes sente a necessidade de representar a molécula bidimensionalmente no papel (como se fazendo uso de uma memória externa) antes de esboçar a forma tridimensional. Podemos observar esse padrão de comportamento em todos os dez estudantes. Quando o estudante tenta, conforme solicitado no pré-teste, representar a estrutura do alceno tridimensionalmente (ou espacialmente), ele demonstra não

dominar esta representação. De fato, na figura 18, na parte inferior, alguns elementos estão ausentes: o terceiro átomo de hidrogênio do grupamento CH_3 não é representado pelo estudante. Dessa forma, o carbono faria apenas três ligações e não quatro como o correto.

O tamanho dos átomos, mesmo no pré-teste está satisfatoriamente diferenciado. Na figura 18, à direita, o aluno desenhou o dibromociclopropano. Como pode ser observado nos círculos vermelhos, houve átomos de carbono em que as quatro ligações não foram desenhadas de forma a tornar evidente sua distribuição espacial. É aparente que o estudante não é capaz de imaginar estes átomos de carbono, quando ligados a grupamentos com heteroátomos como formando uma distribuição espacial de ligações, pois existem grupamentos CH_2 que o estudante desenhou uma das ligações “saindo” do papel, mas não para o CH_3 .

Na Figura 19, parte inferior, temos o 1-cloro-2-bromociclobutano na forma *cis* (esquerda) e *trans* (direita), desenhados pelo estudante JS na forma 3D projetada, durante o pós-teste. Na parte superior, os desenhos respectivos do 1,2-dicloroeteno.

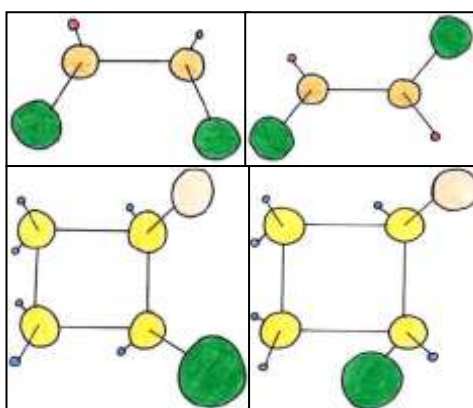


Figura 19: Pós-teste JS

Já após a intervenção, durante o pós-teste, conforme pode ser observado na figura 19, o estudante não fez uso da fórmula estrutural plana 2D com fins de desenhar a fórmula 3D, indo diretamente até ela, executando toda a tarefa sem necessidade de uma memória externa. Todos os carbonos apresentam ligações com indicação de uma distribuição espacial, o que é creditado à atividade realizada que possibilitou um definitivo refino na sua capacidade de representar interna e externamente estes isômeros.

Ao utilizarem o programa os estudantes foram capazes de assimilar elementos da representação molecular utilizada pelo ChemSketch tais como as citadas acima. Com relação à forma de desenhar, o estudante utiliza instrumentos (réguas) para desenhar as ligações, tal qual o ChemSketch, que utiliza códigos de programação na qual as linhas são perfeitamente

retas. Os desenhos utilizam o modelo *bolas e palitos*, que representa uma boa equilibração entre seus esquemas anteriores e a lógica representacional do software. Com relação à visualização tridimensional, o desenho molecular apresenta elementos representacionais que indicam com clareza quais grupamentos atômicos estão à frente ou atrás do plano central da molécula.

Todas estas características foram assimiladas após o contato com o programa, podendo, dentro da TCC, ser explicados pela apropriação de elementos representacionais presentes nas representações do ChemSketch, que foram assimilados pela estrutura cognitiva dos estudantes. Este foi o grupo que apresentou uma melhor equilibração. A representação 3D do dicloroeteno (Figura 19, abaixo) não apresenta a ligação dupla entre os dois átomos de carbono. Esta deficiência é encontrada no ChemSketch igualmente, o que constitui uma evidência adicional da assimilação da lógica representacional do software.

Boa evolução (LB, AC, ST)

Este grupo se caracteriza por apresentar uma boa evolução, isto é, uma melhora detectável entre os desenhos do pré e pós-teste. Em geral apresentavam figuras sem cores e sem diferenciação de heteroátomos no pré-teste, enquanto no pós-teste evoluem para representação colorida, tridimensional e com diferenciação entre raios de heteroátomos. Preferem a representação *bolas e palitos*. Para uma análise detalhada da evolução do grupo, foi escolhido o estudante LB. Na figura 20 à esquerda temos o (*cis/trans*) 3-cloro-2-buteno e à direita o 1,2-dibromociclopropano desenhados pelo estudante LB no pré-teste. A forma estrutural plana está acima e sua projeção 3D, abaixo. Os círculos vermelhos realçam grupamentos desenhados de forma incorreta.

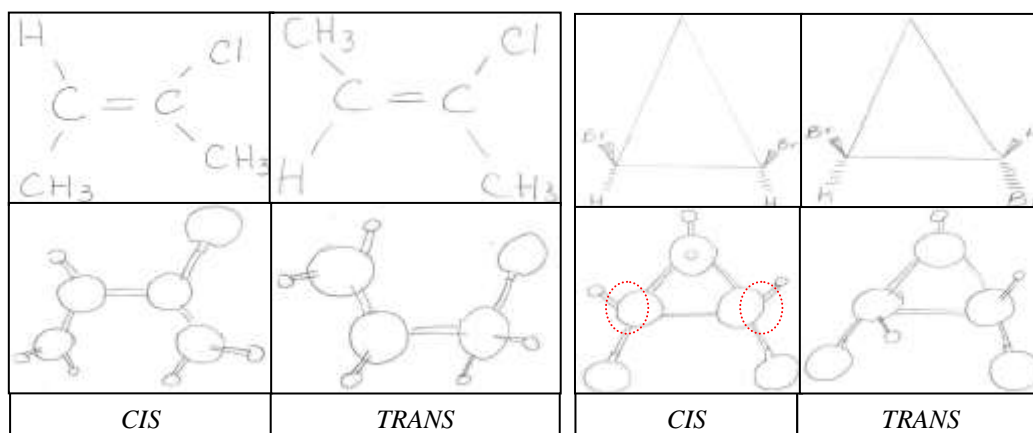


Figura 20: Pré-teste LB

Durante o pré-teste, conforme ilustrado na Figura 20, este estudante (LB) inicialmente desenha a fórmula estrutural plana, tal qual o estudante anteriormente discutido (estudante JS). Em seguida, o estudante desenha a figura 3D projetada, conforme solicitado.

O estudante, na figura 20, tenta representar os grupamentos CH_3 de forma tridimensional, mas falha ao não acrescentar o terceiro átomo de hidrogênio (visto que coloca dois átomos de hidrogênio em planos à frente e em baixo do átomo de carbono central). O estudante também não faz uso de cores para diferenciar os átomos nem observa a diferença entre raios atômicos para átomos não hidrogenóides. Na figura 20, observa-se, além dos fatores anteriormente comentados, que o estudante não consegue representar de forma correta a estrutura das ligações em torno do átomo de carbono.

Na Figura 21, parte inferior, temos o 1-cloro-2-bromociclobutano na forma *cis* (esquerda) e *trans* (direita), desenhados pelo estudante LB na forma 3D projetada, durante o pós-teste. Na parte superior, os desenhos respectivos do 1,2-dicloroeteno.

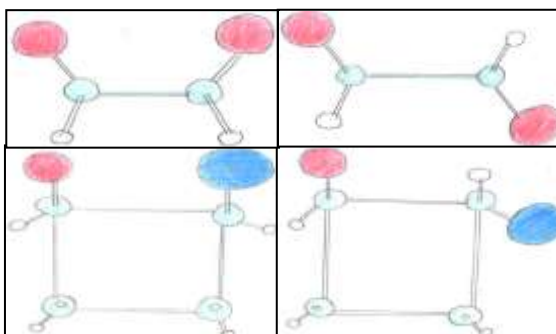


Figura 21: Pós-teste LB

Após a intervenção, na Figura 21, LB também não necessita da fórmula estrutural plana como um esboço prévio para se conseguir o desenho 3D. O estudante faz uso de diferentes cores para os átomos e também diferencia o tamanho de todas as espécies. Além disto, ligações estão corretamente representadas nas suas posições 3D. Note que este estudante utiliza representações para as ligações semelhantes à do tipos bolas e palitos, enquanto JS utiliza linhas retas (tipo *wireframe*)

Ao analisar a evolução deste grupo dentro da TCC (estudantes LB, AC e ST), é percebido que vários elementos representacionais cruciais à formação de seu conceito-em-ação particular de Isomeria foram assimilados, mas ao serem equilibrados com elementos já existentes na estrutura cognitiva do estudante, resultaram em uma equilibrção menos eficaz quanto o grupo anterior para lidar com a tarefa. Em especial, pode-se destacar que os ângulos de ligação não são tão evidentes e que a perspectiva, comparada ao grupo anterior, não é tão clara. Em especial, estes estudantes utilizam a representação *bolas e palitos*, utilizada pelo

ChemSketch 10.0 (uma boa assimilação), contudo ao tentar reproduzir esta representação, o resultado da perspectiva e ângulo de ligação é sacrificado – sendo estes dois elementos importantes à representação e diferenciação de isômeros *cis/trans*. Assim, a acomodação com elementos importantes em um desenho é fraca.

Evolução modesta (TN, FR, GL, LC, LV):

O estudante TN é um exemplo de estudante que, desde o pré-teste, já apresentava diversos elementos representacionais que outros não apresentavam. Em primeiro lugar, o estudante faz uso de cores na estrutura 3D, mas não representa átomos não-hidrogenóides de tamanho diferentes. Na figura 22 à esquerda temos o (*cis/trans*) 3-cloro-2-buteno e à direita o 1,2-dibromociclopropano desenhados pelo estudante TN no pré-teste. A forma estrutural plana está acima e sua projeção 3D, abaixo. Os círculos vermelhos realçam grupamentos desenhados incorretamente.

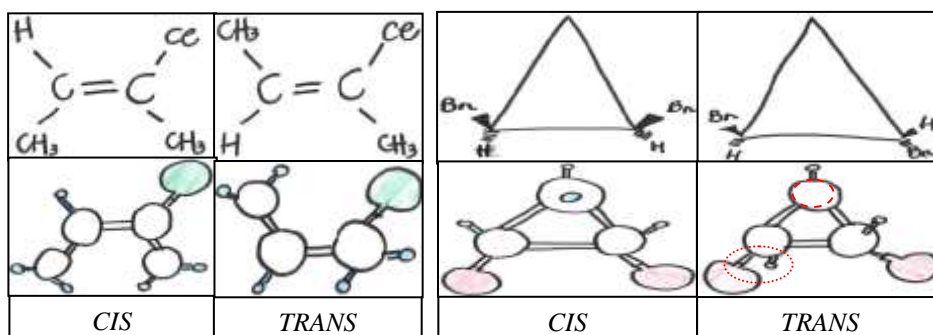


Figura 22: Pré-teste TN

Após a intervenção, mesmo este estudante apresenta alguma melhora (ver Figura 23). O estudante TN faz uso da representação estrutural plana no pós-teste antes de desenhar a estrutura 3D. Ademais, a estrutura 3D esboçada por TN (Figura 23) ainda não apresenta a clareza representacional que JS (Figura 19) e LB (Figura 21) apresentam, pois diversas ligações não apresentam uma distribuição espacial em torno dos átomos de carbono.

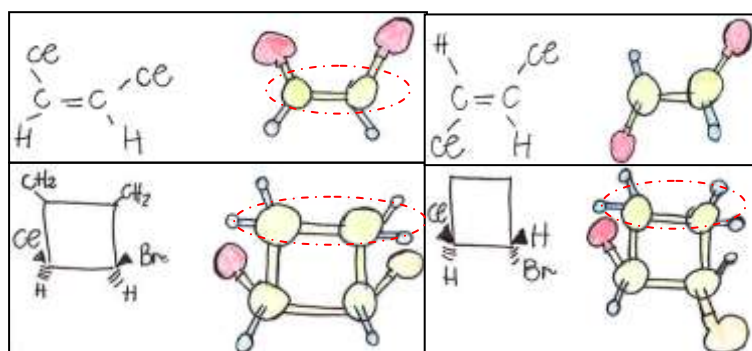


Figura 23: Pós-teste TN

Na parte inferior da Figura 23 temos o 1-cloro-2-bromociclobutano na forma *cis* (esquerda) e *trans* (direita), desenhados pelo estudante TN na forma 3D projetada, durante o pós-teste. Na parte superior, os desenhos respectivos do 1,2-dicloroeteno.

Quanto aos demais estudantes deste grupo, FR e GL apresentam o mesmo padrão que TN. LC já apresenta desenhos coloridos no pré-teste, o pós teste interessantemente não foi feito com cores, mas o aspecto tridimensional dos gráficos é substancialmente melhor que no pré-teste. Finalmente, LV já apresenta desenhos coloridos também no pré-teste, e evolui em sua representação geométrica, à semelhança dos outros. Do ponto de vista da TCC, este grupo apresenta pouca assimilação de novos elementos representacionais apresentados pelo programa. Sem acomodação destes elementos com aqueles pré-existentes na sua estrutura cognitiva.

5.1.2 Análise geral

Em uma análise geral do grupo, na representação dos átomos notamos que em ambos os testes o hidrogênio sempre foi representado com um tamanho muito menor que os átomos de carbono e de halogênios (cloro e bromo), em todos os desenhos. Isso mostra que os estudantes possuem o conceito de que o hidrogênio é um átomo menor que os demais, pois conforme citado por eles durante a atividade: “*O hidrogênio é o átomo que tem menor massa, por isso tem que ser o menor de todos no desenho.*” (citação de AC, registrada pela professora). Mas quando introduzimos outros átomos na molécula, este conceito não foi estendido, evidenciado pelos desenhos dos átomos de carbono e halogênios que não apresentaram em muitos casos, diferença de tamanho significativo (estudantes AC, LV, TN, FR, ST e LB). Observamos também, que mesmo dispondo dos recursos, no pré-teste alguns alunos não diferenciaram os átomos por cor (LB e AC).

No pós-teste observamos que além da preocupação dos estudantes em representar cada átomo com uma cor distinta, a diferenciação do tamanho relativo foi bem marcante, o conceito de tamanho antes aplicado somente ao hidrogênio passou a incorporar os demais – os mais marcantes foram AC, LV, ST e LB. Também, conforme observamos anteriormente, metade dos estudantes não representou previamente a estrutura 2D para esboçar a 3D. Na primeira etapa todas as estudantes desenharam primeiro a fórmula plana e a partir dela a configuração 3D (como se convertessem uma na outra), e na segunda etapa 5 estudantes desenharam direto a configuração 3D sem precisar da estrutura plana como ponto de partida.

Ao se comparar este resultado de nossa investigação com outras investigações similares publicadas na literatura, é notável que, como observado por Pavlinic et. al (2007), estudantes preferem outras representações 2D para compreender isomeria, mas que o melhor uso é a combinação de representações 2D e 3D, pois uma complementa a outra. Assim, uma vez internalizadas as representações 2D e 3D (esta melhor internalizada após a atividade), a compreensão deste conceito se torna cognitivamente mais fácil.

Em comparação com o pré-teste, as representações das moléculas produzidas no pós-teste mostraram-se mais elaboradas, com o uso de régua para representar as ligações e um esquema de cores diferenciando os diferentes tipos de átomo. Além disso, os modelos expressados mostraram-se mais completos e corretos sob o ponto de vista de representar adequadamente a estrutura molecular em questão.

É interessante observar que, tanto no pré quanto no pós-teste, os alunos tinham a possibilidade de utilizar qualquer combinação de até 12 cores distintas para desenhar os seus modelos estruturais, além de uma régua. Curiosamente, 2 dos 10 esquemas produzidos no pré-teste foram todos monocromáticos e à mão livre, enquanto que os do pós-teste utilizaram régua e quatro cores distintas. Isso corresponde exatamente ao que ocorre, respectivamente, nos modelos apresentados em sala de aula com giz e quadro-negro na instrução inicial dos alunos e nos modelos apresentados nas telas do ChemSketch. Neste último contexto, vale à pena ressaltar que o esquema de diferenciar átomos por cores distintas foi idêntica à usada no software.

5.2 EXPERIMENTO II

No Experimento I a análise ficou restrita à evolução das representações que pode ser percebida apenas por meio da comparação dos desenhos produzidos nos pré e pós-testes. Esses desenhos são, segundo acreditamos, o resultado da externalização de representações internas que os estudantes utilizaram e foram analisadas mediante os critérios já detalhados. Essa metodologia de análise, no entanto, não foi suficiente para a compreensão do papel das representações 3D no aprendizado de estereoisomeria, uma vez que não temos acesso às representações internas dos estudantes, e podemos cometer erros de julgamento na análise. Como por exemplo, quando não visualizamos algum átomo na molécula e consideramos que o estudante falhou no momento da construção da representação, quando na verdade não sabemos se esse átomo está ausente da representação interna ou não foi colocado por estar fora da perspectiva tridimensional do desenho; ou ainda quando consideramos o padrão de cores escolhido pelo estudante no desenho adequado ou não sob nosso ponto de vista.

Sendo assim, como no primeiro experimento focamos na evolução das representações como lidas segundo categorias que elegemos, no segundo experimento focamos no “como” e “porque” dessa evolução: a saber, realizamos uma análise qualitativa na qual procuramos levantar categorias que os próprios estudantes, ao tentar realizar as tarefas dos pré e pós-testes, consideravam significativas como facilitadoras ou que dificultavam a execução dessas tarefas. Queremos deixar bem claro que a análise foi realizada, nesse segundo experimento, sob o ponto de vista dos estudantes de Ensino Superior – sempre buscando ter acesso às representações internas utilizadas pelos estudantes quando realizaram a tarefa.

Para tanto, realizamos a comparação dos desenhos, mas focamos principalmente nos relatos sobre o processo de construção interna das imagens e posterior representação no papel de estudantes de química antes e após o uso do software ChemSketch por meio de entrevistas baseadas na técnica *Think Aloud*.

Procuramos identificar que esquemas foram utilizados, quais e como as representações (apresentados pelo software ou durante algum processo instrucional) foram internalizadas, bem como as dificuldades encontradas pelos estudantes na execução da tarefa. Após a análise dos dados, várias novos detalhes emergiram que não tem paralelo com categorias levantadas no Experimento I. Isso decorre da análise do processo de formação de imagem mental estudada, que mostrou a riqueza representacional advinda do uso do software. Sendo assim, a análise da cor, tamanho dos átomos e outras categorias levantadas no primeiro

experimento foi realizada, mas sem ser dada a ênfase que preferimos dar a outras categorias mais interessantes.

5.2.1 Análise Pré-testes Experimento II

Após análise das representações e da transcrição das entrevistas dos estudantes GL, DL e RG, LC realizadas após o pré-teste; levantamos os seguintes pontos:

- a) Dificuldades na formação de representações: como visualizar estereoisômeros em 3D, representar compostos cíclicos e usar esquemas para diferenciar as estruturas;
- b) As representações utilizadas estão fortemente ligadas ao último processo instrucional recebido;
- c) A representação externa pode ser diferente da representação interna.

A seguir, detalhamos o levantamento desses pontos que podem auxiliar na compreensão de como os estudantes operam mentalmente a informação para a resolução das tarefas antes do contato com o Software.

a) Dificuldades na formação das representações

Dificuldade em visualizar os estereoisômeros em 3D

Conforme discutido anteriormente, o desempenho do estudante em estereoquímica está fortemente relacionado com a visualização 3D. Para resolver o pré-teste os estudantes deveriam acessar seus esquemas de representação, que foram internalizados por meio de experiências de visualização anteriores em processos instrucionais diversos.

Nessa etapa parte dos estudantes apresentaram dificuldades na construção tridimensional da representação interna (e externa) das espécies. Outra parte afirmou que internamente é capaz de construir a molécula, mas não é capaz de externalizar.

A estudante GL usou a fórmula estrutural e em alguns casos a fórmula estrutural condensada para resolver o pré-teste como podemos observar na Figura 24.

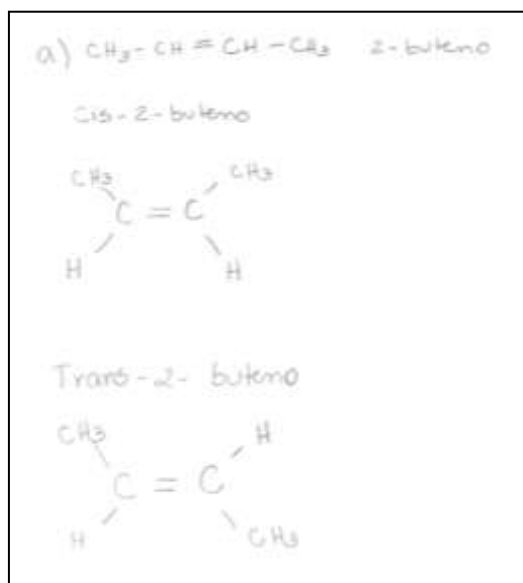


Figura 24: Pré-teste GL

A estudante afirma não conseguir visualizar os estereoisômeros em 3D, e, portanto não desenha as moléculas em nenhuma representação tridimensional.

É, imaginar não consigo, eu olhar assim em 2D até vai, mas em 3D fica um pouco mais difícil. (Estudante GL)

Já a estudante RG usou apenas fórmula estrutural no pré-teste, mas afirma tentar imaginar em 3D.

Assim eu imaginei a moléculazinha. É que eu ainda tenho um pouco de dificuldade de ver o tridimensional dela assim. Sabe mais pro fundo, mas daí eu imaginei ela assim meio que mais pro fundo [...] (Estudante RG)

A estudante LC, por sua vez, afirma conseguir imaginar as espécies tridimensionalmente (representação interna), contudo apresenta dificuldade em externalizar suas representações.

Eu tentei, é que na minha cabeça eu imagino ele em 3D, mas não consigo passar para o papel o que eu imagino. (Estudante LC)

Como podemos observar, pelos comentários de GL, RG e LC, existe uma dificuldade clara em imaginar e externalizar a estrutura 3D das espécies solicitadas.

Dificuldade em representar os compostos cíclicos ou substituintes mais complexos

Todos os estudantes consideram os estereoisômeros de cadeia cíclica mais complexos para representar. Nos trechos a seguir os relatos dos estudantes sobre a resolução do exercício “b” (isômeros do 1,2-dibromociclopropano):

Qual é a parte exata que tu tá em dúvida?(Entrevistador)

É na parte aqui da... do ciclo. . (Estudante RG)

Como assim? O desenho dele. (Entrevistador)

É. O desenho dele assim. [...] (Estudante RG)

Vamos passar para a letra B? (Entrevistador)

Tá. Esta foi mais complicada porque eu não consegui imaginar na minha cabeça o isômero numa cadeia cíclica. (Estudante LC)

Essa foi mais difícil de imaginar, de visualizar ou não? (Entrevistador)

Foi. Das três foi a mais difícil. (Estudante LC)

O segundo um pouco mais difícil de visualizar. Por que como é um ciclo assim, eu tenho mais dificuldade para ver as ligações. Mas também fiz dessa forma. Aqui eu desenhei os orbitais. (Estudante DL)

Ah tá! (Entrevistador)

Mais aqui eu não consegui. Porque não sei mesmo. Não consegui visualizar. (Estudante DL)

A b eu não fiz a trans e a ... porque eu não consegui visualizar assim como era a cis como é que era a trans do dibromociclopropano. (Estudante GL)

Tu só conseguiu chegar do nome ... (Entrevistador)

Isso, a fórmula. (Estudante GL)

a fórmula química e parou. (Entrevistador)

Mas montar a estrutura eu não... (Estudante GL)

Tu não conseguiu montar... (Entrevistador)

Não consegui [...] (Estudante GL)

Além da dificuldade com os compostos cíclicos a estudante GL apresentou dificuldade de visualização quando do aumento da complexidade do substituinte, como no caso dos isômeros do ácido butenodióico.

[...] é mais complicado que a primeira, porque a primeira era um substituinte tipo com três hidrogênios, era um carbono e três hidrogênios, aqui é um carbono mais uma ligação dupla e um oxigênio mais outro oxigênio aí aqui fica mais complexo pra enxergar os dois oxigênios junto na molécula. (Estudante GL)

Alguns dos estudantes, nos trechos a seguir, explicam porque a tarefa de construir os isômeros com cadeia cíclica é difícil de ser resolvida:

O segundo um pouco mais difícil de visualizar. Por que como é um ciclo assim, eu tenho mais dificuldade para ver as ligações. Mas também fiz dessa forma. Aqui eu desenhei os orbitais. (Estudante DL)

Aí foi meio complexo. E para passar pro papel também fica meio confuso. Porque eu imaginei aquele. Tá, primeiro eu desenho igual os três carbonos, porque como ele é um ciclopropano, é uma cadeia de três carbonos fechados. Aí ele tem um dibromo, então ele tem dois bromos. Que são na posição 1 e 2. Como é cíclico não importa o lugar aonde eu colocar. Porque eu posso começar a contar de qualquer um dos lados, vai dar um e dois. Pro *cis* eu imaginei também os bromos mais aqui pertinho, os bromos pro mesmo lado, e os hidrogênios pro outro lado. Aí pra o *TRANS*, eu imaginei a mesma coisa, na minha cabeça só. Tipo esta parte da molécula aqui parada e o carbono invertido. Aí eu só desenhei com bolinhas.

(Estudante LC)

É porque assim, ó. É fácil tu imaginar uma ligação dupla, tu tens muita idéia que ela é uma coisa rígida, que ela tá ali parada. Então fica fácil tu inverter os lados dela, só que num anel cíclico, numa cadeia cíclica, não é tão fácil de tu imaginar. (Estudante LC)

Eu sei que o bromo vai ligar no carbono só que eu não sei direito se esse aqui não fecha um triângulo [...] (Estudante RG)

Existe, como os estudantes acima afirmam, uma dificuldade inerente à construção mental da cadeia cíclica. Esta dificuldade aparentemente surge mentalmente devido ao fato que a imagem mental deste estereoisômero requer a visualização de uma estrutura plana e cíclica juntamente com substituintes em um posicionamento específico a fim de diferenciar as estruturas *cis* e *trans*.

Dificuldade em usar esquemas para diferenciar as estruturas; como cor, tamanho, etc.

Consideramos que o uso de esquemas específicos para diferenciação das estruturas é importante porque auxilia cognitivamente a tarefa de visualização dos estereoisômeros e a diferenciação dos mesmos, por fazer parte dos esquemas de representação. Assim, utilizar cor e/ou tamanho para diferenciar átomos, e outros esquemas para diferenciar ligações deve tornar mais fácil a imaginação dos compostos requeridos.

A estudante GL quando questionada afirma não imaginar cores para os diferentes átomos que compõem os estereoisômeros:

Eu não consigo imaginar cores diferentes. (Estudante GL)

E mesmo representando os isômeros apenas com a fórmula estrutural (Figura 24) afirma diferenciar mentalmente o tamanho dos átomos:

Seria, como é que eu posso dizer... Em relação só ao tamanho porque seria um pouco maior ou menor que o hidrogênio? Seria maior que o hidrogênio. Seria uma bolinha maior. (Estudante GL)

Já a estudante RG imagina cores e considera suficiente para a diferenciação, na sua representação para os isômeros do ácido butenodióico (Figura 25), a estudante utiliza cores diferentes na representação das ligações.

É que eu imagino as cores. Daí eu separo por cores. (Estudante RG)

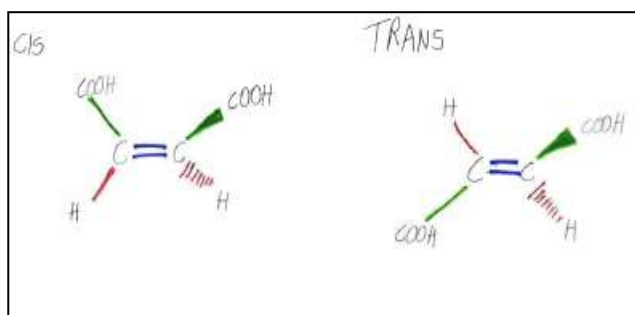


Figura 25: Pré-teste RG

A Estudante DL relata que quando ela imagina os compostos ela diferencia as espécies por tamanhos espontaneamente. Mas imagina cores após ser perguntada pelo entrevistador (por estímulo).

Tu imaginou algum tipo de cores nesses desenhos ou nas tuas imagens da tua cabeça? (Entrevistador)

É como a gente vê sempre na aula aqueles modelos, modelos que o professor usa também, sempre quando tem tipo um elemento desse tipo bromo, iodo, cloro é uma cor diferente, daí sim, geralmente é tipo uma cor vermelha, mas aqui eu só representei a ligação aqui mesmo. Mas na hora de imaginar, na hora que eu fiz isso mesmo eu não imaginei. (Estudante DL)

Huhum.Com relação ao tamanho, alguma coisa?Tu consegue, tu imagina algum tamanho? (Entrevistador)

Aqui eu imagino o maior e aqui eu imagino o menor. (Estudante DL)

Pelos diálogos a seguir entre o entrevistador e as estudantes é possível afirmar que talvez a representação planar seja construída diretamente no papel (externamente), sem uma necessidade de uma representação interna construída conscientemente antes. Possivelmente as cores não são imaginadas, mas as espécies são diferenciadas por tamanho, muito possivelmente uma diferenciação que ocorre apenas entre duas categorias mentais: não-hidrogenóides e hidrogenóides.

E tu imagina ele assim desse jeito, são bolinhas com cores diferentes? (Entrevistador)

É que as cores diferentes, assim, na real eu não imagino ela com cores diferentes, mas com tamanhos diferentes. (Estudante LC)

Da mesma forma que... Primeiro me deixa recapitular... Tu desenhas sem necessariamente imaginar nada? (Entrevistador)

É eu já pensei nas... (Estudante DL)

Só olhando para a fórmula, aí, desculpe para o nome, aí você desenha a fórmula molecular. E aí a partir daqui tu começa partir daqui tu começa imaginar algumas coisas. (Entrevistador)

(faz sinal com a cabeça concordando) (Estudante DL)

Na figura 26 observamos que a estudante LC, apesar de afirmar não usar cores para diferenciar quando constrói os isômeros mentalmente, no momento que faz a representação no papel utiliza cores na diferenciação dos átomos.

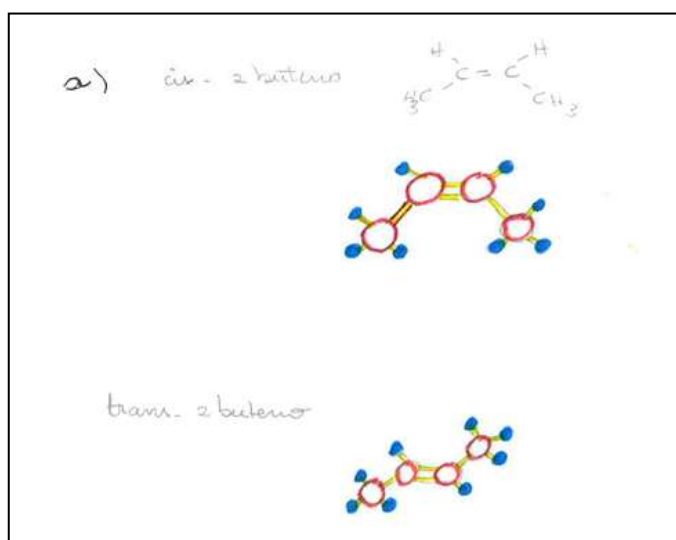


Figura 26: Pré-teste LC

Percebe-se que tamanhos são utilizados para diferenciação das espécies atômicas, mas as cores apenas são utilizadas na representação externa.

b) As representações utilizadas estão fortemente ligadas ao último processo instrucional recebido

As representações utilizadas pelos estudantes, tanto as externas provenientes do Experimento I, quanto às internas que emergiram da descrição durante a entrevista, parecem encontrar-se ancoradas nas representações utilizadas no processo instrucional anterior a essa pesquisa. O uso de modelos concretos, software ou até mesmo as representações desenhadas no quadro negro são citadas pelos estudantes, evidenciando que durante o processo de formação de conceitos, as mesmas foram internalizadas total ou parcialmente durante as aulas de Química, em especial as de Química Orgânica. Todos os estudantes analisados relataram

que durante a execução da atividade recordaram os modelos ou representações utilizados em sala de aula, conforme trechos a seguir:

Eu me lembrei das aulas de orgânica né, que o professor tinha passado, aí primeiramente eu montei aqui pra visualizar melhor, e aí depois lembrei como é que fazia a fórmula, só que em 3D eu não consegui fazer. Daí eu fiz em 2D, como eu me lembrava da aula mesmo (Estudante GL).

[...] É que o professor na aula tem umas moléculas, assim com uns tracinhos assim ele encaixa. Daí eu imaginei como se fosse assim os encaixes das bolinhas naqueles tracinhos. Aí os H tinha cores diferentes do C assim [...] (Estudante RG).

Aí eu imaginei as bolinhas assim... Eu lembro até um dia que a professora levou uns modelos atômicos, que tinha umas bolinhas que tu montava as moléculas... daí eu lembrei disso daí e fiz assim. (Estudante LC)

Um caso curioso que emergiu com certa consistência (três dos quatro estudantes) é da utilização de representações de orbitais moleculares (ligações pi e sigma) quando o objetivo é resolver situações de isomeria geométrica, como pode ser visto na Figura 27²⁴. Naturalmente essa representação não é adequada para a solução das situações propostas por sobrecarregar de informação a imagem mental. Contudo, alguns estudantes utilizaram-na porque associavam principalmente compostos como butenos a esta representação decorrentes de aulas de Química Orgânica. Um expert provavelmente saberia eleger a representação adequada à resolução de cada situação-problema específica (isomeria geométrica ou química orgânica), enquanto um aprendiz pode eleger uma única representação, por ser proveniente da última instrução recebida ou vincular a representação à espécie molecular, e não à situação problema em questão.

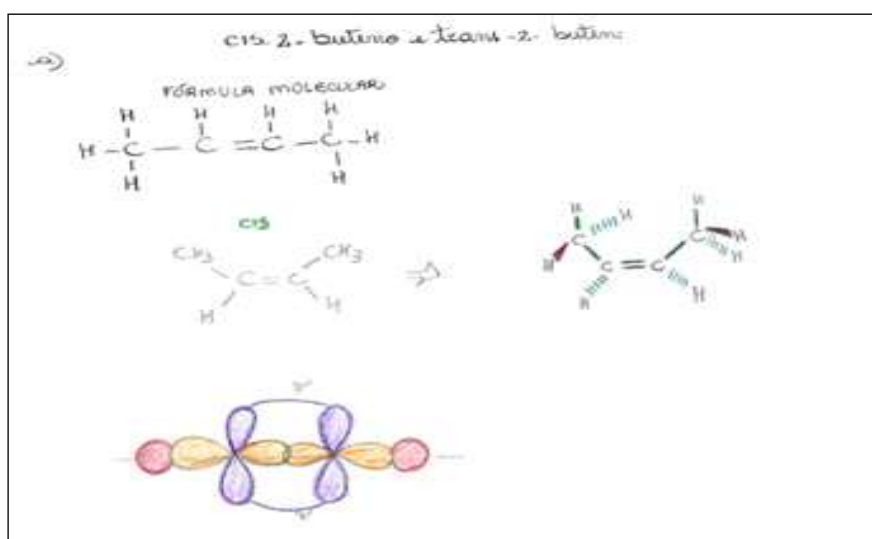


Figura 27: Pré-teste DL

²⁴ É importante notar que nenhum dos desenhos dos orbitais corresponde às moléculas propostas. Isso, contudo, não foi levado em consideração na nossa análise, visto que nosso foco é outro.

O desenho dos orbitais tu fez porque tu quisesses alguma coisa... (Entrevistador)

Sim, porque eu achei interessante, tipo, representar aqui a ligação pi que tem os dois orbitais p. As ligações sigma e aqui né, as ligações com o hidrogênio. (Estudante DL)

Tem algum motivo ligado, quem sabe alguma aula que tu ta tendo agora? (Entrevistador)

Eu estou fazendo agora a Orgânica e Inorgânica junto e a gente vê bastante o orbital. E às vezes fica mais fácil de visualizar também. . (Estudante DL)

A estudante GL usa seus esquemas desenvolvidos durante as aulas de Química Orgânica, ou seja, ela tenta imaginar as representações em termos de orbitais moleculares. Fala também em representação de nuvens eletrônicas quando explica a construção dos isômeros 1,2-dibromociclopropano:

Imaginei primeiramente assim o carbono ligado com mais quatro nuvenzinhas ligado aos outros... (Estudante GL)

É natural que tentar utilizar representações tridimensionais que incorporem informações de orbitais moleculares seja uma tarefa cognitivamente complexa – e no caso de isomeria geométrica, desnecessária. Isto explica a dificuldade em imaginar os isômeros tridimensionalmente.

A internalização dessas representações juntamente com os invariantes operatórios pertinentes ao conceito de estereoisomerismo foi a escolhida na (tentativa) de resolução dos exercícios apresentados no pré-teste. Em resumo, os estudantes acessaram seus esquemas para resolver a classe de situações relativas à construção dos estereoisômeros, algumas vezes, como no caso das representações moleculares, prejudicando a resolução das tarefas.

A mesma estudante tenta inclusive utilizar esta representação mental para imaginar Isômeros cíclicos:

É, as nuvenzinhas e aqui acho que seria os carbonos tetraédricos, seria, com ângulos iguais. O hidrogênio, não sei se... Acho que seriam sim, seria um triângulo, seriam todas iguais aqui sim. (Estudante GL)

RG também utiliza esta representação com nuvens somente para os isômeros do ácido butenodióico:

É que são ácidos, são dois ácidos. Daí eu... como uma nuvenzinha assim... esses ali daí pra montar a moléculazinha. (Estudante RG)

A mistura desses. A nuvem com as quatro bolinhas assim, daí juntas formariam essa... (Estudante RG)

O COOH.(Entrevistador)

Isso. (Estudante RG)

DL também considerou mais difícil usar seu esquema de orbitais moleculares para os isômeros do ácido butenodióico:

E quanto ao esquema dos orbitais moleculares tu imaginou aqui? (Entrevistador)

Não. (Estudante DL)

Não, só no primeiro? (Entrevistador)

No primeiro porque o primeiro era o mais simples digamos assim. Esse daqui como tem o Oxigênio fica mais difícil eu acho. (Estudante DL)

c) Visualização interna x representação externa

Um detalhe interessante observado durante a análise das entrevistas foi que, por vezes, os estudantes visualizam os estereoisômeros de uma maneira e na hora de transportar essa imagem para o papel utilizam outros tipos de representação que julgam mais convenientes.

Durante a entrevista que sucedeu o pré-teste LC foi questionada por qual motivo representava os átomos de carbono com um tamanho maior em relação aos demais como podemos observar na Figura 28. A seguir sua resposta:

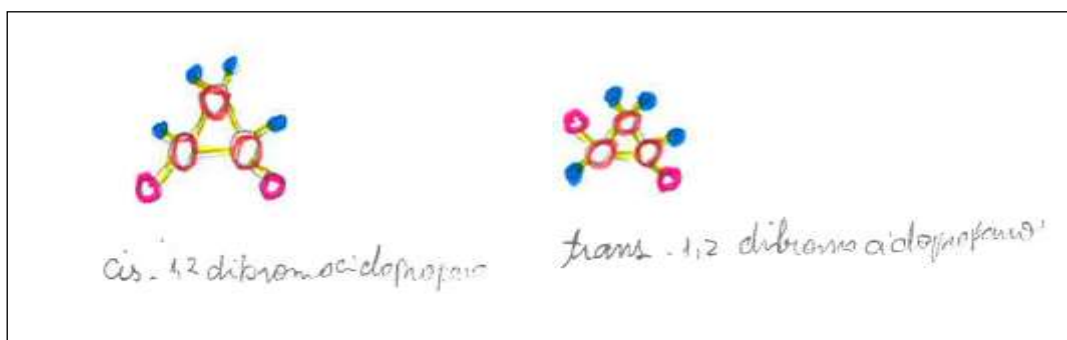


Figura 28: Pré-teste LC

[...] Olha... Eu na minha cabeça imagino o carbono maior que o oxigênio. Mas não é, né? O oxigênio é maior que o carbono, mas na minha cabeça o carbono é maior que o oxigênio. É aquela coisa que em orgânica tu sempre coloca o carbono em primeiro lugar. Em orgânica, tu sempre estrutura o carbono primeiro antes de fazer os outros. Então na minha cabeça ele ficou como sendo o maior [...] (Estudante LC)

Pode-se ver que a representação interna sofre interferência de vários fatores, inclusive considerações acerca da importância relativa de um determinado átomo para o conjunto de situações, ou até mesmo pode-se falar para o campo conceitual específico que estejamos

trabalhando. No campo conceitual da química orgânica, o átomo de carbono é de grande importância e, portanto, foi “aumentado” na representação mental da estudante LC.

A mesma estudante em um trecho analisado anteriormente afirma não enxergar cores, mas utiliza cores na representação. Isto indica, novamente, uma diferenciação entre a representação interna e a externa.

5.2.2 Análise Pós-testes experimento II

Ao organizar os resultados da análise do Pós-teste, decidimos separá-los de acordo com as hipóteses levantadas, a fim de efetivamente responder nossa pergunta de pesquisa por meio de evidências (ou contra-evidências) às nossas hipóteses originais:

Hipótese 1: O aprendizado de representações tridimensionais deve ter um importante impacto no aprendizado de conceitos químicos, em especial dentro da estereoquímica.

A construção/utilização dos modelos 3D computacionais dos estereoisômeros, durante o processo de instrução, auxiliou a resolução das situações apresentadas em um segundo momento no pós-teste. Os estudantes consideraram que ficou mais fácil visualizar os isômeros e construir as representações externas.

Depois da aula com o Software né, **que a gente pode ver as moléculas juntinhas, as bolinhas, ficou mais fácil de desenhar**. Até tava brincando na última aula eu disse agora eu quero desenhar só em 3D. Fica bem mais fácil de visualizar. (Estudante GL)

Pra mim ajudou bastante na que nem ver esse negócio do cis e do trans, de girar a molécula... ajudou bastante assim [...]. Eu enxergava só diferenciando as cores, agora já tem os tamanhos, os tracinhos que liga as bolinhas assim. (Estudante RG)

Uma coisa bem assim, que eu achei bem diferente, **que eu consegui ver e agora eu imagino mesmo quando eu... Fala já penso** é diferenciar os átomos, por exemplo, o cloro e o bromo. Quando tu desenha assim no papel aparentemente é a mesma coisa. Mas quando tu vê a molécula tipo, por exemplo, que a gente fez no programa e agora eu consigo ver, não, são coisas bem diferentes, no caso aqui eu diferenciei por cores né e aqui as ligações também, aqui eu não representei as nuvens, mas as nuvens também de elétrons que tá tipo demonstrando que tem uma, que no caso é um grupamento que tem tipo as nuvens também. Daí eu consigo ver. (Estudante DL)

[...] não sei se estou conseguindo... em escala certa, mas estou conseguindo melhor. (Estudante LC)

[...] mas em termos assim na tua cabeça melhorou alguma coisa? (Entrevistador)

Sim, **melhorou porque eu consegui desenhar**, eu consegui tentar pelo menos passar pro papel o que eu não enxergava. (Estudante LC)

Durante as entrevistas os estudantes relembram situações e representações específicas que tiveram contato durante o uso do software, mostrando que houve uma assimilação dessas diferentes representações e de possibilidades de rotação da estrutura molecular ou outras operações com essas representações²⁵.

[...] tipo se a gente olhar tem várias no programa, tem vários tipos de demonstrações, né, das moléculas. E aí tem umas que aparece tipo assim **como se fosse a nuvem eletrônica, como se fosse, ou se fosse só em forma de pauzinhos**, coisa assim. (Estudante GL)

Primeiro me vem na cabeça as bolinhas, os traços e as bolinhas **porque no programa eu achei bem interessante que daí eles diferenciam o H eles fazem pequenininho** e agora me veio na cabeça o H menor e as outras moléculas maiores assim. Dependendo da outra substância assim. (Estudante RG)

Uma análise mais detalhada que realizamos unicamente para a estudante DL é a análise das imagens do vídeo da entrevista, que reproduzimos alguns trechos abaixo. Essa análise foi feita para documentar que, de fato, imagens mentais eram produzidas durante o discurso do estudante ao explicar seus modelos. É considerado que a utilização de movimentos com as mãos é evidência de geração de imagens mentais correspondentes (MONAGHAN; CLEMENT, 1999). A seguir, pode ser identificado a relação estreita entre os gestos da estudante e seu discurso. A descrição dos gestos encontra-se entre colchetes; ademais existem várias referências à visualização que parece estar ocorrendo durante a entrevista:

Uma coisa bem assim, que eu achei bem diferente, que eu consegui ver e agora eu imagino mesmo quando eu... Fala já penso é *[durante sua explanação, a estudante utiliza a mão direita em forma de esfera para gesticular]* diferenciar os átomos, por exemplo, o cloro e o bromo. Quando tu desenha assim no papel aparentemente é a mesma coisa. Mas quando tu vê a molécula *[utiliza ambas as mãos como se segurando duas esferas e depois as rotaciona formando esferas]* tipo por exemplo que a gente fez no programa e agora eu consigo ver, não, são coisas bem diferentes, no caso aqui eu diferenciei por cores né e aqui as ligações também, aqui eu não representei as nuvens, mas as nuvens também de elétrons *[com ambas as mãos, forma uma massa no ar, gesticula amplamente, indicando a presença da nuvem]* que tá tipo demonstrando que tem uma, que no caso é um grupamento que tem tipo as nuvens também. Daí eu consigo ver. (Estudante DL)

E outra também por exemplo aqui ó, quando a gente, quando eu desenho o ciclobutano, aqui é um quadrado né, mas aqui tipo eu consigo ver uma outra forma, tipo assim *[utiliza ambas as palmas, viradas obliquamente indicando uma perspectiva de 45 graus]* e outra, tipo mexendo *[faz com que ambos indicadores girem em torno do outro]*. No programa da pra mexer né? Ali parece que a coisa tá parada né *[gesticula com ambas as mãos indicando uma figura estática]*, mas aí no programa dá pra mexer *[indicadores em torno do outro girando]* daí tu vê que lá atrás *[indicador esquerdo jogado para frente]* tem uma ligação sabe que as vezes é difícil de representar no papel né. (Estudante DL)

25 Isso, por si só é um indício de aquisição de invariantes operatórios, mas não será discutido por não ser o objetivo deste trabalho de mestrado.

No trecho acima a estudante refere-se ao ciclobutano. A Figura 29 mostra a diferença entre as representações do pré e pós-testes para a estudante DL.

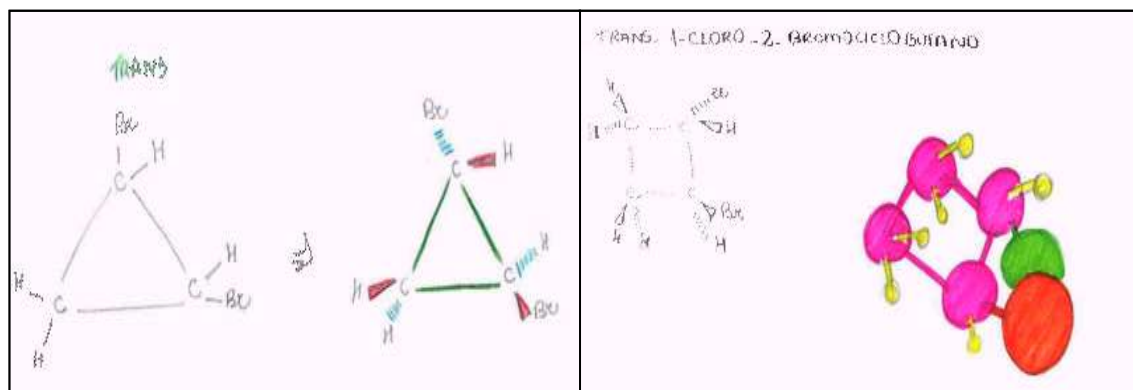


Figura 29: Representação de compostos cíclicos DL

No trecho a seguir a estudante DL indica como ela consegue visualizar compostos 3D, inclusive compostos que não foram os utilizados com o uso do software previamente, indicando que esta habilidade de visualização molecular em 3D pode ser utilizada para representar outras espécies.

É porque quando eu representei, tinha feito reto na primeira ligação. Daí não, não aparecia bem o cloro e daí eu queria representar ele melhor por que ele tava, no caso aqui ele tá nesse plano e aqui ele tá no outro. Daí eu queria. aqui ele tá pra trás ele não saia bem, tipo não aparecia bem. No programa [gesto complexo, com a esquerda espalma, indicando uma imagem sendo vista e com a direita põe a mão perpendicular a esquerda e divide a palma em três segmentos] também tu pode mudar daí tu vê a forma de visualizar melhor todas as ligações né, pra representar ... (Estudante DL)

Tu consegue visualizar então ela girando? Mesmo não sendo elas as que tu trabalhou com aquele programa tu consegue montar elas? (Entrevistador)

Sim. (Estudante DL)

Tá. Legal. (Entrevistador)

Principalmente, tipo, que nem eu te falei antes, essa parte de diferenciar os átomos, tipo que tem eletronegatividade diferente e as ligações de hidrogênio. (Estudante DL)

Huum. (Entrevistador)

Que são as que tipo mais me chamou atenção no programa assim, que eu via mexendo. (Estudante DL)

Huum. (Entrevistador)

Que são várias né? (Estudante DL)

Sim, sim. Aí tu consegue enxergar agora vários átomos assim. (Entrevistador)

Tipo aqui tem duas ligações, eu consigo ver elas girando. (Estudante DL)

Ah tá. (Entrevistador)

Antes eu não conseguia, tipo era mais... (Estudante DL)

Acreditamos que estes trechos constituem forte evidência da assimilação de representações e invariantes associados à estrutura molecular durante o uso do software.

Hipótese 2: Modelos moleculares são extremamente úteis para a familiarização dos estudantes com o estereoisomerismo, e modelos de bolas e palitos melhor representam a mensagem tridimensional.

Por esse motivo o modelo de bolas e palitos foi preferencialmente utilizado pelos estudantes durante a execução das tarefas (como é possível se observar nas figuras já apresentadas desenhadas no pós-teste).

Emergiu da análise um fato curioso, decorrente da representação de bolas e palitos utilizadas pelo ChemSketch, que é também o padrão de vários outros software para esta representação, como pode-se ver em uma rápida análise dos software disponíveis na rede. Esse fato é que como esse tipo de representação não permite a visualização das ligações duplas contidas nos estereoisômeros, essa limitação interferiu, em alguns casos, dificultando a formação de imagens mentais. O exemplo mais importante disso vem da entrevista com a estudante DL:

Tuas figuras estão bem legais mesmo. Vou passar pra próxima. Eu fiquei surpreso até de ver que na segunda folha, é, tu achou essa daqui (dicloroetano) mais simples que a outra (cíclico)? (Entrevistador)

Não.(Estudante DL)

Tu não achou? (Entrevistador)

Não, uma coisa que eu achei que tipo, porque tem uma ligação pi aqui né. A ligação pi, ela é demonstrada não de uma forma diferenciada. Então a gente sabe que a ligação pi não é igual a ligação sigma, mas aqui no caso eu representei da mesma forma. Mas eu sei que tem uma ligação pi que mais aqui não aparece tipo a ligação pi. (Estudante DL)

É algumas pessoas usam dois... (Entrevistador)

Tracinhos... (Estudante DL)

Dois tracinhos né?Poderias fazer. Mas realmente é uma falha dessa visualização de bolinhas e pauzinhos que não necessariamente coloca duas.Tu viu outra que representava a ligação pi? No programa quando clicava lá nas diferentes representações. Tu se lembra de alguma? (Entrevistador)

Não. (Estudante DL)

Nem que forma assim dois pauzinhos, alguma coisa assim? (Entrevistador)

Não porque não parecia no caso quando tu colocava pra ficar no espaço né, tipo a molécula, não representava a ligação pi. (Estudante DL)

Ah tá certo. (Entrevistador)

No desenho de assim normal que desenha a molécula tu representa, mas quando tu coloca para transformar aqui mesmo com as nuvens também não aparece a ligação pi. (Estudante DL)

Por isso que eu perguntei se tu tinha se sentido incomodada por fato dessa representação não ter isso. (Entrevistador)

Não. Não que eu me sinta incomodada, mas tipo eu achei mais difícil que na outra. Eu não sabia como representar, eu queria mostrar, mas não sabia como assim, então podia ser dois pauzinhos. (Estudante DL)

Ah entendi .Tu queria mostrar e não sabia como porque a representação que tu viu não mostrava a ligação pi. (Entrevistador)

É. (Estudante DL)

No entanto tu sabes que tem uma ligação pi mas não consegue expressar isso. (Entrevistador)

DE:É. (Estudante DL)

Tá certo. (Entrevistador)

A não existência de uma representação simbólica para a ligação dupla, como ocorre com outras representações, foi considerada pela estudante como dificultando a execução da tarefa. Podemos observar que outra estudante, RG, também desenha a representação 3D após o uso do software sem um elemento que represente a ligação dupla, e ao lado, a representação planar com um elemento que representa a ligação dupla (Figura 30)26.

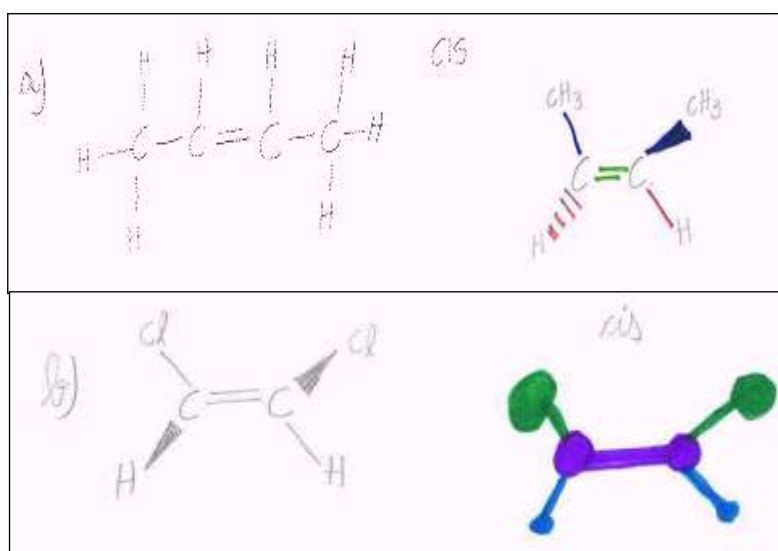


Figura 30: Representações de RG no pré e pós-testes

26 É importante registrar que a notação de estereoquímica está incorreta.

Isso sugere, complementando a hipótese original, que a representação utilizada irá depender da tarefa, pois segundo Vergnaud (1982), haveria representações simbólicas mais potentes do que outras. Para o estudante, nesse caso, o ideal seria combinar representações do tipo paus e bolas com representações do tipo wireframe (que permite a visualização de ligações simples, duplas e triplas), já que a identificação da ligação dupla (ou tripla no caso de outros compostos) é considerado pelos estudantes um componente importante da representação.

Hipótese 3: O uso de representações tridimensionais de espécies químicas estimula o desenvolvimento de habilidades visuoespaciais em estudantes.

Ao que tudo indica após contato com o ChemSketch, o estudante consegue manipular mentalmente a molécula, rotacionar, fazer relações:

Estudante DL referindo-se aos isômeros do 1,2-dicloroeteno representados por ela no pós-teste (Figura 31)²⁷

Aqui da mesma forma então, os dois cloros estão no mesmo plano, lá atrás são dois hidrogênios e aqui então eu vou ter um hidrogênio e um cloro no mesmo plano e aqui um hidrogênio, é, e um cloro aqui tá atrás então por isso que ele tá mais escondidinho. **Daí se virar a molécula vai aparecer ele né.** (Estudante DL)

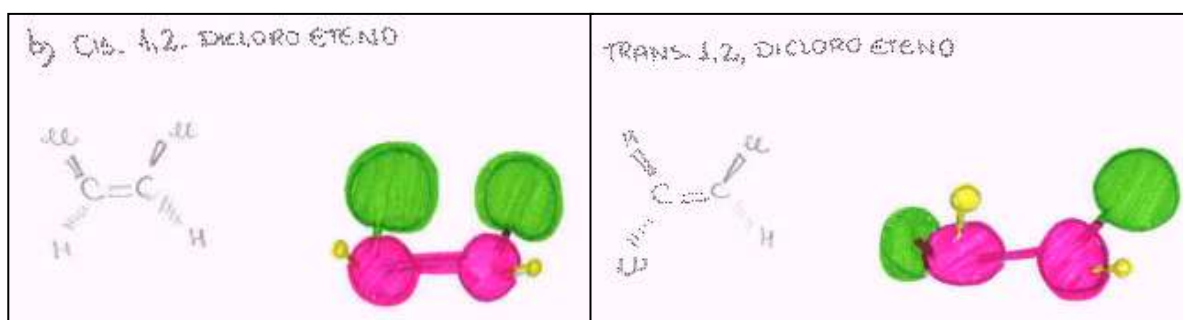


Figura 31: Representação estudante DL no pós-teste.

A estudante afirma que antes não era capaz

Que é uma coisa que antes eu não conseguia entender sabe. Tá ali, mas eu não conseguia entender, que podia tá lá atrás. Aqui teoricamente teria que dar tudo aqui, tá tudo no papel, mas tipo o que eu tava lá atrás o que tava na frente eu não conseguia entender, diferenciar. Agora eu consigo ver que eu posso girar isso daí e lá atrás vai aparecer daí totalmente o cloro digamos assim. (Estudante DL).

²⁷ Do ponto de vista químico, a molécula é planar, e a estudante não considerou a molécula planar no seu desenho.

A Figura 31 mostra indícios de uso de perspectiva para representar uma estrutura molecular 3D, onde se podem observar átomos parcialmente ocultos por outros que estariam à frente deles. A estudante afirma que não era capaz de manipular mentalmente as espécies antes do contato com o software. Contudo, menciona ter tido contato em sala de aula com modelos moleculares concretos:

O professor mostrava tipo com laptop, alguma coisa (Entrevistador)

É. (Estudante DL)

Ah, tá. Tu já chegou a ter contato com aqueles...

Modelinhos?

Sim. (Entrevistador)

Só visualizando, nunca montei, desmontei. (Estudante DL)

Huhum. (Entrevistador)

O professor trabalha com isso também. Até, inclusive ele explicou aqueles confôrmeros sabe? (Estudante DL)

Ele explicando com aquilo lá tipo, fica bem mais fácil né? Mas eu não, eu nunca

E mesmo ele te explicando tu não tava tanto na cabeça como depois que...

(Entrevistador)

É, não. (Estudante DL)

Tu acha que isso é porque, porque tu... (Entrevistador) **DL:** É porque tipo no programa eu pratiquei mais né.

Huhum. (Entrevistador)

E vai ver eu teria que ter pego a molécula e tentar desmontar e ficar olhando. (Estudante DL)

Portanto, a própria estudante DL afirma da sua necessidade de manipular os modelos, e a mera observação dos mesmos não é suficiente para o desenvolvimento de competências visuoespaciais. É possível, no entanto, que se o professor propor várias situações com diferentes níveis de complexidade, ao mesmo tempo em que permite o uso (manipulação) de modelos concretos, de forma análoga a atividade feita aqui, os resultados sejam semelhantes.

LC também dá evidências, durante a entrevista que conseguiu desenvolver a capacidade de visualização espacial e percepção espacial, conseguindo visualizar uma espécie molecular de forma mais consistente, que a mesma chama de “toda a molécula”. Estimulada, concorda com o entrevistador que o processo de construção de visualização molecular tridimensional (que é ensinado normalmente em sala de aula) ficou mais rápido.

Vamos supor que a atividade não fosse pra você desenhar nada, mas apenas pra você enxergar as moléculas. Então você perceberia alguma diferença, você poderia me dizer? (Entrevistador)

Sim... Dá uma diferença, aí eu não sei explicar, mas tu tens uma visão mais “ampla” assim da molécula (começa a gesticular) porque por mais que tu queiras na maioria

das vezes tu vais enxergar uma coisa reta, teu cérebro te força a tu estruturar na tua cabeça uma molécula planar, sempre, pelo menos em mim é assim. Sempre qualquer molécula tu sempre pensa nela em forma planar primeiro, e com isto te ajuda bastante. (Estudante LC)

Com o software tu quer dizer? (Entrevistador)

É. (Estudante LC)

Aí tu consegue deixar de ser “forçada” a ver esta estrutura planar? E começa a enxergar de forma diferente... de forma natural ou quando tu quer assim? (Entrevistador)

É porque eu geralmente enxergo ela de forma planar depois eu começo (gesticula os dedos espalhando-os) por que não é fácil, elas tem muita geometria, tem muita coisa que influencia pra um átomo ser mais próximo do outros, mais distante, pra ligação ser mais aproximada, ser mais distante, então eu enxergo ela sempre planar primeiro, daí depois que tu vai pensando ah, mas tem uma eletronegatividade, que vai afetar isto aqui, aí tu começa a imaginar, sabe. (Estudante LC)

Aí então este processo então ficou mais rápido... (Entrevistador)

Ficou mais rápido (Estudante LC) (D1)²⁸

Hipótese 4: Após a internalização da representação e desenvolvimento dos invariantes o estudante será capaz de resolver melhor situações problemas que envolvam o uso de pensamento visuoespacial.

O uso do software possibilitou, segundo os estudantes, a visualização e posterior representação no papel dos isômeros de cadeia cíclica, tarefa considerada no pré-teste como uma das mais difíceis.

É, estes isômeros planar tipo *cis/trans* com ligações duplas eu nunca tive dificuldade de visualizar eles. Agora, isômeros de cadeia cíclica, isto melhorou bastante, foi bem melhor, eu não conseguia imaginar antes. (Estudante LC) (D2)

A visualização sem mediação do computador representa um ganho em autonomia e competências que indica a internalização de representações e invariantes operatórios associados.

Até o grupamento CH₃ agora tá bem espaçadinho, cada um deles... Você sempre colocou direitinho o tamanho dos átomos... (Entrevistador)

É que eu procura organizar isto pelo tamanho dos átomos. (Estudante LC)

Tá bem claro a tua figura! Tu notaste esta clareza na tua cabeça também? (Entrevistador)

Sim. (Estudante LC)

Se tu comparasses antes com o depois... Porque tinha um grupamento no pré-teste que era a respeito do CH₃, não tinha? (Entrevistador)

²⁸ Identificamos este diálogo como D1 para futura referência logo abaixo. Também identificamos os diálogos D2 e D3 a seguir.

acho que era uma molécula parecida com esta (Estudante LC)

e quando tu tinhas que fazer a tarefas antes a fazer a tarefa agora tu notas uma melhora na... (Entrevistador)

Sim, porque antes... Como é que eu vou te dizer... Por exemplo ali as metilas eu não conseguia na minha cabeça eu agrupava elas... Agora ta mais fácil de ver. (Estudante LC)

mesmo não estando junto do computador tu consegues ver? (Entrevistador)

Uhum... (Estudante LC)

Isto é parecido com o do computador, tu se lembras? (Entrevistador)

Olha, eu não me lembro. (Estudante LC)

Interessante... então tu não se lembras mas consegues enxergar bem direitinho isto, né? (Entrevistador)

Sim. (Estudante LC) (D3)

Como pode ser lido no discurso dos estudantes acima, houve uma sensível melhora na sua capacidade de resolver problemas de isomeria que envolvam o uso de pensamento visuoespacial. Não apenas, essa melhora é também observada nos seus desenhos do pós-teste.

Hipótese 5: O processo de evolução dos conceitos e representações ocorreu de uma forma que pode ser lida dentro do referencial de Campos Conceituais, no sentido que foram se aperfeiçoando e incorporando elementos representacionais importantes à resolução de situações-problema em Química, como elementos estruturais tridimensionais com o advento da estereoquímica).

Essa hipótese encontra-se comprovada pela forma que a análise procedeu, e diversos diálogos foram mostrados nos quais um progressivo domínio de elementos representacionais históricos que melhoraram a capacidade do estudante de visualizar espécies moleculares tridimensionalmente e, portanto, resolver problemas em estereoquímica. Ver diálogos D1, D2 e D3, por exemplo. Outros exemplos reproduzidos antes também confirmam esta hipótese.

Aparentemente, o uso do software para resolução de problemas de Isomeria Geométrica possibilitou o estudante ter contato com representações diversas, mencionadas por eles. Além disto, estas representações não foram adquiridas “sozinhas”. Ao manipular as representações com o mouse os estudantes instruíam o computador a rotacionar a molécula, mostrando regiões específicas da molécula que eram ocultas – “...Agora eu consigo ver que eu posso girar isso daí e lá atrás vai aparecer daí totalmente o cloro digamos assim. (Estudante DL)”. E assim internalizaram estas operações, que permitiu o seu cérebro, de forma independente, ser mais capaz de manipular mentalmente estas representações. Isto

representaria, aos nossos olhos, a aquisição de invariantes operatórios associados às representações e às situações propostas, ou seja, aquisição dos elementos do conceito.

Principalmente a visualização das representações 3D auxiliaram os estudantes resolver as situações que antes não conseguiram. Como por exemplo, a representação dos estereoisômeros de cadeia cíclica. Para Vergnaud, a representação deve ajudar o estudante a resolver problemas que sem ela, não seria capaz de resolver. Assim, o uso do software possibilitou o aprendizado de novas representações que ela pudesse optar utilizar conforme a complexidade da tarefa e a necessidade específica da situação. O diálogo a seguir com a estudante GL mostra como ela atribui ao software uma melhor diferenciação entre as estruturas *cis* e *trans* mentalmente e em representações externas (desenho, ver Figura 32).

Interessante, com relação à diferenciação de estrutura *cis* e *trans* tu, tá bem claro agora pelo menos pra mim assim agora que esse átomo aqui na frente esse aqui atrás, esse atrás esse na frente De alguma forma isso mudou na tua cabeça também ou só no desenho. (Entrevistador)

Não, muda também, na cabeça. (Estudante GL)

Em relação antes e depois tu... (Entrevistador)

Sim. Dá pra, antes eu não soube fazer tanto é que tinha um outro que era o do ciclopropano e eu não sabia fazer o *cis* e o *trans*. Eu não conseguia enxergar assim o que mudava, daí agora eu consigo enxergar. A posição desse vem pra cá esse vai pra lá. (Estudante GL)

Tu atribui isso a que ao... (Entrevistador)

A utilização do software (Estudante GL)

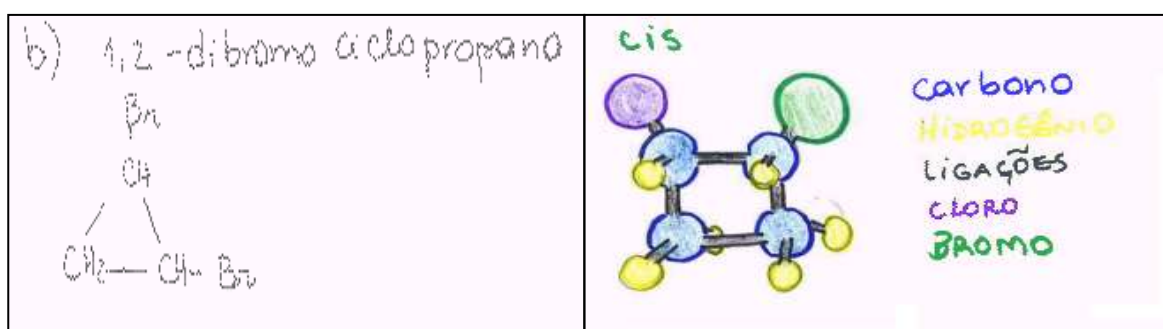


Figura 32: Representação dos compostos cíclicos estudante GL no pós-teste

Finalmente, a última hipótese refere-se à leitura do aprendizado documentado acima.

Hipótese 6: Se a representação vinculada ao conceito evolui, consideramos que ocorreu uma evolução conceitual.

Talvez uma representação seja desprovida de sentido se não forem fornecidos invariantes operatórios que demonstrem como esta representação pode ser utilizada para resolver uma situação, tal qual uma palavra é desprovida de sentido fora de um contexto específico. Sendo assim, a evolução representacional, que na nossa hipótese documentaria uma evolução conceitual deve ser lida:

“Se a representação vinculada ao conceito evolui, com a aquisição de invariantes operatórios associados, e o reconhecimento de situações onde a representação é reconhecida como mais poderosa para a resolução destas situações; então, e somente então, podemos afirmar que há evolução conceitual”. Isto seria a reformulação da nossa última hipótese.

No Experimento I apenas documentamos uma evolução representacional porque nossos instrumentos apenas detectavam esta evolução. A utilização de entrevistas tipo *think aloud*, bem como pré e pós-testes forneceu elementos para documentar a aquisição de representações, bem como onde e de que forma estas representações foram utilizadas, e a importância relativa que cada estudante deu a estas representações. Permitiu também documentar que esta capacidade representacional subsiste mesmo sem a utilização do software, podendo ser considerada um ganho cognitivo do estudante.

6 CONCLUSÃO

Iniciamos este trabalho com o objetivo de investigar se o uso de modelos computacionais tridimensionais auxilia o aprendizado do conceito de isomeria geométrica em estudantes do ensino médio e superior. Para tanto, escolhemos o referencial teórico de Campos Conceituais de Gerard Vergnaud. Com que intuito escolhemos o referencial de Campos Conceituais? A escolha deste referencial foi motivada pela experiência do orientador com o mesmo, pelo fato deste ser um referencial novo para a área – do ponto de vista da investigação em Ciências, mas principalmente pela importância que dá ao aprendizado de representações associadas à um conceito específico. Até onde sabemos, esta é a primeira dissertação (ou tese de doutoramento) que tenta fazer uso deste referencial na Educação Química no país; este referencial é comum na matemática.

A escolha do Estereoisomerismo, e em particular a Isomeria Geométrica foi inicialmente intuitiva, tendo sido escolhida desde o trabalho de conclusão de graduação da autora. Posteriormente, ao investigar a história da evolução das representações em estereoisomeria, percebemos que o estereoisomerismo talvez seja o campo da química mais dependente de uma evolução representacional histórica para sua evolução como ciência. Este foi um dos nossos primeiros resultados investigativos, que tendo sido inicialmente iluminado pelo referencial Vygotskyano (devido a importância que o signo simbólico possui na mediação dos processos cognitivos e por considerar que os mesmos são fruto de uma construção sócio-histórico-cultural), percebemos que poderia ser também igualmente iluminado pelo referencial de Vergnaud, ao trazer naturalmente o foco à evolução representacional.

Ao projetar o primeiro experimento, pensamos em utilizar unicamente as representações externas que os estudantes produziram tanto em pré-testes como em pós-testes, após uso do ChemSketch. A análise destes resultados nos ajudou a identificar elementos e categorias de evolução representacionais, que quando confrontadas com as próprias representações produzidas pelo ChemSketch, mostraram-se ancoradas nas representações do mesmo (no pós-teste), ou de alguma outra instrução recebida (pré-teste). Este resultado foi publicado em um artigo na REEC (Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias da Espanha), e a conclusão final do mesmo pode ser lida:

Ao que tudo indica, há uma clara tendência dos alunos internalizarem as representações e seus invariantes utilizados durante a última instrução recebida, reproduzindo-as espontaneamente quando solicitados a resolver problemas envolvendo os conteúdos em questão. Ocorre, porém, que as representações mais sofisticadas do pós-teste também foram as mais corretas e menos propensas a erro.

Isso sugere fortemente tratar-se de um impacto cognitivo da estrutura representacional em si, a qual, por sua vez, é fruto da modalidade de instrução, com aquela oriunda do ensino com a utilização de um mecanismo de processamento extracerebral para desenho e rotação visual de espécies moleculares (computador) sendo a mais vantajosa. (RAUPP et al, 2010)

Esta é uma conclusão viável – porém ousada – visto que tivemos acesso unicamente às representações externas produzidas em desenhos.

Sendo assim, com o objetivo agora de substanciar melhor a conclusão acima, procedemos a um segundo experimento, onde re-desenhamos o processo de tomada de dados para incluir, junto com os testes, uma entrevista dentro do modelo “*think aloud*”. Os resultados desta segunda intervenção foram discutidos na última análise efetuada, e parecem indicar que, de fato, a nossa conclusão supracitada é sustentada. Conseguimos um conjunto de evidências, durante a entrevista realizada logo após o pré-teste, que indicam que: os estudantes tem uma dificuldade para representar espécies químicas tridimensionais externamente e, também em alguns casos internamente; tem dificuldades em utilizar esquemas para diferenciação de átomos ou ligações; que as representações utilizadas estão, de fato, ligadas a última instrução recebida; e que podem existir diferenças entre a representação interna e a elegida para representar a molécula externamente.

Após o uso do software, dentro da análise dos resultados do segundo experimento, identificamos que os estudantes: forneciam evidências que tinham mais facilidade de utilizar representações; faziam referência direta representações utilizadas pelo programa ao explicarem suas representações do pós-teste; fornecem ricas imagens mentais onde operam livremente com as espécies moleculares, fazendo referências à percepção (onde parecem operar com o software mesmo não estando em contato com ele); elegem o modelo de bolas e palitos para representar as espécies moleculares; utilizam elementos representacionais do software (cores, tamanhos diferentes de átomos, ligações, perspectiva 3D) para representar as espécies, tendo ganhos na geração de imagens mentais, conseguindo inclusive ver a molécula como um “todo” e resolvendo regiões que declaradamente eram confusas na sua imagem molecular anteriormente. Este ganho cognitivo também resultou, como discutimos, em um ganho na diferenciação de isômeros *cis* e *trans*, principalmente de compostos cíclicos, evidenciando uma maior competência na resolução da situação fundamental de isomeria. Finalmente, obtivemos evidências de uma evolução não apenas na representação, mas nos invariantes associados a elas e na identificação das situações de isomeria geométrica.

Portanto, reformulamos nossa hipótese inicial para “Se a representação vinculada ao conceito evolui, com a aquisição de invariantes operatórios associados, e o reconhecimento de

situações onde a representação é reconhecida como mais poderosa para a resolução destas situações; então, e somente então, podemos afirmar que há evolução conceitual”.

Concluimos, portanto, este trabalho, afirmando que é possível que a utilização de representações tridimensionais de modelos moleculares, em software de representação destes modelos, auxilie de fato no aprendizado do conceito de Isomeria Geométrica. Ancoramos esta afirmação no referencial de Gerard Vergnaud de que um conceito é um triplo de Situações, Representações e Invariantes que identificamos terem evoluído em conjunto e dialogicamente, não sobressaindo a evolução de um destes elementos em particular sem a correspondente evolução dos outros. Em particular, observamos uma notável evolução nas representações, culminando em um amplo uso da representação tridimensional, que é mais evidente que os demais elementos do triplo. Um ponto importante que queremos ressaltar é que é sempre possível, principalmente para um químico experiente, diferenciar os isômeros utilizados apenas a representação planar. Contudo, há evidência nos nossos resultados que a utilização das representações tridimensionais com o uso do software auxilia uma parte dos estudantes a resolverem principalmente o caso dos isômeros cíclicos. Isto indica que estes estudantes em particular foram especialmente auxiliados por este método de instrução.

Também obtivemos forte evidência que as representações e invariantes adquiridos durante o contato com o software encontram-se disponíveis cognitivamente aos estudantes, mesmo sem o contato com o software, como um recurso extra e que pode ser utilizado para resolver situações de isomeria que por ventura irão encontrar em sua vida acadêmica e profissional. Recomendamos, portanto, o uso deste tipo de software tanto no Ensino Médio, como Superior, desde que utilizados em conjunto com situações de progressiva dificuldade, e que promovam o aprendizado de conceitos de estereoquímica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDREU M. P; RECENA, M. C. P. Influência de um objeto de aprendizagem nas concepções de estudantes do Ensino Médio sobre ebulição da água. **Revista Novas Tecnologias na Educação**, Porto Alegre, v. 5, p. 1-5, 2007. Disponível em: <<http://www.cinted.ufrgs.br/renote/dez2007/artigos/4jMaxwell.pdf>>. Acesso em 12 de abril 2009.

BALABAN, A. T. Visual Chemistry: Three-Dimensional Perception of Chemical Structures. Amsterdam, **Journal of Science Education and Technology**, v. 8, n.4, p. 251-255, 1999.

BARAIS, A. W.; VERGNAUD, G. Students' conceptions in physics and mathematics: biases and helps. In Caverni, J.P., Fabre, J.M. and Gonzalez, M. (Eds.). **Cognitive biases**. NorthHolland: Elsevier, p. 69-84, 1990.

BELL, M. S. **Lavoisier no Ano um**. São Paulo: Companhia das Letras, 2007.

CHITTLEBOROUGH, G.; TREAGUST, D. F. Modelling ability of non-major chemistry students and their understanding of the sub-microscopic level. Ionina, **Chemistry education research and practice**, v. 8, n. 3, 2007. Disponível em: < <http://www.uoi.gr/ceerp>>. Acesso em: Mar. 2009.

CHOI, J. Sex Differences in Spatial Abilities in Humans: Two Levels of Explanation. In: VOKEY, J. R.; ALLEN, S. W. (Eds.) **Psychological Sketches**. 5.ed. Department of Psychology and Neuroscience, Lethbridge: University of Lethbridge, 2001.

COTTON, D. GRESTY, K. Reflecting on the think aloud method for evaluating e-learning. **British Journal of Educational Technology** v. 37 n.1 p. 45-54, 2006.

CROSSLAND, M. P. **Historical Studies in the language of chemistry**. London: Heinemann, 1962.

DA COSTA, S. S. C.; MOREIRA, M. A. Knowledge-in-action: na example with rigid body motion. **Research in Science & Technological Education**, v. 23, n. 1, p. 99-122, 2005.

ESTEBAN, S. Liebig–Wöhler Controversy and the Concept of Isomerism. Madison, **Journal of Chemical Education**, v. 85, n.9, p. 1201-1203, 2008.

FELTRE, R. **Química - Química Orgânica v. 3**, 6ª Ed., São Paulo: Editora Moderna. São Paulo, 2004.

FLEMING, S. A.; HART, G. R.; SAVAGE, P. B. Molecular orbital animations for organic chemistry. Madison, **Journal of Chemical Education**, v. 77, n. 6, p.790-793, 2000.

FLOR, C. Leituras sobre o estabelecimento de uma Linguagem Química no Ensino Médio. In: XVI Encontro de Química da Região Sul. **Anais do XVI Encontro de Química da Região Sul**. Blumenau: Editora da FURB, 2008.

FONSECA, M. R. M. **Química: química orgânica**. São Paulo: FTD, 1992.

FRANCHI, A. **Considerações sobre a teoria dos campos conceituais**. In: Educação matemática: uma introdução. São Paulo: Educ, 1999.

FREITAS, N. K. Representações mentais, imagens visuais e conhecimento no pensamento de Vygotsky. Rio de Janeiro, **Ciências & Cognição**. Ano 2, v. 6, 2005. Disponível em <<http://www.cienciasecognicao.org>>. Acesso: 17 maio 2009.

GABEL, D., The complexity of chemistry and implications for teaching, In B. J. Fraser and K. G. Tobin (Eds.), **International handbook of science education**. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer, p. 233-248, 1998.

GABEL, D. Improving teaching and learning through chemistry education research: A look to the future. Madison, **Journal of Chemical Education**, v. 76, n. 4, p. 548-554, 1999.

GABEL, D. Use of the Particulate Nature of Matter in Developing Conceptual Understanding. Madison, **Journal of Chemical Education**, v. 70 n. 3, p. 193-194, 1993.

GABEL, D.; SHERWOOD, R.D.; ENOCHS, L. Problem-Solving Skills of High School Chemistry Students. Hoboken(NJ), **Journal of Research in Science Teaching**, v. 21, n. 2, p. 221-233, 1984.

GASTALDO, L. F. Módulos didáticos hipermídicos para o ensino de eletromagnetismo e óptica no Ensino Médio, **XVII Simpósio Nacional de Ensino de Física**, São Luis: Sociedade Brasileira de Física, 2007. Disponível em: <<http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/snef/xvii/sys/resumos/T0244-1.pdf>>. Acessado em 25 de outubro de 2009.

GILBERT, J. K.(ed) **Visualization in Science Education**, Dordrecht: Springer, 2005.

GANARAS, K; DUMON, A.; LARCHER, C. Conceptual integration of chemical equilibrium by prospective physical sciences teachers. Ionina, **Chemistry education research and practice**, v. 9, p. 240-249, 2008. Disponível em: < <http://www.uoi.gr/cerp>>. Acesso em: Mar. 2009.

GOLDFARB, A. **Da Alquimia a Química: um estudo sobre a passagem do conhecimento mágico-vitalista ao mecanismo**, São Paulo: Landy, 2001

GRINGS, E. T. O; CABALLERO, C.; MOREIRA, M. A.; Possíveis Indicadores de Invariantes Operatórios apresentados por estudantes em conceitos de termodinâmica. **RBEF**, v. 28, n. 4, p. 463-471, 2006.

HABRAKEN, C. Perceptions of chemistry: Why is the common perception of chemistry, the most visual of sciences so distorted? Amsterdam, **Journal of Science Education and Technology**, v.5, n.3, p. 193–201, 1996.

HABRAKEN, C. Integrating into Chemistry Teaching Today's Student's Visuospatial Talents and Skills, and the Teaching of Today's Chemistry's Graphical Language. Amsterdam, **Journal of Science Education and Technology**, v. 13, n. 1, 2004.

HOLMYARD, E. J. **Alchemy**. New York: Dover, 1990.

HOUAISS, A.; VILLAR, M. S.; FRANCO, F. M. M. **Dicionário Houaiss da língua portuguesa**. Rio de Janeiro: Objetiva, 2004.

IUPAC, **Compendium of Chemical Terminology**, 2ª ed., A. D. McNaught, A. D.; Wilkinson, A. (Orgs.). Oxford: Blackwell. Disponível em: <<http://old.iupac.org/publications/compendium/>>. Acesso em 11 de Abr. de 2009.

JOHNSTONE, A.H. Why Science difficult to learn? Things are seldom what they seem. Hoboken, **Journal Computer Assisted Learning**, v. 7, n.2, 1991.

JONES, M. B. Molecular modelling in the undergraduate chemistry curriculum. Madison, **Journal of Chemical Education**. v.78, n.7. p.867-868, 2001.

JONES, L.; JORDAN, K.; STILLINGS,N. Molecular visualization in science education. In: **Molecular Visualization in Science Education Workshop**, Arlington, VA, 2001. Acesso em 02 abr 2009. http://pro3.chem.pitt.edu/workshop/workshop_report_180701.pdf

JONES, L.; JORDAN, K.; STILLINGS,N. Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. Londres, **Chemistry Education Research and Practice**. v. 6, n. 3, p. 136-149, 2005.

KEIG, P. F.; RUBBA, P. A. Translation of representations of the structure of matter and its relationship to reasoning, Gender, Spatial Reasoning, And Specific Prior Knowledge. Hoboken(NJ), **Journal of Research in Science Teaching**, v. 30, p.883-903. 1993.

KOZMA, R.; CHIN, E.; RUSSELL, J.; MARX, N. The roles of representations and tools in the chemistry laboratory and their implications for chemistry learning. Londres, **Journal of the Learning Sciences**, v. 9, n.2, p. 105-143, 2000.

KURBANOGLU, N. I.; TASKESENLIGIL, Y.; SOZBILIR, M. Programmed instruction revisited: a study on teaching stereochemistry, Ionina, **Chemistry Education Research and Practice**, v.7, n.1, p.13-21, 2006.

LE COUTEUR, P.; BURRESON, J. P. **Os botões de Napoleão: As 17 moléculas que mudaram a história**. Tradução Maria Luiza Borges. Rio de Janeiro: Zahar, 2006.

MACHADO, A.H.; MOURA, A.L.A. Concepções sobre o papel da linguagem no processo de elaboração conceitual em Química. **Revista Química Nova na Escola**, v. 1, n. 2, p. 27-30, 1995.

MATHEWSON, J. H. Visual-Spatial Thinking: An Aspect of Science Overlooked by Educators. Hoboken (NJ), **Science Education**, v. 83, n.1, p33-54, 1998.

MONAGHAN, J.M.; CLEMENT, J. Use of a computer simulation to develop mental simulations for understanding relative motion concepts. **International Journal of Science Education**., v. 21, n. 9, p. 921– 944, 1999

MONTENEGRO, G. **Habilidades Espaciais: exercícios para o despertar de idéias**.

Porto Alegre: SCHDS, 2003.

MOREIRA, M. A. A teoria dos campos conceituais de Vergnaud, o ensino de ciências e a pesquisa nesta área. Porto Alegre, *Investigações em Ensino de Ciências*, v.7, n.1, p. 7-29, 2002.

MORTIMER, E. F.; **Evolução do atomismo em sala de aula: mudança de perfis conceituais**. TESE (Doutorado em Educação), São Paulo: Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, 1994.

MORTIMER, E. F. O Significado das Fórmulas Químicas. São Paulo, **Química Nova na Escola**, n. 3, p. 19-21, 1996.

NAKHLEH, M. B. Why some students don't learn Chemistry. Madison, **Journal of Chemical Education**, v.69, n. 3, p. 191-196, 1992.

OBRIST, B. Visualization in Medieval Alchemy. Berlin, **HYLE - International Journal for Philosophy of Chemistry**, v. 9, n.2, p.131-170, 2003.

OKI, M. Controvérsias sobre atomismo no século XIX. São Paulo, **Química Nova**, v. 32, n. 4, p. 1072-1082, 2009.

PARK B.S. The 'Hyperbola of Quantum Chemistry': the Changing Practice and Identity of a Scientific Discipline in the Early Years of Electronic Digital Computers (1945-65). Londres, **Annals of Science**, V. 60, N. 3, p. 219-247, 2003.

PAVLINIC, S.; BUCKLEY, P.; BURNS, J.; WRIGHT T. Computing in stereochemistry – 2D Or 3D representations? In: **Research in Science Education - Past, Present, and Future**, Dordrecht: Springer. 2007.

PEKDAĞ, B.; MARÉCHAL, J.-F. Influence of the Relations Between Picture and Text of Chemical Education Films on Conceptual Change. Saint-Font, **Didaskalia**, v. 28, p. 55-84, 2006.

RAUPP, D. T.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da Química Computacional e sua contribuição para educação em química. Novo Hamburgo, **Revista Liberato**, v. 2, p. 13-22, 2008.

RAUPP, D. T.; SERRANO, A.; MOREIRA, M. A. Desenvolvendo habilidades visuoespaciais: uso de software de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica em química. Porto Alegre, **Experiências em ensino de ciências**, v. 4, n. 1, 2009a.

RAUPP, D. T.; SERRANO, A.; MOREIRA, M. A. A evolução histórica da linguagem representacional química: uma interpretação baseada na teoria dos campos conceituais. Submetido ao VII ENPEC. 2009b.

RAUPP, D.; MARTINS, T. L. C.; SOUZA, B. C.; SERRANO, A.; Uso de ferramentas visuoespaciais computacionais no ensino de isomeria geométrica: um estudo baseado na teoria de mediação cognitiva. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*- v. 9, n.1,p. 18-34 ,2010. <http://www.saum.uvigo.es/reec>

ROMERO, J. R. **Fundamentos de estereoquímica dos compostos orgânicos**. Ribeirão Preto: Holos, 1998.

ROQUE, N. D.; SILVA, J. L. A Linguagem Química e o Ensino da Química Orgânica. São Paulo, **Química Nova**, v.. 31, n. 4, p. 921-923, 2008.

SEABRA,R.; SANTOS,E. Proposta de desenvolvimento da habilidade de visualização espacial através de sistemas estereoscópicos. 4º Congreso Nacional y 1ro. Internacional Rosario, Argentina – 6 a 8 de octubre de 2004

SOLOMONS, T. W. *Graham Química orgânica / T. W. Graham Solomons ; tradução Horacio Macedo*. 6. ed. Rio de Janeiro : LTC, 1996. v., il.

STAINS ,M.; TALANQUER, V. Classification of chemical reactions: Stages of expertise. Hoboken(NJ), **Journal of Research in Science Teaching**. v.45, n.7, p. 771, 2007.

STIEFF, M.; BATEMAN, R. C.; UTTAL, D. H. Teaching and learning with threedimensional representations, In: T, J.K. (ed), **Visualization in Science Education**, Dordrecht: Springer 2005.

STRATHERN, P. **O sonho de Mendeleiev: a verdadeira história da química**. Rio de Janeiro: Zahar, 2002.

TASKER R.; DALTON R. Research into practice: visualization of the molecular world using animations, Ionina, **Chemistry Education Research and Practice**, v. 7, 141-159, 2006.

TVERSKY, B. Prolegomenon to Scientific Visualizations, In: GILBERT, J.K. (ed), **Visualization in Science Education**, Dordrecht: Springer 2005.

VERGNAUD, G. A classification of cognitive tasks and operations of thought involved in addition and subtraction problems. In Carpenter, T.; Moser, J.; Romberg, T. **Addition and subtraction. A cognitive perspective**. Hillsdale: Lawrence Erlbaum. pp. 39-59, 1982.

VERGNAUD, G. Quelques problèmes théoriques de la didactique a propos d'un exemple: lês structures additives. **Atelier International d'Été: Recherche en Didactique de la Physique**. La Londe les Maures, França, 26 de junho a 13 de julho. 1983a.

VERGNAUD, G. Multiplicative structures. In: LESH, R.; LANDAU, M. (Eds.) **Acquisition of Mathematics Concepts and Processes**. New York: Academic Press, p. 127-174, 1983b.

VERGNAUD, G. Didactics as a Content-Oriented Approach to Research on the Learning of Physics, Mathematics and Natural Language. **68th Annual Meeting of the American Educational Research Association**. New Orleans, Abril. 1984.

VERGNAUD, G. La théorie des champs conceptuels. Paris, **Recherches en Didactique des mathématiques**, v. 10, n. 23, p. 133-170, 1990.

VERGNAUD, G. Teoria dos Campos Conceituais. In: NASSER, L. (Ed.) **Anais do 1º Seminário Internacional de Educação Matemática do Rio de Janeiro**. Rio de Janeiro: Editora da UFRJ. p. 1-26, 1993.

VERGNAUD, G. Multiplicative conceptual field: what and why? In Guershon, H.; Confrey, J. (Eds.) **The development of multiplicative reasoning in the learning of mathematics**. Albany: State University of New York Press. pp. 41-59, 1994.

VERGNAUD, G. Education: the best part of Piaget's heritage. Bern, **Swiss Journal of Psychology**, v. 55, n.2/3, p. 112-118, 1996a.

VERGNAUD, G. A. trama dos campos conceituais na construção dos conhecimentos. **Revista do GEMPA**, Porto Alegre, N° 4, p. 9-19, 1996b

VERGNAUD, G. Algunas ideas fundamentales de Piaget en torno a la didáctica. Ginebra, **Perspectivas**, v. 26, n. 10, p. 195-207, 1996c.

VERGNAUD, G. A comprehensive theory of representation for mathematics education. Amsterdam, **Journal of Mathematical Behavior**, v. 17, n. 2, p. 167-181, 1998.

VERGNAUD, G. En que sentido la teoria de los campos conceptuales puede ayudarnos para facilitar el aprendizaje significativo. Porto Alegre: **Investigações em Ensino de Ciências**. v. 12, n. 2, p. 285-302, 2007.

WILHELM, J. D. *Improving Comprehension with Think-Aloud Strategies*. New York: Scholastic Inc., 2001.

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

WU, H.K.; SHAH, P. Exploring visuospatial thinking in chemistry learning. Hoboken(NJ), **Science Education**, v. 88, n. 3, p. 465-492, 2004.