

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



ADRIANA DE FARIAS RAMOS

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA UTILIZAÇÃO DE *SOFTWARE* DE  
MODELAGEM MOLECULAR NO PROCESSO DE APRENDIZAGEM  
DE CONCEITOS QUÍMICOS POR ESTUDANTES DO ENSINO  
MÉDIO E SUPERIOR

Canoas, 2015

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



ADRIANA DE FARIAS RAMOS

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA UTILIZAÇÃO DE *SOFTWARE* DE  
MODELAGEM MOLECULAR NO PROCESSO DE APRENDIZAGEM  
DE CONCEITOS QUÍMICOS POR ESTUDANTES DO ENSINO  
MÉDIO E SUPERIOR

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil, como requisito para obtenção do título de Doutor em Ensino de Ciências.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto

Canoas, 2015

## Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

R175e Ramos, Adriana de Farias.  
Estudo do processo de internalização de conceitos de química usando *software* de modelagem molecular / Adriana de Farias Ramos. - Canoas, 2015.

Orientador: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto.

f.207

Tese (Doutorado) – Universidade Luterana do Brasil, Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, Área de Concentração em Tecnologias de Informação e Comunicação, Canoas, BR-RS, 2015.

1. Ensino de Química. 2. Modelagem Molecular. 3. Teoria da Mediação Cognitiva. 4. Aprendizagem Mediada por Computador. 4. Cognição Extracerebral. I. Andrade Neto, Agostinho Serrano de, orient. II. Título.

CDU – 37.091.3:54

## AGRADECIMENTOS

É sempre bastante difícil fazer agradecimentos nesse momento de término de um trabalho que durou quatro anos. Sempre fica o receio de esquecer alguém ou algo. Não posso deixar de iniciar pela família. Porque muito da minha essência se deve a ela. Gostaria de agradecer muito à minha mãe, Oyara. Esta mulher forte e aguerrida que deve estar transbordante de orgulho pela minha conquista. Essa conquista também é tua, mãe! Queria agradecer também ao meu pai, Eurico. Mesmo longe, sei que torces muito por mim. Meu irmão querido, Ronald, que sempre me apoiou e me ofereceu amizade e parceria. Aos demais familiares que torceram (e torcem) sempre pelo meu sucesso, podem ter certeza: um pouco dessa conquista também é de vocês. À minha segunda mãe, Iolanda (in memoriam), que nos deixou tão prematuramente, mas que sei que no plano astral segue zelando por mim como sempre zelou. Amo todos vocês! Gostaria de fazer um agradecimento especial à Rô, pela paciência, cumplicidade, carinho e força que sempre me deu e dará. Temos ainda muito a construir, juntas! Ao Casemiro, meu amigão de infância, pela ajuda na correção do texto. Valeu, amigo! Preciso fazer um agradecimento especial ao meu mestre dos mestres e amigo, professor del Pino. Sem aquele e-mail de indicação nunca teria feito a seleção para o doutorado. Muito obrigada pela tua generosidade, conhecimentos, ensinamentos e ajuda nessa minha trajetória desde lá, no Instituto de Química da UFRGS. Meus agradecimentos à CAPES pelo oferecimento da bolsa que permitiu meus estudos. Agradeço também à ULBRA e ao Programa de Pós-Graduação em ensino de Ciências e Matemática pelos ensinamentos e oportunidade de crescimento. Um agradecimento todo especial à banca – Prof. Mazzini, Prof. Bruno, Prof. del Pino, Profa. Marlise e Profa. Tania – pelos conselhos, dicas e contribuições para a melhoria dessa pesquisa. Por fim, e não menos importante, agradeço muito ao meu orientador, prof. Agostinho. Essa pessoa fantástica que me acolheu, me mostrou caminhos e sempre conseguiu dosar muito bem o papel de orientador com o de quem respeita o tempo e a produção do orientando. Agostinho, você foi impecável!



## RESUMO

A modelagem molecular é empregada na área de investigação da Química Teórica a décadas. Já no ensino, é estabelecido que o uso de *software* de visualização molecular auxilia notoriamente no desenvolvimento de habilidades visuoespaciais. A compreensão de muitos conceitos químicos está diretamente ligada às habilidades visuoespaciais, pois a visualização faz parte de um sistema de percepção de símbolos que são típicos desta Ciência. Esta habilidade pode avançar para a consolidação de imagens mentais dinâmicas, permitindo que os estudantes possam realizar simulações mentais e modelar sistemas químicos. Consideramos que a interação dos estudantes com a modelagem molecular pode levar à construção de modelos mentais tridimensionais dinâmicos, produzindo uma conceitualização mais rica do fenômeno químico e dotando os estudantes de competências específicas e de capacidade de pensamento de alta ordem. A fim de compreender como é alterada a estrutura cognitiva dos estudantes após a utilização de modelagem molecular, buscamos construir um olhar específico de investigação e desdobramento deste problema de pesquisa nas áreas de Cognição, Metodologia, Educação Química e Currículo. Para responder a este desafio, tomamos como referencial epistemológico as ideias de Larry Laudan, que fundamenta nossa escolha de referencial teórico por ligar o desenvolvimento científico à capacidade crescente de resolver problemas. O referencial teórico que sustenta nosso trabalho de pesquisa, inédito para a área de Educação Química, é a Teoria da Mediação Cognitiva, que procura fornecer uma síntese teórica coerente de teorias psicológicas e estruturais de modo a produzir um modelo unificado que explique o processamento da informação pelo cérebro. O referencial metodológico construído também é inédito e parte da epistemologia de Michael Polanyi, que aborda o conhecimento tácito como um conhecimento implícito e inerente de cada sujeito. Como este conhecimento tácito, um dos principais focos desse trabalho, não é naturalmente explicitado pelo estudante, a metodologia capaz de desvendá-lo tem como objetivo identificar e compreender os gestos descritivos dos estudantes (discurso não verbal) por meio de análise gestual. Para identificar estes gestos descritivos, desenvolvemos uma variação da técnica *Think Aloud*, denominado por nós de *Report Aloud*, que consiste em fazer com que o estudante reporte o seu processo de raciocínio quando estava diante do desafio de resolução de problema. O discurso verbal também foi analisado, em conjunto com o discurso não verbal, por metodologia clássica de Análise de Discurso. Após identificarmos e analisarmos os gestos descritivos, tivemos condições de identificar e compreender as mudanças ocorridas na estrutura cognitiva dos estudantes e nosso principal resultado de pesquisa até então mostra que o uso de modelagem molecular permite que os estudantes adquiram uma visão dinâmica dos processos de transformação das moléculas, auxiliando na consolidação das habilidades visuoespaciais e propiciando aos estudantes a construção de uma visão mais integrada de conceitos em torno da energia que, via de regra, são historicamente tratados de forma distinta.

**Palavras-chave:** Educação Química. Modelagem Molecular. Teoria da Mediação Cognitiva. Aprendizagem Mediada por Computador. Cognição Extracerebral.

## ABSTRACT

Molecular modeling is employed in the field of Computational Chemistry for decades. In teaching, the use of computers notably helps the development of visuospatial abilities. The comprehension of many chemistry concepts is directly connected to visuospatial abilities, as visualization is part of a system of perception of symbols that are typical of a field of Science. This ability can advance towards the consolidation of dynamic mental images, allowing students to perform mental simulations and model chemical systems. We consider that the interaction of students with molecular modeling can lead to the building of dynamic tridimensional mental models, producing a richer conceptualization of the chemical phenomena and imbuing the students with specific competences and the ability of higher order thinking. In order to understand how the cognitive structure of the students is changed after using molecular modeling, we tried to build a specific research look and the unfolding of this research question in the fields of Cognition, Methodology, Chemistry Education and Curriculum. To answer this challenge, we took as epistemological referential the ideas of Larry Laudan, upon which we build up our theoretical referential choice as it connects scientific development to the growing capacity to solve problems. The theoretical referential that is used in our research is unheard before within the field of Chemical Education, the Cognitive Networks Mediation Theory (CNMT). This theory aims to provide a coherent theoretical synthesis of the psychological and structural theories to produce a unified model that explains how the brain processes information. The methodological referential built also is unheard of and starts with the epistemology of Michael Polanyi, that focus on the tacit knowledge as a implicit knowledge and inherent to each subject. As this tacit knowledge, one of the main focus of our work, not naturally made explicit by the student, the methodology able to reveal it has the main objective to identify and comprehend the depictive gesture of the students (non verbal speech) by means of gesture analysis. To identify those depictive gestures, we developed a variation of the Think Aloud technique, that we hereby name Report Aloud, and which consists in making the student report his reasoning process when he was facing the challenge of the resolution of the proposed problem. The verbal speech was also analyzed, in conjunct with the non-verbal speech, by means of the classic methodology of Speech Analysis. After we identify and analyze the gesture, we were able to identify and understand the changes that happened in the cognitive structure of the students and our main research result so far shows that the use of molecular modeling allows the student to acquire a dynamic view of the transformations processes in molecules, helping in the consolidation of visuospatial abilities and allowing the students the building of a more integrated understanding of chemical concepts around the energy concept that, usually, are historically treated as distinct.

**Keywords:** Chemical Education, Molecular Modeling, Cognitive Networks Mediation Theory, Computer-Based Learning. Extracerebral Cognition.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

<b>Figura 1:</b> Distribuição dos artigos por categorias de análise.....	32
<b>Figura 2:</b> Distribuição dos artigos nas categorias, por Periódico.....	32
<b>Figura 3:</b> Descrição básica dos diferentes métodos utilizados na Modelagem Molecular .....	59
<b>Figura 4:</b> Descrição dos módulos independentes que compõem o software Spartan .....	61
<b>Figura 5:</b> esquema do referencial teórico-epistemológico adotado .....	68
<b>Figura 6:</b> A evolução das formas de mediação cognitiva. ....	72
<b>Figura 7:</b> Processamento cognitivo por mediação com estruturas do ambiente .....	76
<b>Figura 8:</b> Gestos descritivos realizados por um estudante, num processo de simulação mental para explicar o comportamento da ligação dupla quando esta é torcionada.....	81
<b>Figura 9:</b> Gestos mais significativos da análise gestual.....	87
<b>Figura 10:</b> Quadro resumido das características dos experimentos realizados.....	94
<b>Figura 11:</b> etapas do experimento planejadas para o segundo experimento piloto. ....	100
<b>Figura 12:</b> esquema de metodologia de pesquisa adotada.....	105
<b>Figura 13:</b> esquema de análise dos registros.....	108
<b>Figura 14:</b> organização das categorias de análise dos dados do primeiro experimento definitivo .....	114
<b>Figura 15:</b> Gesto produzido por todos os estudantes para representar um átomo.....	117
<b>Figura 16:</b> Gestos do expert para representar átomos e moléculas.....	119
<b>Figura 17:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar as ligações químicas.....	120
<b>Figura 18:</b> Padrão de cores para a molécula de formaldeído. (A) molécula construída no software; (B) molécula apresentada na edição mais recente de num livro de Química Orgânica de nível universitário.....	121
<b>Figura 19:</b> Gestos produzidos pelo expert para representar as ligações químicas.....	122
<b>Figura 20:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar planos e partes da molécula.....	123
<b>Figura 21:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar rotações intramolecular e da molécula. .	124
<b>Figura 22:</b> Gestos descritivos produzidos pelos estudantes para representar os diferentes conformêros de uma molécula. ....	125
<b>Figura 23:</b> Gestos mais significativos produzidos pelo expert sobre análise conformacional. ....	127
<b>Figura 24:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar as ligações químicas.....	128
<b>Figura 25:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar o giro intramolecular.....	131
<b>Figura 26:</b> Estudante P descrevendo em gestos a representação de uma torção dos orbitais “pi” da ligação dupla de uma molécula, na coluna da esquerda, e a respectiva simulação computacional, na coluna da direita.....	134
<b>Figura 27:</b> Gestos produzidos pelo expert para representar o giro intramolecular.....	134
<b>Figura 28:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar gráficos de energia em análise conformacional.....	136
<b>Figura 29:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar polaridade e nuvem eletrônica.....	138
<b>Figura 30:</b> Gestos produzidos pelo expert para representar polaridade e nuvem eletrônica.....	140
<b>Figura 31:</b> Gestos produzidos pelo expert para representar a movimentação dos átomos no mecanismo de reação de substituição nucleofílica – S <sub>N</sub> 2.....	142
<b>Figura 32:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar a molécula como um todo na reação de Diels-Alder.....	143
<b>Figura 33:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar a barreira HOMO-LUMO. ....	145
<b>Figura 34:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar o giro intramolecular e da molécula como um todo. ....	147
<b>Figura 35:</b> Gestos produzidos pelos estudantes para representar movimentação de elétrons/nuvem. ....	149
<b>Figura 36:</b> Representações estudante B no teste pós-modelagem: (A) em 2D; (B) em 3D.....	154
<b>Figura 37:</b> representações de moléculas da estudante K: (A) molécula cis teste pré-modelagem; (B) molécula trans teste pré-modelagem; (C) 2D do teste pós-modelagem; (D) 3D do teste pós-modelagem. ....	155
<b>Figura 38:</b> representações das moléculas da estudante In: (A) 2D no teste pré-modelagem; (B) 3D do teste pré-modelagem; (C) 2D no teste pré-modelagem; (D) 3D no teste pós-modelagem.....	156
<b>Figura 39:</b> desenhos da estudante P de uma molécula: (A) 2D no teste pré-modelagem; (B) 3D no teste pré-modelagem; (C) 2D no teste pós-modelagem; (D) 3D no teste pós-modelagem.....	157
<b>Figura 40:</b> Gestos descritivos para molécula inteira e parte da molécula .....	158
<b>Figura 41:</b> Gestos descritivos para representar ligações simples e duplas .....	159

<b>Figura 42:</b> gestos descritivos de planos em moléculas. ....	159
<b>Figura 43:</b> gestos descritivos para exemplificar a existência de ligações duplas e simples nas moléculas. ..	161
<b>Figura 44:</b> gestos descritivos para representar rotações intra e intermoleculares. ....	162
<b>Figura 45:</b> Sequências de gestos das estudantes C e K, mostrando a torção da ligação.....	163
<b>Figura 46:</b> gestos descritivos para representar a molécula inteira ou parte dela. ....	164
<b>Figura 47:</b> gestos descritivos sobre a polaridade de moléculas.....	165
<b>Figura 48:</b> evolução conceitual da estudante Iv em relação à geometrias moleculares. (A) molécula do tetracloroeto de carbono no teste pré-modelagem; (B) molécula do tetracloroeto de carbono no teste pós-modelagem; (C) molécula do $PBr_3F_2$ no teste pré-modelagem (D) molécula do $PBr_3F_2$ no teste pós-modelagem. ....	166
<b>Figura 49:</b> gestos descritivos de ligações químicas nos arranjos geométricos moleculares.....	168
<b>Figura 50:</b> gestos descritivos acerca da polaridade e nuvem eletrônica de moléculas. ....	170
<b>Figura 51:</b> respostas da estudante In à questão sobre substituição nucleofílica: (A) teste pré-modelagem; (B) teste pós-modelagem. ....	172
<b>Figura 52:</b> respostas da estudante Iv à questão sobre substituição nucleofílica: (A) teste pré-modelagem; (B) teste pós-modelagem. ....	173
<b>Figura 53:</b> gestos descritivos relativos à inversão dos hidrogênios no mecanismo de reação $S_N2$ .....	174
<b>Figura 54:</b> Influência da aquisição de uma visão dinâmica das transformações nos processos cognitivos dos estudantes. ....	179

## LISTA DE SIGLAS

**2D:** Duas Dimensões  
**3D:**Três Dimensões  
**AM1:** *Autin Model 1*  
**ANOVA:** *Analysis of Variance*  
**CC:** *Coupled Cluster*  
**CE:RP:** *Chemistry Education: Research and Practice*  
**CI:** *Configuration Interaction*  
**DFT:** *Density Functional Theory*  
**EAD:** Educação a Distância  
**ERIC:** *Education Resource Information Center*  
**HF:** *Hartree-Fock*  
**HOMO:** *Highest Occupied Molecular Orbital*  
**IBGE:** Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística  
**IFRS:** Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul  
**JACS:** *Journal of American Chemistry Society*  
**JCE:** *Journal of Chemical Education*  
**LUMO:** *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*  
**MCSCF:** *Multi-Configurational Self-Consistent Field*  
**MNDO:** *Modifield Neglect of Diatomic Overlap*  
**MP:** *Moller Plesset*  
**MRCI:** *Multireference Configuration Interaction*  
**PM3:** *Parameterized Model 3*  
**PPGECIM:** Programa de Pós-Graduação em Ciência e Matemática  
**QN:** Química Nova  
**RM1:** *Reparameterization of AM1*  
**SN2:** Substituição Nucleofílica de Segunda Ordem  
**TIC:** Tecnologia de Informação e Comunicação  
**TLV:** Teoria de Ligação de Valência  
**TMC:** Teoria da Mediação Cognitiva  
**TOM:** Teoria do orbital Molecular  
**UFRGS:** Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
**ULBRA:** Universidade Luterana do Brasil  
**ZDP:** Zona de Desenvolvimento Proximal

## LISTA DE PUBLICAÇÕES

Esse trabalho de pesquisa de doutorado rendeu algumas publicações que seguem:

### 1) Artigos Completos publicados em Periódico

- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. ESTUDO DA APRENDIZAGEM MEDIADA POR COMPUTADOR: AS CONTRIBUIÇÕES DA MODELAGEM MOLECULAR PARA O ENSINO DE QUÍMICA. *RENTE*. Revista Novas Tecnologias em Educação, v. 12, p. 1-10, 2014.
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Modelagem Molecular no ensino de Ciências: Uma revisão da literatura no Período 2001-2011 acerca da sua aplicabilidade em atividades de ensino. *Revista Acta Scientiae*, v. 15, p. 354-362, 2013.

### 2) Trabalhos Completos publicados em Anais de Congressos

- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. The Use of Computational Molecular Modeling as an External Cognitive Processing Tool: Preliminary Results of a Gestual Analysis. In: ESERA 2013 Conference, 2014, Nicosia, Cyprus. Book Proceedings of the ESERA 2013 Conference: Science Education Research for Evidence-based Teaching and Coherence in Learning, 2013. V.1, p. 1-10.
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Como são internalizadas as competências adquiridas quando um aluno utiliza computadores? Um exemplo de mediação cognitiva em rede durante a utilização de *software* de modelagem molecular. In: IX encontro Nacional em Pesquisa em Educação em Ciências, 2013. Águas de Lindóia/SP. Atas do IX Encontro Nacional em Pesquisa em Ensino em Ciências, 2013, p. 1-8.
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. The Use of Computational Molecular Modeling as an External Cognitive Processing Tool: Preliminary Results of a Gestual Analysis. In: ESERA Conference 2013 – Conference of European Science Education Research Association, 2013, Ilha de Chipre. ESERA 2013 Conference Proceedings, 2013, p.1-10.
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Modelagem Molecular no Ensino de Química: resultado preliminares de uma análise gestual. In: 32º Encontro de Debates Sobre Ensino de Química, 2012, Porto Alegre/RS. Encontro de Debates sobre o Ensino de Química e Saberes Docentes: memórias, narrativas e práticas. Porto Alegre, 2012, v.1, p. 45-53.
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Uma Revisão de Literatura sobre Modelagem Molecular. In: I Congreso Internacional de Enseñanza de las Ciencias y la Matemática, 2011, Tandil – Buenos Aires. I Congreso Internacional de Enseñanza de las Ciencias y la matemática. Tandil: O livro de atas do congresso é um e-book, 2011, v.1, p. 739-745.
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Uma Revisão de Literatura Relativa ao Uso de *Softwares* de Modelagem Molecular na Educação Química. In: VIII ENPEC – Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 2011, Campinas/SP. Atas do VIII ENPEC, 2011, v. 1, p. 1383-1383.

### 3) Apresentações de Trabalhos

- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Modelagem Molecular no Ensino de Química: resultados preliminares de uma análise gestual, 2012. (Apresentação de Trabalho/Congresso).
- RAMOS, Adriana de Farias; SERRANO, Agostinho. Uma revisão de Literatura sobre Modelagem Molecular, 2011. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

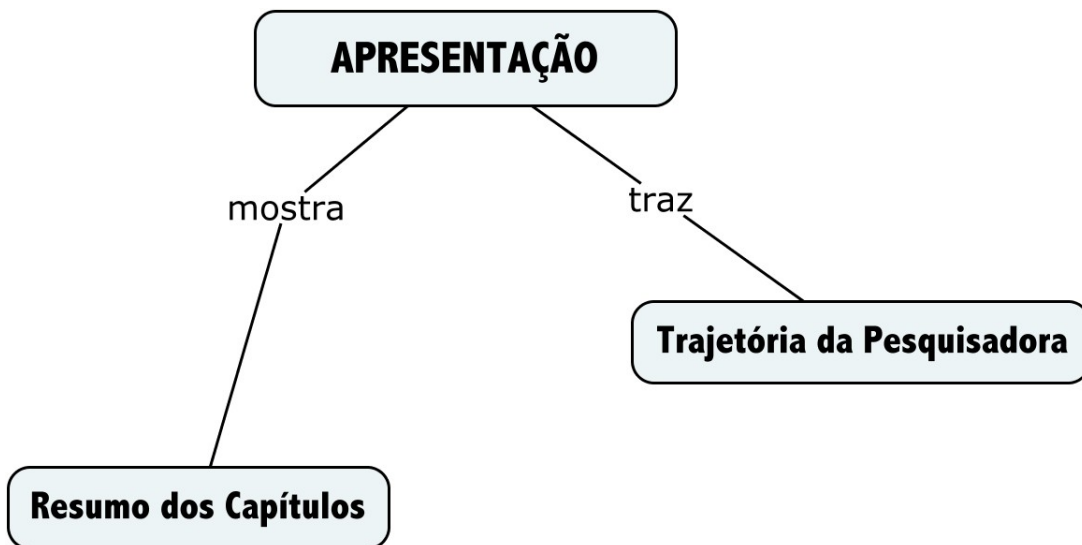
## SUMÁRIO

<b>APRESENTAÇÃO .....</b>	<b>13</b>
1.1 O CAMINHO PERCORRIDO.....	14
<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>18</b>
2.1 JUSTIFICATIVA .....	21
2.2 PROBLEMA DE PESQUISA .....	25
2.2.1 DESDOBRAMENTOS PARA A ÁREA DA COGNIÇÃO.....	26
2.2.2 <i>Desdobramentos para a Área de Metodologia da Pesquisa</i> .....	26
2.2.3 <i>Desdobramentos para a Área de Educação Química</i> .....	27
2.2.4 <i>Desdobramentos para a Área de Currículo</i> .....	27
2.3 OBJETIVOS.....	27
2.3.1 <i>Objetivo Geral</i> .....	28
2.3.2 <i>Objetivos Específicos</i> .....	28
<b>REVISÃO DE LITERATURA .....</b>	<b>29</b>
3.1 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA EXPERIMENTO .....	33
3.1.1 <i>Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular</i> .....	34
3.1.2 <i>Teoria de Ligação Química e interações intra e intermolecular</i> .....	34
3.1.3 <i>Modelagem Molecular e Análise Instrumental</i> .....	35
3.1.4 <i>Reações Químicas</i> .....	36
3.2 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA APLICAÇÃO DIDÁTICA .....	37
3.2.1 <i>Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular</i> .....	38
3.2.2 <i>Teoria de Ligação Química e interações intra e intermolecular</i> .....	38
3.2.3 <i>Modelagem Molecular e Análise Instrumental</i> .....	39
3.2.4 <i>Reações Químicas</i> .....	39
3.2.5 <i>Sequências Didáticas</i> .....	40
3.3 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA PESQUISA EM EDUCAÇÃO .....	40
3.4 CONSIDERAÇÕES.....	52
<b>A QUÍMICA COMPUTACIONAL E A MODELAGEM MOLECULAR .....</b>	<b>54</b>
4.1 O INÍCIO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL .....	55
4.2 A QUÍMICA QUÂNTICA.....	57
4.3 O QUE É MODELAGEM MOLECULAR?.....	58
4.3 O FUNCIONAMENTO DOS SOFTWARES DE MODELAGEM MOLECULAR.....	61
<b>REFERENCIAL TEÓRICO-EPISTEMOLÓGICO.....</b>	<b>63</b>
5.1 A EPISTEMOLOGIA DE LAUDAN.....	64
5.2 A TEORIA DA MEDIAÇÃO COGNITIVA EM REDE – TMC .....	68
5.2.1 <i>TMC – uma Síntese Teórica</i> .....	82
5.2.2 <i>Alguns exemplos de aplicabilidade da TMC</i> .....	85
5.3 O CONCEITO DE APRENDIZAGEM À LUZ DO MARCO TEÓRICO-EPISTEMOLÓGICO.....	88
<b>DELINEAMENTOS METODOLÓGICOS .....</b>	<b>90</b>
6.1 OS CAMINHOS PERCORRIDOS PARA A CONSTRUÇÃO DA METODOLOGIA.....	93
6.1.1 <i>As contribuições do Primeiro Experimento Piloto</i> .....	94
6.1.2 <i>Os Ensinos do Segundo Experimento Piloto</i> .....	98
6.2 DESCRIÇÃO DA PROPOSTA FINAL DE METODOLOGIA DE PESQUISA.....	103
6.2.1 <i>Teste individual pré-modelagem</i> .....	106
6.2.2 <i>Simulação Computacional de Modelagem Molecular</i> .....	106
6.2.3 <i>Teste individual pós-modelagem</i> .....	107
6.2.4 <i>Entrevista Individual</i> .....	107

6.2.5 <i>Análise dos Registros</i> .....	108
<b>EXPERIMENTOS DEFINITIVOS</b> .....	<b>110</b>
7.1 DESCRIÇÃO DO PRIMEIRO EXPERIMENTO DEFINITIVO .....	111
7.1.1 <i>Organização dos Registros</i> .....	112
7.1.2 <i>Apresentação dos Resultados</i> .....	114
7.1.2.1 Análise da Categoria Representações 2D e 3D.....	116
7.1.2.2 Análise da Categoria Análise Conformacional.....	124
7.1.2.3 Análise da Categoria Geometria Molecular .....	137
7.1.2.4. Análise da Categoria Reações Químicas.....	140
7.1.2.5. Análise da Categoria Modelagem Molecular.....	146
7.2. DESCRIÇÃO DO SEGUNDO EXPERIMENTO DEFINITIVO .....	149
7.2.1. <i>Organização dos Registros</i> .....	150
7.2.2. <i>Apresentação dos Resultados</i> .....	153
7.2.2.1. Categoria Representações 2D e 3D.....	153
7.2.2.2. Categoria Análise Conformacional .....	160
7.2.3.3. Categoria Geometria Molecular.....	165
7.2.2.4. Categoria Reações Químicas .....	171
7.2.2.5. Categoria Modelagem Molecular.....	175
<b>CONSIDERAÇÕES</b> .....	<b>178</b>
8.1 AQUISIÇÃO E MODIFICAÇÃO DE REPRESENTAÇÕES E DRIVERS .....	181
8.2 AS CONTRIBUIÇÕES DA MODELAGEM MOLECULAR PARA O ENSINO DE REAÇÕES QUÍMICAS .....	183
8.3 IMPLICAÇÕES PARA A ÁREA DA COGNIÇÃO .....	184
8.4 IMPLICAÇÕES PARA A METODOLOGIA DE PESQUISA .....	185
8.5 IMPLICAÇÕES PARA A ÁREA DE EDUCAÇÃO QUÍMICA.....	187
8.6 IMPLICAÇÕES PARA A ÁREA DE CURRÍCULO.....	190
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>193</b>
<b>APÊNDICE A – TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO</b> .....	<b>203</b>
<b>APÊNDICE B – CD DE REGISTROS</b> .....	<b>206</b>



## APRESENTAÇÃO



*Penso que cumprir a vida seja simplesmente compreender a marcha e ir tocando em frente... Cada um de nós compõe a sua história e cada ser em si carrega o dom de ser capaz, de ser feliz...*

*(Almir Sater)*

### *1.1 O CAMINHO PERCORRIDO*

Minha trajetória de vida de estudante e profissional sempre teve, por vocação, laços estreitos com a ciência. Desde muito jovem, já tinha a certeza de que queria estudar e construir uma carreira na área da Química. Em 1986, formei-me no técnico em Química; em 1994, assumi o cargo de técnico em laboratório/área química na Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), construindo uma carreira profissional que já acumula 20 anos de experiência; em 2005, obtive o título de licenciada em Química pela UFRGS e, em 2009, o de mestre em educação pela UFRGS.

O mestrado foi uma possibilidade concreta de unir duas áreas da ciência com as quais tenho muita afinidade: Química e Informática. A dissertação buscou conhecer e compreender as concepções do corpo docente de química sobre vários aspectos da estruturação de um curso de licenciatura em Química proposto na modalidade a distância (EAD) pela Rede Gaúcha de Ensino Superior a Distância em meados de 2005. Infelizmente, o curso nunca saiu do papel, mas as reflexões sobre a forma como o currículo do curso foi concebida e sua relação com as concepções epistemológicas dos docentes que atuariam nele me fez refletir sobre o quanto é importante investir na formação continuada de professores, pois, se esse corpo docente não coaduna ou compreende os pilares teórico-epistemológicos que sustentam um currículo, dificilmente esse currículo será implementado de acordo com sua concepção inicial.

Por outro lado, aprendi muito com o estudo aprofundado do processo de construção do currículo do curso de licenciatura em Química EAD. Uma estrutura inovadora que rompe com o senso comum em termos de organização curricular e que me fez acreditar que é possível sim termos um ensino de Química que forme docentes capazes de mudar o panorama do ensino de Química nos seus locais de atuação (RAMOS, 2009).

Minha formação acadêmica sempre contribuiu para que eu exercesse minha profissão com mais qualidade e com um olhar crítico. Nesses pouco mais de vinte anos em que atuo como técnica em laboratório – inicialmente na UFRGS e, mais recentemente, no Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul (IFRS) – tive a oportunidade de ampliar os horizontes profissionais, atuando não somente no preparo

de aulas práticas, mas também preparando material didático e debatendo as formas de abordagem de conceitos químicos junto com a equipe de trabalho. Esse olhar diferenciado sobre as diversas abordagens didáticas para o ensino de Química sempre me instigou. Me sentia – e ainda me sinto – provocada a pensar em diferentes estratégias para contribuir com a construção de um ensino de Química que fosse capaz de suscitar nos estudantes um olhar crítico sobre suas formações, rompendo com a realidade tão bem conhecida pelos pesquisadores em ensino de Química.

A possibilidade de ingressar num Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências para a realização do doutorado me levou a pensar mais sobre tais questões. No final de 2010, participei de seleção e ingressei no Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática (PPGECIM) da Universidade Luterana do Brasil (ULBRA) no início de 2011. Havia a oportunidade de me dedicar à pesquisa de novas abordagens para o ensino de Química e optei por novamente aglutinar a química com a informática. O foco da pesquisa de doutoramento passou a ser a modelagem molecular e suas contribuições para o ensino de Química. Logo no início das pesquisas, ao realizar a revisão de literatura, deparei-me com um caldo de cultura já conhecido: a constatação das dificuldades de aprendizagem de estudantes acerca dos conceitos químicos e a tentativa de introdução das ferramentas de modelagem molecular nas estratégias didáticas, sejam elas em sala de aula ou em currículos, assim como as dificuldades vividas pelos docentes e suas resistências no uso de tal ferramenta.

Ao me deparar com o estado da arte acerca do uso da modelagem molecular no ensino de Química, logo percebi que poderia propor um debate mais aprofundado sobre as questões mais gerais do ensino de Química, convergindo para a proposição de novas estratégias de ensino/aprendizagem. Dessa forma, poderia desenvolver a minha pesquisa com o objetivo de tentar obter respostas a algumas questões que me acompanham nessa trajetória de pensar o ensino de Química: o que ensinar? Como ensinar? Como tornar o conteúdo de química mais compreensível e focado na realidade? Como trazer os conteúdos de química de sala de aula à convergência com o conteúdo científico e tecnológico? Essas questões que ainda me perturbam e instigam, de certa forma, trouxeram-me até aqui.

Esta tese de doutorado está delineada em oito capítulos. O primeiro capítulo compreende essa apresentação, na qual consta um pouco da trajetória que me conduziu até aqui, bem como a descrição de cada capítulo. O segundo capítulo introduz o contexto da pesquisa e apresenta a justificativa para sua realização, bem como objetivos, hipótese, problema de pesquisa e seu desdobramento em quatro áreas: cognição, metodologia de pesquisa, educação Química e currículo.

O capítulo três aborda a revisão de literatura realizada logo no início das atividades do doutorado. A revisão foi bastante ampla e conseguiu abranger o período de 10 anos, assim como os principais periódicos da área, possibilitando que eu pudesse compor o estado da arte em termos do uso da modelagem molecular no ensino de Química. O quarto capítulo aborda alguns aspectos teóricos acerca dos conceitos de Química Quântica e modelagem molecular, bem como apresenta as formas de funcionamento do programa de modelagem molecular que foi utilizado na pesquisa, o *software Spartan* versão 8.

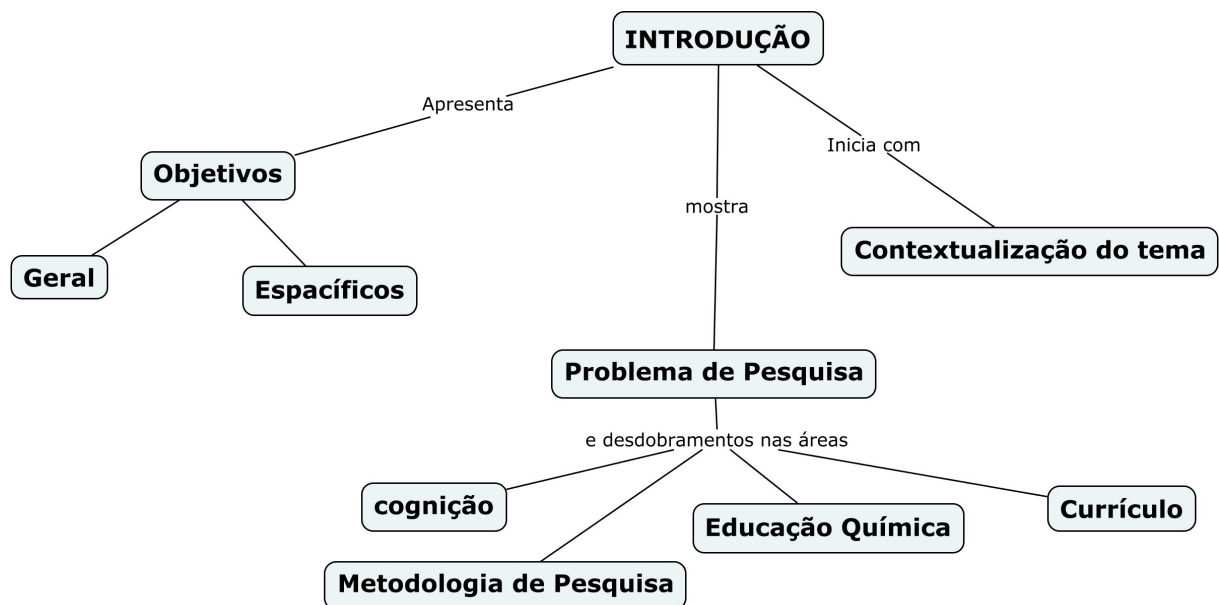
No capítulo cinco é desenvolvido o referencial teórico-epistemológico que traz as bases teóricas e epistemológicas que sustentam esta pesquisa. O principal referencial epistemológico adotado é a epistemologia de resolução de problemas de Larry Laudan, que se baseia no fato de que a ciência se desenvolve a partir do processo de resolução de problemas. O referencial teórico escolhido é a Teoria da Mediação Cognitiva (TMC), que busca explicar o processamento de informações feito pelo cérebro em mediação com um mecanismo externo de processamento de informações – nesse caso, a modelagem molecular - que dota os estudantes de uma capacidade maior de processamento. A junção da epistemologia de resolução de problemas de Laudan com a TMC monta o cenário teórico para a pesquisa, uma vez que essa se propõe a investigar as melhoras da capacidade de resolução de problemas dos estudantes quando estes utilizam a modelagem molecular como ferramenta de cognição extracerebral.

No sexto capítulo dessa tese encontra-se detalhado o referencial metodológico. A base metodológica adotada é do tipo microetnográfica, que busca analisar registros audiovisuais focando os sujeitos em seu discurso antes e depois do uso da modelagem molecular. Com isso, buscamos identificar indícios de aquisição de conhecimentos, advindos da interação com o *software* de modelagem molecular, no discurso verbal e

não verbal dos estudantes. A linguagem verbal foi analisada sob a luz da análise de discurso clássica. A linguagem não verbal, caracterizada pelos gestos descritivos dos estudantes quando estes estavam explicando como resolveram os problemas propostos antes e depois do uso da modelagem molecular, tem como base a epistemologia dos conhecimentos tácitos de Polanyi e as contribuições de análise gestual de Monaghan e Clement.

O sétimo capítulo traz a descrição dos experimentos realizados ao longo da pesquisa, bem como a análise dos seus resultados. Ao todo, foram cinco experimentos que sedimentaram o caminho metodológico percorrido: três experimentos piloto e dois experimentos definitivos. O capítulo evidencia os aspectos positivos e negativos dos dois experimentos piloto com relação à construção da proposta final de metodologia da pesquisa. Além disso, apresenta análise de dados dos dois experimentos definitivos. Por fim, no capítulo oito, são apresentadas as considerações finais e as implicações dos resultados da pesquisa para as quatro áreas em que o problema de pesquisa se desdobra: cognição, metodologia de pesquisa, educação Química e currículo. Após isso, também encontramos as referências e os apêndices.

## INTRODUÇÃO



*Ninguém educa ninguém, ninguém educa a si mesmo, os homens se educam entre si, mediatizados pelo mundo.*  
(Paulo Freire)

O ensino de Química focado na investigação sobre a natureza e o desenvolvimento tecnológico tem sido uma meta perseguida na área de educação Química, sendo até eleito um dos objetivos dos Parâmetros Curriculares Nacionais. Contudo, como é bem conhecido dos profissionais da área, ainda prevalece um ensino baseado no modelo de transmissão, com forte ênfase na memorização de símbolos, propriedades e fórmulas (CHASSOT, 2004).

A literatura na área de Ensino de Ciências sempre documentou, muitas vezes profusamente, as dificuldades de aprendizagem de estudantes do ensino médio, e isto não seria diferente para o caso particular da educação Química (CASTILHO et al., 1999; SILVA et al., 2003; ROGADO, 2004). Mais recentemente, porém, tem-se reunido uma gama consistente de dados que parecem apontar no sentido de que a compreensão de muitos conceitos da química, como a estereoisomeria e outros, está relacionada à habilidade de visualização (LOCATELLI, 2011). A ausência dessa habilidade, via de regra, parece constituir-se em um obstáculo para a construção de conhecimentos químicos. Santos e Greca (2005) revelaram que o panorama do ensino de Química é preocupante em função de que:

Muitos estudantes têm dificuldade em compreender as representações em química (Ben-Zvi et al., 1988). As compreensões microscópica e simbólica são especialmente difíceis para os estudantes porque são invisíveis e abstratas e o pensamento dos alunos é construído sobre a informação sensorial (Ben-Zvi, Eylon & Silberstein, 1987). Além disso, os estudantes não estabelecem relações apropriadas entre o nível macro e o microscópico (Pozo, 2001; Kosma & Russell, 1997; Gillespie, 1997) e ainda, muitos que tenham conhecimento conceitual e habilidade de visualizar, são incapazes de transladar de uma dada representação química a outra (Wu, Krajcik & Soloway, 2001). (SANTOS; GRECA, 2005, p.1).

Assim, uma das habilidades metacognitivas<sup>1</sup> importante para a compreensão de conceitos químicos desta ciência é a visualização. A visualização faz parte de um sistema de percepção de símbolos inerente a determinado conjunto de conhecimentos – como o conhecimento químico – e é fundamental na construção de novos conhecimentos por parte dos estudantes.

---

<sup>1</sup> Compreendemos habilidade metacognitiva como as ações do pensamento necessárias à capacidade de aprender a identificar conhecimentos necessários para posteriormente aplicá-los na resolução de problemas e no processo de aprendizagem (VEENMAN et al., 2004).

Wu et al. (2001) indicaram que o desenvolvimento de habilidades visuoespaciais através de estratégias diversas, como a manipulação de modelos moleculares físicos, contribui para a melhor compreensão de modelos e da estrutura tridimensional das moléculas, levando à facilidade de compreensão de outras propriedades dependentes da geometria molecular. Essa habilidade de visualização pode avançar para a consolidação de imagens mentais de rotação de moléculas, caracterizando uma retenção de conceitos e a existência de conhecimentos implícitos decorrentes da manipulação de modelos tridimensionais (WU et al., 2001). Portanto, podemos afirmar que a habilidade visuoespacial é uma poderosa ferramenta, que pode ser usada para resolução de problemas e compreensão de conceitos em diversas áreas da ciência e em diferentes contextos, auxiliando na criação e compreensão de modelos.

Gilbert e Boutler (apud FERREIRA; JUSTI, 2008) abordaram a utilização de modelos para o ensino de ciências e fizeram a seguinte afirmação:

Um modelo pode ser definido como uma representação parcial de um objeto, evento, processo ou ideia, que é produzida com propósitos específicos como, por exemplo, facilitar a visualização; fundamentar elaboração e teste de novas ideias; e possibilitar a elaboração de explicações e previsões sobre comportamentos e propriedades do sistema modelado (Gilbert e Boutler, apud FERREIRA e JUSTI, 2008, p. 32).

A utilização de modelos auxilia no processo de pensar sobre o mundo físico, pois um modelo não é um sinônimo do mundo físico, mas sim uma representação deste. A importância da construção de modelos nas ciências já é consagrada (BARNEA; DORI, 2000; JUSTI, 2009), pois é a partir da construção de modelos que os cientistas tentam explicar o comportamento de um determinado fenômeno e produzem conhecimento. Assim, o termo modelagem pode ser considerado como um processo de construção e reformulação de modelos.

Wolff e Andrade Neto (2011) apresentaram um estudo aprofundado do uso de modelos e do significado da modelagem a partir dos referências da modelagem matemática. Nas outras áreas das ciências, a modelagem tem sido cada vez mais usada para atividades didáticas (REBELLO; RAMOS, 2009; ARAUJO et al., 2012; RODRIGUES, 2012). Na Química não é diferente, pois o uso de modelos e modelagem, principalmente de modelos atômicos, é largamente disseminado (APPELT et al.,



2009), visto que a criação e validação de modelos caracteriza-se como a base da pesquisa científica (MORRISON; MORGAN, 1999).

Santos (2001) definiu, dentro da literatura em Educação Química, que modelagem molecular constitui “*a aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria*”. Segundo o autor, historicamente, a modelagem molecular surgiu com a necessidade de representação das fórmulas estruturais das moléculas, ocorridas inicialmente em 1874 com as contribuições de Van’t Hoff e Le Bel, para o arranjo tetraédrico do carbono (SANTOS, 2001). Por sua vez, a IUPAC, que representa a comunidade internacional de pesquisadores em Química, conceituou modelagem molecular como a parte da química que trata da “*investigação de estruturas moleculares e propriedades usando a química computacional e técnicas de visualização gráfica, a fim de fornecer uma representação plausível tridimensional sob um determinado conjunto de circunstâncias*” (IUPAC, 1997, p. 1150).

Esta mesma necessidade representacional também resultou em um progresso significativo na forma de apresentar compostos químicos, com repercussões que podem ser lidas dentro de um referencial sócio-histórico-cultural em uma perspectiva evolutiva (RAUPP et al., 2009). Consideramos que a interação dos estudantes com as simulações computacionais da modelagem molecular pode levar à construção de modelos mentais<sup>2</sup> tridimensionais das moléculas, produzindo uma conceitualização mais rica do fenômeno químico.

## 2.1 JUSTIFICATIVA

A partir da década de 1960, o uso de computadores impulsionou e consolidou a Química Quântica, pois possibilitou a rápida realização dos cálculos complexos da Mecânica Quântica (FREITAS, 1998). No entanto, essa utilização ocorreu mais

---

<sup>2</sup>Assim como Greca e Moreira (2002), entendemos que o estudante, quando no processo de compreensão, explicação ou predição de uma situação ou processo específico cria modelos mentais internos (simuladores), que atuam como análogos estruturais dessa situação ou problema.

acentuadamente na área da química profissional. Na área da educação, os *softwares* de modelagem molecular tiveram uma disseminação mais branda devido a vários fatores, tais como: dificuldades dos docentes no uso dos *softwares*; excesso de estudantes nas salas de aula e de conteúdos a vencer, dentre outros (AKSELA; LUNDELL, 2008).

Atualmente, existem diversas opções de *softwares* pagos que proporcionam a realização de cálculos usando diversos métodos de Mecânica Quântica. Além destes, encontramos facilmente na internet *softwares* gratuitos que, via de regra, são mais simples e proporcionam a visualização de moléculas químicas em 3D, bem como alguns cálculos de otimização de geometria com base na mecânica molecular. Além destes, há inúmeras outras ferramentas interativas e aplicativos disponíveis na internet. São ferramentas importantes para desenvolver nos estudantes as habilidades visuoespaciais, como ponto fundamental para a compreensão de diversos conceitos químicos (WU et al., 2001).

No entanto, os *softwares* de modelagem molecular vão muito além de propiciar a visualização das moléculas num espaço tridimensional. A utilização destes *softwares* constitui-se em poderosa ferramenta de processamento externo, sem os quais não seria possível a abordagem de conteúdos específicos que envolvem cálculos mais complexos (RAUPP et al., 2010). A possibilidade de utilização destes *softwares* nas atividades didáticas pode abrir um horizonte ainda não imaginado por muitos docentes. A possibilidade de visualização de simulações computacionais envolvendo a modelagem molecular possibilita a predição da estabilidade de moléculas, do mecanismo de reações químicas e de um conjunto importante de conceitos de difícil compreensão por parte dos estudantes (BOX, 1993; CASANOVA, 1993; HOLMES, 1999).

O uso de *softwares* de modelagem molecular é didaticamente interessante porque também pode melhorar a capacidade de representação dos estudantes, dotando-os de uma competência representacional. Estes *softwares* mostram algumas propriedades de átomos e moléculas que os modelos físicos ou de visualização não mostram. Em outras situações, que envolvem o uso do quadro negro ou mesmo de Tecnologias de Informação e Comunicação (TIC), não há disponibilidade de

ferramental para isso. Com o uso destes *softwares*, o professor pode, por exemplo, obter em instantes a densidade de carga de moléculas e trabalhar mais efetivamente conteúdos que historicamente são de difícil compreensão. Além disso, o uso de ferramentas de modelagem molecular pode dar oportunidade para os estudantes desenvolverem habilidades de pensamento mais complexas, principalmente àqueles que não possuem a habilidade visuoespacial bem desenvolvida (KABERMAN; DORI, 2007).

Uma das primeiras atividades dessa pesquisa foi a realização de uma revisão de literatura envolvendo o uso de *softwares* de modelagem molecular no ensino de Química. Nos diversos relatos de uso destes *softwares*, há resultados positivos em relação ao desenvolvimento da habilidade de visualização e, com isso, uma melhora nos resultados de desempenho destes estudantes ao desenvolverem estas habilidades metacognitivas. Nas considerações finais, apontamos a ausência de relatos de pesquisas no Brasil e América Latina envolvendo o tema e defendemos a necessidade da realização de pesquisas na área de Educação Química, a fim de fomentar a pesquisa teórica e metodologicamente fundamentada sobre aplicações didáticas de modelagem molecular no sentido da larga utilização desta poderosa ferramenta nos currículos de cursos de Química, em especial os de formação de professores (RAMOS; SERRANO, 2013a).

No mesmo estudo de revisão, podemos perceber que praticamente inexistem trabalhos que visam a realizar uma pesquisa aprofundada sobre as modificações cognitivas existentes nos estudantes quando estes se utilizam de *softwares* de modelagem molecular, o que, por si só, justifica a importância de estudos nessa área. A compreensão de como se processa a mediação por computador e como são internalizados os conhecimentos a partir dessa mediação nos parece um dos caminhos possíveis e importantes para a disseminação, e posterior consolidação, do uso dessas ferramentas, tanto no ensino médio quanto no superior. Decorre deste estudo a necessidade de propor unidades didáticas integrando o uso destes *softwares*. Essas unidades estarão à disposição para futuras utilizações didáticas.

Hessley (2004) argumentou com muita clareza todas as potencialidades possíveis do uso de *softwares* de modelagem molecular no Ensino de Química, pois

esses auxiliam os estudantes na visualização da natureza dinâmica de átomos, das ligações e das moléculas. Tais ferramentas, segundo a autora, abordam conceitos abstratos e de difícil apropriação por parte dos estudantes, e que estão no cerne da base conceitual da Química, tais como: distribuição de elétrons, tamanho de átomos e íons, diversos movimentos de ligações, formatos de orbitais moleculares, dentre outros.

A autora ainda salientou:

(...) A formulação de imagens visuais para conceitos abstratos em química tem sido feita para tornar mais fácil aos alunos a compreensão e retenção dos significados e importâncias, para compreender mais plenamente o significado dos termos, e para mais facilmente fazer conexões entre os conceitos relacionados. (HESSLEY, 2004, p. 1, tradução nossa).

Nesse sentido, Kaberman & Dori (2007) defenderam o uso de modelagem molecular para o desenvolvimento daquilo que os autores chamaram de habilidade de pensamento de alta ordem, que envolve algumas capacidades, tais como: de análise, de síntese, de questionamento, de resolução de problemas e de pensamento crítico. Os autores apontaram a possibilidade de utilização de ferramentas de modelagem molecular adaptadas ao nível do ensino médio, baseadas, por exemplo, na visualização de representações espaciais 3D e afirmaram que:

Respondendo a este desafio, desenvolvemos o ambiente CCL (Case-based Computerized Laboratory) & CMM (Computerized Molecular Modeling) para estudar química de uma forma que permita aos estudantes desenvolver diversas habilidades de pensamento de alta ordem, incluindo a capacidade de questionar, a modelagem, a resolução de problemas, a elaboração de gráficos e transferência de habilidades. (...) Nossa pesquisa provou ter um impacto significativo sobre a política israelense de Educação: nossas unidades de aprendizagem baseadas no CCL e CMM provocaram mudanças no exame nacional de matrícula química em Israel. (KABERMAN; DORI, 2007, p. 621, tradução nossa).

Seguindo esse exemplo, acreditamos que é plenamente possível desenvolver atividades no ensino médio utilizando a modelagem molecular como ferramenta de aprendizagem de conteúdos de Química, tais como: otimização de geometrias moleculares, propriedades das ligações químicas, estrutura molecular (ângulos e distâncias de ligações), polaridade de moléculas, forças intermoleculares, dentre

outros. De forma análoga, defendemos que o desenvolvimento de atividades no ensino superior também é importante.

## 2.2 PROBLEMA DE PESQUISA

Após identificarmos a importância do uso de modelagem molecular no ensino de Química, percebemos que o uso dessas ferramentas causam impacto na estrutura cognitiva dos estudantes e nas suas habilidades visuoespaciais (RAMOS; SERRANO, 2012).

Neste sentido, o foco de nossa pesquisa está justamente em estudar como os estudantes aprendem quando utilizam, por mediação, um mecanismo externo de processamento de informações – o computador. Diante disso, formulamos a seguinte pergunta de pesquisa:

### **De que forma ocorre a aprendizagem de conteúdos de Química em estudantes do ensino médio e superior a partir da utilização de *software* de modelagem molecular?**

Esta pergunta de pesquisa encontra alguns desdobramentos importantes em quatro áreas, que são as seguintes: cognição, metodologia de pesquisa, ensino de Química e currículo. Na área de cognição, o desdobramento é claro por adotarmos um referencial teórico inovador para a área de Educação Química, a Teoria da Mediação Cognitiva (SOUZA, 2004). Em relação aos aspectos metodológicos, igualmente estamos propondo uma metodologia inovadora e inédita para a área. Por sua vez, os aspectos relacionados ao ensino de Química são desdobramentos importantes por conta da introdução das ferramentas de modelagem molecular cujos relatos de pesquisa na área são raros na América Latina, segundo revisão de literatura recente (RAMOS; SERRANO, 2013a). Por fim, na área de currículo, temos desdobramentos óbvios por conta da possibilidade de apresentarmos um caminho no sentido de introdução das ferramentas de modelagem molecular nos currículos dos cursos de Química, tanto no nível do ensino médio quanto da graduação. Nesse sentido, apontamos algumas questões secundárias a serem igualmente respondidas.

### 2.2.1 DESDOBRAMENTOS PARA A ÁREA DA COGNIÇÃO

Para a área da cognição, utilizamos um referencial teórico recentemente construído, mas igualmente robusto no sentido de dar suporte para responder a pergunta de pesquisa. A TMC é uma teoria que propõe realizar uma síntese coerente de teorias psicológicas e estruturais de modo a produzir um modelo unificado para cognição humana. A questão secundária que se coloca é a seguinte:

- A habilidade visuoespacial é uma condição ou um facilitador do processo de criação de novas representações e modelos mentais?

### 2.2.2 Desdobramentos para a Área de Metodologia da Pesquisa

Os caminhos metodológicos que percorremos nos experimentos até então executados são inéditos para a área de Ensino de Química. Propusemos realizar uma metodologia integrando a Análise do Discurso verbal e não verbal. A primeira foi conduzida por um método clássico de Análise do Discurso. A segunda se desenvolveu por análise gestual com objetivo claro de buscar compreender os conhecimentos tácitos dos estudantes acerca dos conteúdos abordados nas simulações computacionais de modelagem molecular. Os gestos foram produzidos nas entrevistas cuja condução se deu por método *Report Aloud*, desenvolvido por nós com base na técnica *Think Aloud*. A questão secundária que se desdobra para essa área é a que segue:

- A metodologia de *Report Aloud*, e, conjunto com a análise dos gestos descritivos, é capaz de identificar conhecimentos tácitos e adquiridos com o uso de ferramenta de modelagem molecular?

### 2.2.3 Desdobramentos para a Área de Educação Química

A área de educação de Química pode se beneficiar de pesquisas como a que desenvolvemos, pois é sabido que são raros os relatos de pesquisa envolvendo as contribuições da modelagem molecular para o aprendizado, segundo recente revisão de literatura que fizemos. Nesse sentido, uma pergunta secundária emerge de forma natural:

- Quais os benefícios e problemas que podemos identificar quando se utiliza modelagem molecular no ensino de Química?

### 2.2.4 Desdobramentos para a Área de Currículo

Em relação à área de currículo, um desdobramento natural de nossa pesquisa é o debate sobre a viabilidade de introdução da modelagem molecular nos currículos dos cursos de graduação de Química, bem como no ensino médio. Identificamos que o uso de *softwares* de modelagem molecular propicia a possibilidade de uma nova abordagem em relação aos conceitos químicos, relacionando energia com estrutura/propriedades (COOPER; KLYMKOWSKY, 2013). Essa perspectiva se mostra muito interessante, tendo em vista o atual cenário do ensino de Química. Nesse sentido, a seguinte pergunta secundária se faz necessária:

- Como podem ser introduzidas as ferramentas de modelagem molecular nos currículos de Química do ensino médio e do superior?

## 2.3 OBJETIVOS

Reconhecida a importância do uso de ferramentas de modelagem molecular no ensino de Química, uma questão ainda pouco desenvolvida na pesquisa em ensino de

ciências recai sobre a forma como os conceitos abordados são internalizados, propiciando o aprendizado. Nesse sentido, apresentamos alguns objetivos para a pesquisa.

### 2.3.1 *Objetivo Geral*

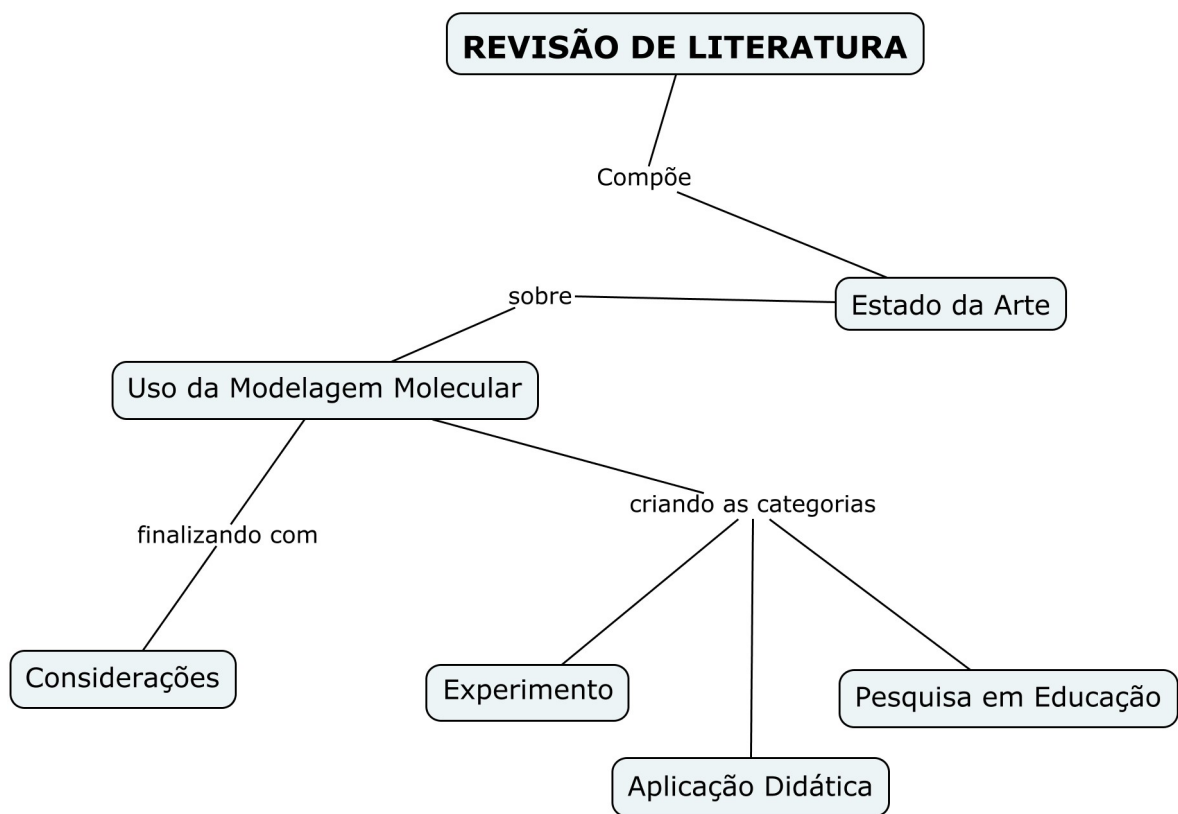
- ✓ Investigar de que forma ocorre o aprendizado de conceitos químicos por parte de estudantes de ensino médio e superior quando estes utilizam ferramentas de modelagem molecular.

### 2.3.2 *Objetivos Específicos*

- ✓ Investigar a eficácia da metodologia de Análise Gestual de uma entrevista tipo *Report Aloud* na identificação de conhecimentos tácitos e adquiridos após a manipulação de *softwares* de modelagem molecular;
- ✓ Investigar, no contexto de mediação por computador, o papel das habilidades visuoespaciais no processo de criação de novas representações e modelos mentais;
- ✓ Identificar e compreender o papel da modelagem molecular no processo de ensino e aprendizagem de conceitos químicos;
- ✓ Pesquisar formas de integrar as ferramentas de modelagem molecular aos currículos de Química do ensino médio e superior.



## REVISÃO DE LITERATURA



*Na vida nada é para ser temido,  
apenas compreendido. Agora é hora de  
compreender mais para temer menos.*

*(Marie Curie)*

Uma das primeiras atividades deste trabalho de pesquisa foi a realização de uma revisão de literatura com o objetivo de compor o estado da arte sobre o uso de *softwares* de modelagem molecular no ensino de Química. Este trabalho de revisão foi publicado em revista (RAMOS; SERRANO, 2013a). Para tanto, foram pesquisados dezenove periódicos especializados em ensino de Química e Ciências da América Latina, Estados Unidos e Europa, num período de 10 anos, entre 2001 e 2011<sup>3</sup>. Também foram pesquisadas as principais bases de dados disponíveis a fim de cruzar informações e acrescentar outras opções de pesquisa.

Os periódicos consultados foram os que seguem: *Chemistry Education: Research and Practice*; *Contributions from Science Education Research*; *Enseñanza de las Ciencias*; *International Journal of Science Education*; *International Journal of Science and Mathematics Education*; *Journal of American Chemical Society*<sup>4</sup>; *Journal of Chemical Education*; *Journal of Computers in Mathematics and Science Teaching*; *Journal of Research in Science Teaching*; *Journal of Science Education and Technology*; *Journal of Science Teacher Education*; *Journal of the Brazilian Chemical Society*<sup>5</sup>; *Química Nova*; *Química Nova na Escola*; *Research in Science & Technological Education*; *Research in Science Education*; *Revista Electronica de Investigacion en Educacion en Ciencias*; *Science & Education*; *Studies in Science Education*.

Além destes periódicos, também foram consultadas as seguintes bases de dados: ERIC (*Educational Resources Information Center*); EBSCO (*Academic Search Premier*); *Google Scholar*; *Springerlink (Metapress)*.

A metodologia adotada para a pesquisa nos periódicos e nas bases de dados pesquisados foi buscar na ferramenta “*search*” das páginas desses na internet as entradas de título e resumo dos termos: “*molecular modeling*”, “*modelagem molecular*”, “*modelización molecular*”, “*modelación molecular*” e o termo “*quantum chemistry*” vinculado com “*education or learning or teaching or instruction*”.

---

<sup>3</sup> Optamos por não apresentar os resultados de 2012 até o presente por não termos feito uma análise mais aprofundada.

<sup>4</sup> Este periódico é da American Chemistry Society e não é considerado um periódico de Ensino de Química ou de Ciências. No entanto, optamos por incluí-lo por considerarmos que as publicações nele contidas sobre o uso de *software* de modelagem molecular podem contribuir para o Ensino de Química, a partir de uma transposição didática.

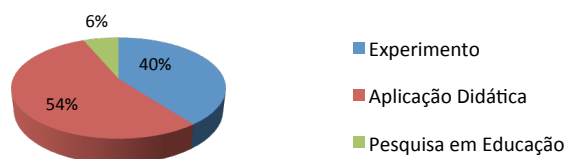
<sup>5</sup> Este periódico é da Sociedade Brasileira de Química e, da mesma forma, foi escolhido pela possível contribuição na área da Educação Química, a partir de transposição didática.

Os artigos pesquisados foram categorizados (BODGAN et al., 1994), em função da sua natureza, em três categorias: experimento, aplicação didática e pesquisa em educação. Os artigos classificados como experimento, tratam de trabalhos de natureza teórica, sem o envolvimento de alunos no laboratório ou mesmo em sala de aula. São relatos de sínteses de compostos e outros trabalhos teóricos que utilizaram ferramentas de modelagem molecular como centro ou mesmo como ferramenta de apoio. Vale lembrar aqui que o termo experimento faz parte de uma das seções do principal periódico de Educação Química, o *Journal of Chemical Education*.

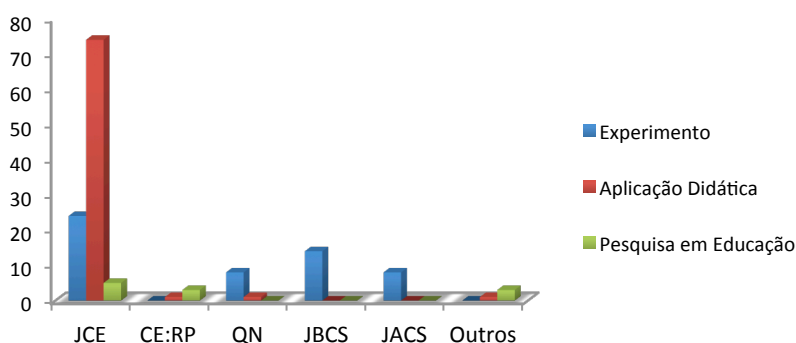
Os artigos classificados como aplicação didática são relatos de experiências em sala de aula, laboratório ou projetos envolvendo alunos. Nesses trabalhos, a participação do aluno na manipulação dos *softwares* de modelagem molecular como tarefa principal, ou mesmo como ferramenta auxiliar, é condição, e, por isso, diferencia-se da categoria experimento. Por fim, a categoria pesquisa em educação caracteriza trabalhos que apresentam algum referencial teórico e epistemológico da área. São trabalhos teóricos, aplicados ou relatos de experiências diversas envolvendo alunos, mas que trazem como diferencial o debate na área da Educação em Química ou Ciências, fundamentado em referenciais da área, e por isso se diferencia da categoria aplicação didática.

Após a realização da busca, não foi encontrado nenhum trabalho em 10 (dez) periódicos, a saber: *Contributions from Science Education Research; Enseñanza de las Ciencias; Journal of Computers in Mathematics and Science Teaching; Journal of Science Teacher Education; Journal of Science Education and Technology; Research in Science & Technological Education; Revista Electronica de Investigacion em Educacion em Ciencias; Química Nova na Escola; Science & Education; Studies in Science Education*.

Depois de feita a busca e refino dos trabalhos encontrados, chegamos a um total de 141 artigos publicados desde janeiro de 2001 até dezembro de 2011. A figura 1, a seguir, mostra a divisão quantitativa dos artigos nas categorias criadas.

**Figura 1:** Distribuição dos artigos por categorias de análise**Distribuição dos Artigos nas Categorias de Análise**

Em números absolutos, foram 77 (setenta e sete) trabalhos na categoria experimento, 53 (cinquenta e três) artigos na categoria aplicação didática e apenas 11 (onze) trabalhos na categoria pesquisa em educação. A distribuição destes artigos por periódico mostra um pouco do perfil destas revistas, pois é fácil perceber a distribuição diferenciada de eventos em cada categoria na figura 2, a seguir.

**Figura 2:** Distribuição dos artigos nas categorias, por Periódico**Distribuição de Artigos nas Categorias, por Periódico**

Como era esperado, o *Journal of Brazilian Chemical Society* (JBCS) possui um perfil de publicações mais teóricas, no qual se sobressaem artigos com relatos de experimentos. No *Journal of Chemical Education* (JCE), é notório o perfil mais voltado para aplicações didáticas, pois este é o principal periódico de Educação Química no mundo. Também chama a atenção, a quantidade de trabalhos publicados no JCE em comparação com os demais.

No periódico *Chemistry Education: Research and Practice* (CE:RP), principal periódico de Educação Química da Europa, apenas três publicações foram encontradas. Dois artigos para a categoria pesquisa em educação e um na categoria

aplicação didática. No periódico Química Nova (QN), vemos um perfil novamente mais voltado para a química teórica, no qual as publicações são, em sua maioria, de experimentos de natureza teórica. O periódico *Journal of American Chemical Society* (JACS) também possui um perfil voltado para a química teórica, pois todos os trabalhos encontrados se caracterizam como experimentos teóricos, em que não há o envolvimento de alunos. Nos demais periódicos, (*International Journal of Science Education; International Journal of Science and Mathematics Education; Journal of Research in Science Teaching e Research in Science Education*) encontramos poucos trabalhos publicados no período de dez anos.

A seguir, apresentamos uma descrição dos trabalhos presentes em cada categoria. Especificamente nas categorias experimento e aplicação didática, e em função da numerosa quantidade de trabalhos, criamos cinco subcategorias: **A) Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular** (envolve trabalhos que descrevem diversas regiões de moléculas, regioselectividade e análise conformacional); **B) Teoria de Ligação Química e Interações Intramolecular e Intermolecular** (envolve trabalhos que abordam as interações intra e intermoleculares, além de estrutura das moléculas sob o ponto de vista das ligações químicas existentes); **C) Modelagem Molecular e Análise Instrumental** (integração entre modelagem molecular e diversas técnicas de análise instrumental de caracterização qualitativa); **D) Reações Químicas** (envolve mecanismos de reações químicas e predição de produtos); **E) Sequências Didáticas** (propostas de sequências didáticas sobre um ou mais conteúdos a serem desenvolvidos).

### 3.1 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA EXPERIMENTO

A categoria experimento contou com cinquenta e três artigos publicados ao longo de dez anos. Após a divisão destes trabalhos nas subcategorias, verificamos que a maioria dos trabalhos está na categoria Reações Químicas, seguido da categoria Teoria de Ligações Químicas e Interações Intramolecular e Intermolecular. A seguir, apresentamos alguns exemplos de trabalho de cada subcategoria (os mais representativos).

### 3.1.1. *Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular*

Nesta subcategoria, estão trabalhos de análise conformacional clássica, um trabalho que envolveu o estudo estrutural e termodinâmico de uma mistura de etanol e água (MEJÍA et al., 2010), além do trabalho de Gonçalves et al. (2010), que usou dois métodos semi-empíricos para análise conformacional de três oximas (toxogonina, TMB-4 e HI-6) usadas em defesa química (antídoto contra agentes neurotóxicos).

Ainda nesta subcategoria, França et al. (2008) desenvolveram um trabalho importante na área da saúde. Trata-se do primeiro modelo por homologia a fim de propor uma estrutura 3D para o nucleosídeo hidrolase de *Leishmania donovani* (LdNH), responsável pela leishmaniose. O principal objetivo foi criar novas alternativas de combate à leishmaniose em contraposição às formas atuais, extremamente tóxicas e com muitos efeitos colaterais.

### 3.1.2. *Teoria de Ligação Química e interações intra e intermolecular*

Nesta subcategoria, tivemos doze trabalhos que envolveram estrutura atômica e molecular e interações intra e intermoleculares. Destacamos Kim et al. (2011) que descreveu o uso de ferramentas de modelagem molecular para várias drogas que agem no sistema nervoso central a fim de examinar os fatores que afetam em suas habilidades de penetrar na barreira hematoencefálica.

Dunn (2010) apresentou um estudo do modo de vibração normal da molécula de fulereno ( $C_{60}$ ) com o objetivo de conhecer as diferentes posições dos átomos de carbono em diferentes modos normais de vibração. Neste modo de vibração, todos os átomos da molécula se movem com a mesma frequência vibracional e simultaneamente passam por suas posições de equilíbrio. Ao final do trabalho, o autor conseguiu identificar 88 (oitenta e oito) diferentes modos normais para a molécula.

Dines et al. (2007) descreveram vários métodos envolvendo Química Quântica, ilustrando com exemplos. A base dos exemplos é a estrutura das moléculas, algumas propriedades e geometria molecular. Montgomery (2001) propôs a aplicação de uma variedade de técnicas de modelagem molecular em quatro experimentos comuns em Química inorgânica: determinação dos orbitais envolvidos na formação da ligação coordenada entre  $\text{BF}_3$  e  $\text{NMe}_3$ ; preparação dos isômeros e otimização das estruturas; preparação e caracterização do complexo com estrutura tipo “banco de três pernas” e, por fim, determinação da barreira de energia para a rotação do anel de ferroceno e do produto monossustituído a partir da acetilação de Friedel-Crafts com ciclopentadienila. Trabalhos como este desenvolvido por Montgomery são importantes porque revelam alguns conceitos que entendemos como fundamentais, tais como a barreira de energia para a rotação de ligações, em especial as ligações duplas. Todos os experimentos que realizamos na pesquisa também abordam esse tema e serão melhor explicados no capítulo de apresentação de resultados.

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

### *3.1.3. Modelagem Molecular e Análise Instrumental*

Luiz et al. (2004) fizeram a síntese e caracterização dos complexos 2-mercaptobenzoxazol pentacianoferrato (II/III) por diversas técnicas analíticas instrumentais e lançou mão de cálculos de modelagem molecular para fornecer a composição dos orbitais de fronteira de um dos ligantes para verificar que está de acordo com o modo de ligação proposto a partir dos dados experimentais.

Lira et al. (2006) analisou o extrato bruto da esponja *Aplysina Caissara* e conseguiu isolar cinco novos derivados da dibromotirosina. Os novos compostos tiveram suas estruturas determinadas por várias técnicas instrumentais e suas configurações relativas foram estabelecidas por RMN e modelagem molecular.

Morton et al. (2001) isolou e caracterizou, por diversas técnicas instrumentais, a Thiarubrina A, composto orgânico produzido por organismo vivo cuja reatividade, atividade biológica única e potenciais aplicações medicinais têm sido observadas. A geometria da molécula do produto foi otimizada utilizando o método semi-empírico e parametrização PM3. Uma das conclusões a que chegaram os autores é da possibilidade de incorporar os componentes teóricos aos experimentos de laboratório e, também, que certos experimentos, como o descrito por Morton et al. (2001), mostram aos alunos uma importante área da Química ainda pouco discutida e explorada pelos currículos dos cursos de graduação.

Silva et al. (2008) proporcionou um roteiro de síntese e estudo das atividades anti-inflamatórias de oito compostos, utilizando diversas técnicas analíticas e *software* de modelagem molecular para obter as propriedades eletrônicas dos compostos a fim de otimizar as geometrias. A utilização das técnicas integradas com a modelagem molecular proporcionou aos autores indicar que a atividade anti-inflamatória dos compostos analisados se deve a uma propriedade específica: a presença de um momento de dipolo nas moléculas e as cargas atômicas dos átomos de carbono através das quais os anéis aromáticos ligam-se aos anéis pirimidínicos.

#### 3.1.4. Reações Químicas

Nesta subcategoria estão os artigos que descrevem o fértil campo dos distintos mecanismos de reações químicas para a produção de diversos compostos. Aqui estão 27 (vinte e sete) trabalhos que integram as sínteses à modelagem molecular com métodos consagrados como: acilação de Friedel-Crafts, equilíbrio ceto-enólico, substituição nucleofílica aromática, dentre outros.



Cook e Feltman (2007) apresentaram um experimento clássico de equilíbrio ceto-enólico dos seguintes compostos: acetilacetona, dimedona, etil-acetoacetato e etil 4,4,4-trifluoroacetoacetato. O objetivo foi o de promover a análise dos fatores da influência do solvente na reação, bem como ilustrar o uso da modelagem molecular na determinação da origem da polaridade das moléculas envolvidas na reação. Foram estudados três solventes diferentes ( $\text{CDCl}_3$ , DMSO e Neat) e os resultados das reações foram distintos justamente pela diversidade de reagentes e solventes. As diferentes abordagens e métodos de modelagem molecular forneceram valores mais afastados ou mais condizentes com o observado experimentalmente. Por exemplo, os momentos de dipolo foram razoavelmente calculados por método semi-empírico (AM1), mas não produziram resultados razoáveis para as energias, pois este método indicou o oposto do observável experimentalmente para a forma enol do acetilacetona (produto na forma de gás). No entanto, o cálculo da densidade funcional por *ab initio* mostrou resultados convergentes e esse debate foi proposto aos estudantes, assim como o debate referente a outros fatores que influenciaram o equilíbrio, tais como: a presença de ponte de hidrogênio, os momentos de dipolo de cada um dos tautômeros, a natureza dos substituintes ligados ao composto  $\beta$ -dicarbonílico, dentre outros.

### 3.2 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA APLICAÇÃO DIDÁTICA

A categoria aplicação didática contou com 77 (setenta e sete) artigos publicados ao longo de dez anos. Após a divisão destes trabalhos nas cinco subcategorias, verificamos que há uma distribuição relativamente homogênea de trabalhos em cada uma, com um número um pouco maior de eventos na subcategoria Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular, seguido da subcategoria Teoria de Ligações Químicas e Interações Intra e Intermolecular. A seguir, apresentamos os exemplos de trabalhos mais representativos de cada subcategoria.

### 3.2.1. *Estereoquímica, Análise Conformacional e Análise Molecular*

Nesta subcategoria, tivemos o maior número de trabalhos publicados em função da facilidade que as ferramentas de modelagem molecular oferecem. Yuriev, Chalmers e Capuano (2009) relataram a utilização do *software Hyperchem* para a realização de um experimento em uma disciplina que aborda a descoberta, *desing* e desenvolvimento de fármacos. No experimento, houve um espaço prévio para debate com os estudantes sobre as configurações necessárias e, depois, sobre os dados gerados. Os estudantes desenvolveram as habilidades de interpretação e análise desses dados.

### 3.2.2. *Teoria de Ligação Química e interações intra e intermolecular*

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

O estudo das ligações de organometálicos foi facilitado pelo trabalho desenvolvido por Strijdonck et al. (2002). Aspectos importantes da Química organometálica foram abordados com os estudantes, tais como: características dos orbitais 'd', doação de elétrons  $\pi$ , retro doação de elétrons  $\pi$  e a geometria dos compostos.

### 3.2.3. Modelagem Molecular e Análise Instrumental

Encontramos nessa subcategoria uma quantidade interessante de artigos que mesclaram as ferramentas de modelagem molecular com métodos instrumentais. Habata e Akabori (2001) apresentaram uma proposta de ensino do método instrumental  $^1\text{H}$  RMN (ressonância magnética nuclear de prótons) na qual foi usado o mapa de potencial eletrostático para descrever o efeito da anisotropia magnética do benzeno assim como para descrever efeitos de eletronegatividade em outras moléculas como  $\text{CHCl}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  e  $\text{CH}_3\text{Cl}$ .

Um trabalho interessante desenvolvido por Shusterman et al. (2007, b) envolveu os estudantes no estudo das mudanças dos picos de absorção do espectro UV-Vis do azuleno ( $\text{C}_{10}\text{H}_8$ ) pela introdução de substituintes que causam uma mudança radical na cor do produto em função das transições ocorridas nos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO).

### 3.2.4. Reações Químicas

Nesta categoria, destacamos o trabalho de Reeve (2004). O autor descreveu um experimento baseado em descoberta, no qual os estudantes foram incentivados a desenvolver as habilidades de resolução de problemas em contraponto à conhecida abordagem dos laboratórios: um roteiro como se fosse uma receita de bolo. Os estudantes de segundo nível das disciplinas de laboratório de Química Orgânica desenvolveram o roteiro de uma reação de acilação de Friedel-Crafts, debatendo os parâmetros da reação e realizando-a em laboratório. O *software* de modelagem molecular foi usado para definir qual dos isômeros é o mais estável termodinamicamente e chegaram à conclusão de que o isômero orto substituído é o mais estável. Mecânica molecular também é utilizada.

### 3.2.5. Sequências Didáticas

Nesta categoria, encontramos 10 (dez) artigos. Destacamos o trabalho de Cody e Wiser (2003) no qual foi proposta uma sequência didática cujo objetivo foi o de expandir o conhecimento dos estudantes de primeiro ano da graduação sobre ligação química, VSEPR (teoria da repulsão de elétrons da camada de valência). Os estudantes construíram estruturas e aplicaram cálculos semi-empíricos para otimizar as geometrias. Também foram estudados os momentos de dipolo, as forças intermoleculares e os orbitais moleculares.

### 3.3 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA PESQUISA EM EDUCAÇÃO

A categoria pesquisa em educação contou com apenas 11 (onze) artigos ao longo de dez anos. Por se tratar de uma categoria importante para nossa pesquisa, optamos por apresentar todos os trabalhos encontrados. Barnea e Dori (2000) discutiram qual a percepção de “modelo” que professores de química em serviço e em formação possuíam, quando comparados a grupos de estudantes de graduação em Química (grupo experimental e grupo controle). Referenciais de epistemologia foram utilizados para discutir a utilidade crucial que um modelo tem para a ciência, em especial Toulmin. Os autores concluíram que discutir a noção de “modelo” foi importante porque expandiu a visão de todos os grupos participantes do estudo. O experimento em si teve uma execução longa, que envolveu, até mesmo, uma etapa prévia de formação de professores para utilizar modelagem molecular.

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

Sanger e Badger II (2001) relataram um trabalho de pesquisa na qual o principal objetivo foi o de mostrar como as estratégias de visualização por computador podem ser utilizadas como ferramenta auxiliar aos métodos tradicionais de Ensino de Química, em especial o ensino de polaridade molecular e miscibilidade. Os autores compararam as respostas de um grupo controle de 36 estudantes universitários do segundo semestre de química – os quais se utilizaram de gráficos, modelos moleculares e demonstrações físicas – com um grupo experimental de mesmo número. Esse grupo respondeu o mesmo questionário, mas utilizou a simulação em computador e gráficos de densidade eletrônica realizados no *software Spartan*.

Sobre o tópico polaridade molecular, os dois grupos tiveram que responder sobre a polaridade de algumas moléculas previamente escolhidas. Além disso, também tiveram que prever a maior ou menor facilidade de dissolução de duas moléculas distintas em dióxido de carbono líquido. Os resultados dos questionários sobre polaridade molecular foram tratados e analisados por análise de variância (ANOVA) e mostraram que o grupo que teve acesso aos mapas de potencial e às simulações do computador teve mais facilidade para determinar a polaridade das moléculas estudadas. Os autores apontaram que a visualização das regiões de maior densidade eletrônica (vermelho) e menor densidade (azul) junto com o cálculo do momento de dipolo das moléculas feito pelo *Spartan* auxiliou o grupo experimental a “reconhecer a importância da forma da molécula na determinação da sua polaridade” (tradução nossa).

Sobre o tópico miscibilidade de compostos em água, foram feitas questões acerca da miscibilidade de compostos polares, não polares e iônicos em água, com o foco nas forças intermoleculares desses compostos puros e as forças relativas dessas interações como uma explicação da regra “semelhante dissolve semelhante”. Os autores relataram que ambos os grupos presenciaram demonstrações químicas da miscibilidade de várias misturas, sendo que o grupo experimental teve contato tanto com simulações de computador das mesmas misturas quanto com mapas de potencial eletrostático dos compostos puros. Tais simulações iniciaram mostrando as distintas misturas homogêneas e as forças de London; as forças dipolo-dipolo, as ligações de hidrogênio presentes e as interações que ocorrem na mistura, pois a miscibilidade

pode ser explicada em termos de atração de forças positivas (vermelho) e negativas (azul) entre as moléculas.

As respostas de ambos os grupos a esse conjunto de questões também foram analisadas por ANOVA e a conclusão que os autores chegaram foi que o grupo com acesso às simulações do *software Spartan* teve mais facilidade de compreender os fatores que determinam a maior ou menor miscibilidade das misturas estudadas. De uma maneira geral, os autores defenderam que os estudantes que têm acesso a mapas de densidade eletrônica desenvolvem uma melhor compreensão conceitual de polaridade molecular e forças intermoleculares. Além disso, as simulações são particularmente efetivas em auxiliar os estudantes a visualizar processos químicos mais dinâmicos em nível molecular.

Jones (2001) relatou a reestruturação curricular, realizada em 1996, no currículo do curso de Química do Adam State College, no Estado do Colorado/USA, na qual o principal objetivo foi o que expor todos os estudantes de todos os níveis ao uso de ferramentas de modelagem molecular. A estratégia utilizada para tal foi a de usar os experimentos de modelagem como suporte aos experimentos de laboratório, numa tentativa de fundir os aspectos teóricos e práticos da Química. Os *softwares* de modelagem molecular também foram instalados em computadores em salas de aula a fim de que os professores pudessem utilizá-los para abordagens teóricas e práticas de conceitos da Química, e para ilustrar apropriadamente tais conceitos com cálculos e representações gráficas.

Em Química Básica e Geral, a modelagem molecular foi utilizada a fim de comparar as características estruturais das moléculas simples, construindo, com o *software*, os resultados previstos pelas teorias da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência, da hibridização e das tendências vistas na tabela periódica. Também foram planejados experimentos para essas disciplinas que envolveram o uso de cálculos de densidade eletrônica para ilustrar as diferenças entre as ligações covalentes, covalentes polares e iônicas, dentre outras contribuições.

Nas disciplinas de Química Orgânica, o *software* foi usado como suporte de vários experimentos de laboratório. Os estudantes usavam o *software* para calcular o calor de formação dos candidatos a produtos de reações químicas envolvendo

compostos orgânicos com o objetivo de prever qual dos produtos poderia ser obtido preferencialmente. A posterior análise instrumental da mistura era utilizada para confirmar a predição. Outras aplicações similares também foram relatadas. Nas demais disciplinas, como a Química Analítica e a Físico-química, foram relatadas formas de integração do *software* de modelagem molecular.

A conclusão a que os autores chegaram foi de que a introdução de *softwares* de modelagem molecular contribuiu para a compreensão de diversos conceitos da Química por parte dos estudantes, segundo o relato (dos próprios estudantes). Os autores ainda apontam o próximo desafio: o de desenvolver o mesmo trabalho nos cursos de Bioquímica, pois há vários experimentos publicados com ênfase nessa área do conhecimento.

O artigo de Wu *et al.* (2001) se tornou uma referência importante para a área de ensino de Química envolvendo ferramentas computacionais. Nesse trabalho, os autores perceberam que os estudantes de Química possuem, historicamente, dificuldades de aprendizagem de conceitos em nível simbólico e molecular. Diante disso, promoveram um estudo que buscou investigar como os estudantes de uma pequena escola secundária de uma cidade universitária do centro-oeste americano desenvolveram a compreensão das representações químicas com o auxílio de ferramentas computacionais baseadas em visualização, que lhes permitiu construir e manusear os modelos moleculares.

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

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

quatro estudantes do décimo primeiro ano. Para responder à primeira questão norteadora, os autores utilizaram as respostas dos pré-testes e pós-testes com um tratamento estatístico adequado. A conclusão foi que a maioria dos estudantes conseguiu adquirir conhecimento conceitual nos níveis macro e microscópicos e foram capazes de traduzir várias representações químicas.

Para responder quais padrões de aprendizagem os estudantes demonstram ao traduzir representações químicas e construir modelos usando o *software e-Chem*, os autores fizeram uma comparação do desempenho ao usar o *software* e modelos físicos, e realizaram entrevistas com os estudantes. A análise destes dados permitiu aos autores concluir que a representação das moléculas pelo *software* usando o modelo de esferas sobrepostas (*space-filling*) foi o mais atrativo visualmente. No entanto, o modelo de bolas e palitos (*balls-and-sticks*) foi o mais concreto para os estudantes (sem distinção entre o modelo físico e o computacional) porque esse modelo transmitiu a informação visível dos átomos e das ordens de ligação.

Com relação a forma como os estudantes absorveram as informações visuais e conceituais das representações, os dados colhidos das entrevistas revelaram que os estudantes foram capazes de realizar o entrelaçamento das informações visuais e conceituais, promovendo a conexão visual entre as fórmulas estruturais e os modelos mentais correspondentes. Por fim, a última questão norteadora foi desvendada na análise dos vídeos e entrevistas. O recurso de rotação das moléculas presente no *software* auxiliou os estudantes a visualizar de que forma eles poderiam transformar o modelo 2D em 3D, auxiliando, também, na construção de modelos mentais.

Paselk e Zoellner (2002) relataram mais uma iniciativa de introduzir as ferramentas de modelagem molecular e Química Computacional no currículo de um curso de graduação em Química. Desta vez, foi na Universidade de Humboldt, nos Estados Unidos. O programa incluiu a criação de um novo laboratório, voltado para fomentar projetos de pesquisa para graduação e melhorias para o conjunto de métodos computacionais utilizados nos currículos dos cursos de Química e Física.

O artigo descreve a forma como os trabalhos foram desenvolvidos: “Os aspectos teóricos são abordados apenas em nível qualitativo, e o curso tem o foco no desenvolvimento da prática, trabalhando o conhecimento dos programas e fomentando



*a compreensão de como escolher o método computacional adequado para a solução do problema químico proposto*". (Tradução nossa).

O laboratório instrucional foi utilizado progressivamente para introduzir métodos de modelagem molecular e Química Computacional no currículo do curso e uma das primeiras aplicações foi em Química Geral, como forma de ilustrar a geometria molecular de compostos. Os estudantes criaram primeiramente as estruturas de Lewis de compostos simples e, então, usaram a teoria da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência para prever as geometrias moleculares. Após essa etapa, os estudantes utilizaram modelos de bolas e palitos para construir as moléculas em um laboratório regular para, num terceiro momento, utilizarem o *software* de modelagem molecular no laboratório informatizado para visualizar e manipular as mesmas estruturas. A combinação destas ações facilitou a compreensão dos estudantes acerca da estrutura molecular.

Saari e Viiri (2003) estudaram o impacto de uma sequência didática para o aprendizado de modelagem para estudantes do nível secundário de duas escolas distintas. As perguntas da pesquisa foram: a) Como o ensino de modelos pode afetar a noção de modelos que os estudantes possuem? b) O que vai acontecer com os conceitos prévios de modelos dos estudantes após a sequência didática de modelagem? c) Quais as categorizações possíveis de se fazer em relação aos conceitos prévios de modelos que os estudantes possuem? O trabalho descreveu os conceitos prévios dos estudantes do termo "modelo" como sendo um artefato, algo concreto. Além disso, os estudantes conceberam que somente podemos criar um modelo sobre algo que vemos. O que não vemos, segundo as concepções prévias dos estudantes, não pode ser modelado. A ideia de modelo desses estudantes foi que ele pode ser copiado, diferentemente do que se faz na ciência, em que os modelos são criados na tentativa de descrever um fenômeno e prever seu comportamento.

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

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

Os resultados das pré-entrevistas mostraram que a noção de modelo dos estudantes era muito limitada: dos trinta e um estudantes entrevistados, vinte e nove entendiam equivocadamente que modelos são objetos que podem ser copiados exatamente. Por outro lado, após a sequência didática, as entrevistas mostraram que uma mudança significativa ocorreu. Apenas dois estudantes mantiveram a opinião equivocada da pré-entrevista. Com relação ao estudo que mostrou o quão permanente foram os resultados da aprendizagem, onze estudantes mantiveram sua concepção de modelo, modificada pela sequência didática, e cinco retomaram a opinião baseada nos seus conhecimentos prévios.

Por fim, os autores defenderam que noções mais avançadas de modelos podem ser adotadas nesse nível de ensino, pois os resultados mostraram que uma parcela considerável de estudantes desenvolveu noções mais sofisticadas de modelos e, de uma maneira geral, mantiveram estas noções mesmo com o passar do tempo. Os autores apontaram ainda que o ensino de modelos requer: a) Períodos extensivos de tempo; b) Diversidade de contextos; c) Explicitação de quais modelos podem ser usados em cada situação; d) Uso de diferentes modelos para modelar o mesmo fenômeno; e) Discussão com os estudantes das vantagens e limitações de modelos gerados e, por fim, f) Introdução de tópicos de modelagem na formação inicial e continuada de professores.

Jones et al. (2005) apresentaram um resumo das contribuições realizadas por um projeto financiado pelo principal órgão de fomento à pesquisa dos Estados Unidos. O projeto teve por objetivo construir colaborações entre diversas comunidades de pesquisadores a fim de investigar o papel da visualização molecular no aprendizado de conceitos. O início das atividades do projeto foi justamente a investigação das características das representações moleculares, das suas interações

com a visualização de estruturas moleculares e dinâmicas, bem como o papel da modelagem molecular nos currículos de Química, além de perspectivas para a pesquisa em visualização molecular na aprendizagem de Química.

O artigo traz um relato de como os projetos foram desenvolvidos:

Uma variedade de produtos foi produzida nas colaborações, incluindo novos instrumentos de avaliação, sites de pesquisa ou difusão, vídeos digitais de demonstrações e experimentos, um conjunto de animações, programas de software educacionais, materiais instrucionais, de papel e duas bibliografias anotadas. (JONES et al., 2005, p. 141). (Tradução nossa).

Além disso, o artigo apresenta uma análise do que foi positivo e negativo, sob o ponto de vista dos participantes. Vários projetos foram criados, e a conclusão dos autores foi que este esforço, que também acreditamos ser o mesmo necessário para efetivamente utilizarmos modelagem molecular na Educação Química, deve ser realizado por profissionais de química, de educação (Química), Psicologia Cognitiva, dentre outros; em colaboração estreita à boa comunicação.

Kaberman e Dori (2007) relataram a reforma do currículo do curso de graduação de Química ocorrida no Instituto de Tecnologia, em Israel. No bojo dessa reforma, foram criadas estratégias de introdução de ferramentas de modelagem molecular, tanto em sala de aula quanto em laboratório. Especificamente para o laboratório, os autores criticaram a forma como as práticas costumam ocorrer, com o planejamento de experimentos que não propiciam a construção de novos conhecimentos, mas somente a confirmação de teorias conhecidas, leis e fatos confirmados pela ciência.

Em contraposição a essa realidade, de como as aulas de laboratório costumam ser planejadas e executadas – levando os estudantes a não produzirem novos conhecimentos – os autores apresentaram a estrutura curricular proposta na reforma, na qual as estratégias didáticas foram todas voltadas para propiciar aos estudantes a construção de habilidade de pensamento de alta ordem, baseada na taxonomia de Bloom (BLOOM, 1956), também conhecida como a taxonomia dos objetivos educacionais.

O currículo foi composto de cinco unidades de aprendizagem e uma das unidades foi desenvolvida com ambientes informatizados para sala de aula e laboratório com ênfase no questionamento científico, nos estudos de caso e na modelagem molecular. O principal objetivo do trabalho apresentado foi o de realizar um estudo longitudinal, investigando os efeitos do uso das simulações e ambientes informatizados em três habilidades de pensamento de alta ordem: saber formular perguntas, questionamentos e modelagem. Com isso, os autores buscaram responder a duas perguntas: existe diferença na construção de habilidades de alta ordem em dois grupos distintos de estudantes, a partir da introdução de atividades em ambientes informatizados? Quais os efeitos do uso de modelagem molecular nas habilidades de modelagem dos estudantes, especificamente em relação à transferência entre modelos moleculares e fórmulas estruturais e modelos de moléculas em 2D e 3D?

Para tanto, os pesquisadores organizaram um grupo controle de 155 (cento e cinquenta e cinco) estudantes e compararam os resultados com dois grupos de estudantes: um grupo de 224 (duzentos e vinte e quatro) estudantes do segundo estágio e um grupo de 390 (trezentos e noventa) do terceiro estágio. O grupo controle foi submetido ao ensino tradicional, centrado no professor e em cujas seções teóricas foram acompanhadas de aulas de laboratório. Os grupos experimentais executaram as atividades nos ambientes informatizados e tiveram contato com artigos científicos com ênfase no questionamento e em questões industriais. Os professores que concordaram em aplicar as atividades de ambiente informatizados nas unidades didáticas passaram por treinamento específico para poder contribuir com a pesquisa. Existiam, portanto, dois grupos de professores: os que conduziam as atividades tradicionais (grupo de estudantes controle) e os que conduziam as atividades nos ambientes informatizados (grupos experimentais).

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

nível de conhecimento químico dos estudantes foi categorizado em baixo, intermediário e alto.

Os autores, após a análise dos dados, chegaram à conclusão de que o rendimento dos estudantes do grupo experimental no pós-teste, para saber formular perguntas, questionamentos e modelagem, foi muito significativo em relação ao pré-teste, em especial daqueles que tiveram seu nível de conhecimento categorizado como baixo. Da mesma forma, foi muito significativa a melhora da capacidade de fazer a passagem de moléculas do modelo 3D para a fórmula estrutural e vice-versa, entre os pré-testes e pós-testes. Dessa forma, foi significativa a construção de habilidades de pensamento de alta ordem nos estudantes do grupo experimental em função da participação nas atividades no ambiente informatizado, utilizando estratégias que privilegiavam o questionamento, a análise de estudos de caso, a capacidade de questionar, dentre outras.

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

Dentre as razões pelas quais os docentes informaram utilizar *softwares* de modelagem molecular, destacaram-se o fato de que estes *softwares* “*ilustram conceitos difíceis para estudantes*”; “*desenvolvem a capacidade de visualização dos estudantes*” e outras respostas associadas a motivar os estudantes a aprender Química. Por outro lado, as razões que os professores apontaram para não utilizar modelagem molecular em sua prática didática, destacaram-se “*conteúdo programático muito extenso, incapaz de incorporar estas atividades*”; “*muitos alunos por sala de aula*” e “*dificuldades pessoais no uso de Tecnologias de Informação*”.

A investigação dos autores também mostrou uma utilização variada de modelagem molecular no ensino. No entanto, a prática mais comum do uso de

modelagem molecular foi apontada: estrutura espacial de moléculas e isomeria; análise de orbitais atômicos e moleculares; estudo de ligações químicas e densidade eletrônica e interações intermoleculares (ligação de hidrogênio, forças de Van der Waals). Em que pese os próprios autores reconhecerem que o estudo é baseado em dados limitados (apenas dezenove professores responderam o questionário) talvez as conclusões mais importantes do estudo sejam: a) a formação de professores futuramente deve enfatizar mais o uso de diferentes métodos de ensino em modelagem molecular com o objetivo de propiciar apoio à aprendizagem significativa de Química e formação de habilidades de pensamento de ordem superior e b) mesmo que recursos computacionais estejam implementados, os professores se recusam a utilizar a modelagem molecular sem algum tipo de treinamento que os permitam sentir-se à vontade com estas ferramentas.

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

Dos objetivos iniciais do programa, chamou atenção aquele que propunha dar a oportunidade aos estudantes do uso da modelagem molecular computacional como uma ferramenta prática de resolução de problemas a fim de analisar os resultados de reações químicas já realizadas em laboratório e predizer resultados de reações a ser conduzidas em laboratório posteriormente. Os autores discorreram sobre as dificuldades iniciais dos estudantes em relação à teoria do orbital molecular, a partir da exposição dos alunos aos conteúdos que aparentemente entram em contradição com o que têm aprendido sobre estrutura eletrônica – estruturas de Lewis e teoria da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência, combinada com a teoria de hibridização e de ligação de valência. Um exemplo descrito sobre essas contradições

está na estrutura eletrônica do oxigênio na molécula da água, na qual as teorias de ligação e de hibridização vistas na Química Geral e livros de Química Orgânica levam os alunos a concluir que existem dois pares de elétrons não ligantes (hibridização  $sp^3$ ). No entanto, ao se depararem com os cálculos realizados pelo *software*, por métodos semi-empíricos (PM3) e *ab initio* (6-31G\*), verifica-se que existe de fato apenas um par de elétrons não ligante presente num orbital p puro.

Desta forma, os autores defenderam que o uso da teoria do orbital molecular em conjunto com os *softwares* de modelagem molecular produziria um ganho de compreensão aos estudantes sobre estrutura atômica, ligação química e reatividade. Tópicos que são abordados com outras teorias podem ser mais bem compreendidos e até desmistificados utilizando a teoria do orbital molecular, tais como: aromaticidade, conjugação, hiperconjugação, reações de substituição eletrofílica aromática, dentre outras.

Johnson e Engel (2011) apresentaram o relato da experiência de alteração curricular do curso de Química da Universidade de *Washington* com o objetivo de integrar a Química Computacional às disciplinas de Físico-química. Os autores fizeram uma abordagem inicial, mostrando as aplicabilidades já existentes dos *softwares* de modelagem em outras áreas da Química, apontando exemplos e levantando hipóteses para a não utilização destas ferramentas em disciplinas de Físico-química: excesso de conteúdo a vencer e pouco tempo para tal; falta de estrutura de *hardware* e *software*; tempo e estrutura para treinamento prévio de estudantes para utilizar o *software*, além da necessidade de suporte técnico permanente.

As hipóteses levantadas para tentar explicar a pouca introdução da modelagem molecular computacional foram testadas nas disciplinas de mecânica quântica e espectroscopia, com 75 (setenta e cinco) estudantes de graduação. As conclusões a que chegaram os autores foram que os estudantes não tiveram maiores problemas para operar o *software*, especialmente em função dos tutoriais fornecidos previamente; com relação ao acesso ao *software*, foram utilizadas versões estudantis do *software* (mais baratas) ou mesmo *softwares* livres ou livres para uso acadêmico, o que barateou o custo; por fim, a introdução das ferramentas computacionais não

perturbou significativamente a estrutura de conteúdos do currículo, pois apenas um único tópico foi deixado de fora em relação à disciplina convencional.

### 3.4 CONSIDERAÇÕES

Ao final da revisão de literatura e da análise dos artigos encontrados, chegamos à conclusão de que a integração dos *softwares* de modelagem molecular com o ensino de Química – tanto no nível do ensino médio quanto na graduação – traz benefícios contundentes ao processo de ensino e aprendizagem. Encontramos fartos exemplos desses benefícios nos artigos analisados. Com a utilização da modelagem molecular por computador, os estudantes têm a oportunidade de desenvolver habilidades visuoespaciais e de compreender melhor alguns aspectos da Química no nível microscópico e simbólico que, normalmente, são de difícil compreensão.

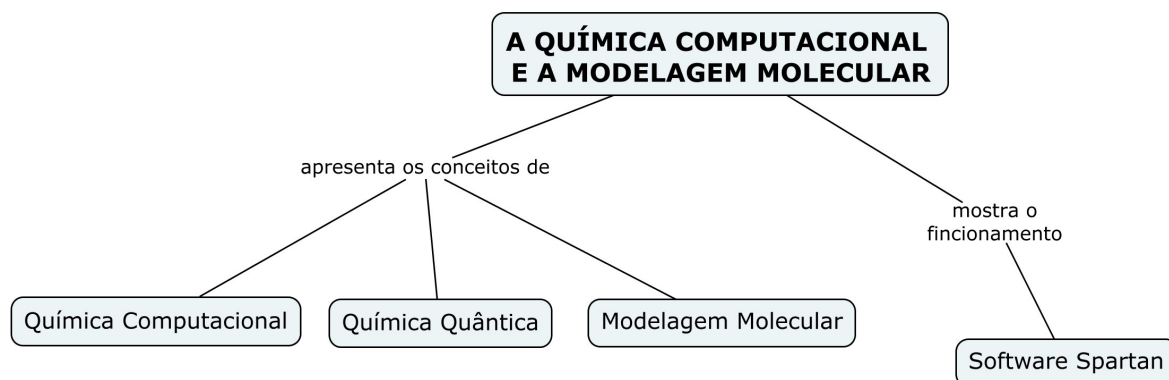
A revisão de literatura nos permitiu verificar um número interessante de relatos dessa integração em países como Estados Unidos, Reino Unido, dentre outros. Relatos que mostraram a utilização, por parte dos estudantes, de diferentes *softwares* de modelagem molecular em várias áreas da Química. Tivemos a oportunidade de manusear artigos que apresentaram propostas de sequências didáticas completas com o objetivo de integrar o uso destes programas no ensino da Química. No entanto, os critérios de pesquisa não permitiram identificar trabalhos similares no Brasil e na América Latina. Isto não quer dizer que não existam trabalhos sendo desenvolvidos nestas regiões. No entanto, a ausência de artigos publicados nos principais periódicos da área de educação em Química e Ciências dá uma indicação de que é parca a produção de pesquisa científica envolvendo a integração de *softwares* de modelagem molecular ao Ensino de Química no Brasil e na América Latina.

Diante disso, apontamos para a necessidade de fomentar a pesquisa na área da Educação Química a fim de possibilitar uma mudança de cenário, pois acreditamos que o ensino de Química pode passar por mudança positivamente radical com a introdução dos *softwares* de modelagem molecular na abordagem de vários tópicos. Além disso, essa integração pode ser benéfica na medida em que pode trazer com ela



uma mudança na abordagem dos conteúdos, como por exemplo, a maior ênfase do ensino da teoria de ligação química na teoria do orbital molecular, em detrimento à teoria de ligação de valência.

## A QUÍMICA COMPUTACIONAL E A MODELAGEM MOLECULAR



*A ciência é a aproximação progressiva  
do homem com o mundo real.  
(Max Planck)*

Neste capítulo procuramos abordar de forma não aprofundada o início da Química Quântica e suas contribuições para a ciência Química. Optamos por não aprofundar essa temática porque o foco de nossa pesquisa não é a Química Quântica em si, mas as suas contribuições para o Ensino de Química por intermédio dos *softwares* de modelagem molecular. Também tratamos da modelagem molecular e suas contribuições, além de apresentarmos as potencialidades e principais ferramentas do *software Spartan 8.0* (WAVEFUNCTION, 2014), utilizado nesta pesquisa.

#### 4.1 O INÍCIO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL

A comunidade científica - em especial os químicos e os físicos - sempre buscou compreender o comportamento dos átomos e moléculas, bem como o das ligações químicas. Ao longo da história, muitos modelos foram propostos para tal finalidade. Em meados do século XIX, as primeiras regras de representação das fórmulas estruturais para compostos da Química Orgânica foram definidas. As contribuições de Kekulé sobre a estrutura do benzeno (NETO, 2007); de Pasteur com a descoberta da isomeria (CATTANI; BASSALO, 2009); e de Hofmann, com a representação do metano como uma estrutura de bolas unidas por varas (MEINEL, 2004), foram importantes para a evolução dos modelos de estruturas químicas.

No entanto, as dificuldades matemáticas encontradas na solução das equações da mecânica quântica, em especial a solução correspondente para a equação de Schrödinger, impediram avanços mais significativos desde a década de 1930. Segundo Freitas (1998), essa dificuldade levou ao surgimento da Química Quântica e a um longo caminho de afirmação desta nova ciência até meados da década de 1960, quando John A. Pople "*vislumbra que a sinergia entre facilidades computacionais e programas eficientes desempenharia um papel importante no desenvolvimento da pesquisa química*" (FREITAS, 1998, p. 4).

A junção entre a Química e a Computação, dando origem à Química Computacional, só foi possível devido ao desenvolvimento de novas tecnologias

capazes de melhorar o processamento dos computadores, bem como à criação de *softwares* capazes de processar e traduzir os complexos cálculos da mecânica quântica e outros métodos de igual nível de complexidade. Nesse contexto, a Química Computacional se alia à Química teórica, incorporando seus princípios em programas de computador (comumente chamados de *softwares* de modelagem molecular) a fim de calcular propriedades e estruturas de moléculas.

Com a chegada da década de 1940, a informática teve seu desenvolvimento acelerado. Na década de 1950 iniciaram os primeiros cálculos de moléculas simples (SMITH; SUTCLIFFE, 1997). A partir daí, os químicos teóricos passaram a ser usuários de computadores para o desenvolvimento deste ramo da Química. Na década de 1970, houve uma forte expansão, com o lançamento dos primeiros *softwares* dotados de ferramental para usar o método *ab initio*<sup>6</sup>. Na década de 1980, esta expansão consolidou-se, período em que várias publicações passaram a se dedicar especificamente ao assunto.

Nesse sentido, a utilização destes programas proliferou-se em várias áreas do conhecimento químico. Rodrigues (2001) abordou os métodos de desenvolvimento de fármacos e apontou que “a maioria dos programas de modelagem molecular são capazes de desenhar a estrutura molecular e realizar os cálculos de otimização geométrica e estudos de análise conformacional” (RODRIGUES, 2001, p. 43). Além disso, o autor também informa que os *softwares* de modelagem molecular podem ser utilizados para efetuar o planejamento teórico de novos fármacos, de forma que “satisfaçam as propriedades eletrônicas e estruturais para um perfeito encaixe do sítio receptor” (RODRIGUES, 2001, p. 43); para definir parâmetros estéricos e eletrônicos; para compor o mapa de potencial eletrostático, bem como todas as informações sobre os orbitais HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) e LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), dentre outras atividades.

---

<sup>6</sup> *Ab initio* caracteriza-se como um conjunto de técnicas de cálculo de propriedades de moléculas que não usa nenhuma aproximação empírica e, sim, os conceitos “puros” da Química Quântica.

## 4.2 A QUÍMICA QUÂNTICA

A Química Quântica é o campo científico situado entre a Química e a Física que se utiliza de ferramentas da Mecânica Quântica e da Teoria Quântica dos campos para descrever, explicar e prever o comportamento físico e químico de átomos, moléculas, íons e redes cristalinas (MORGON; COUTINHO, 2007). Até o final do século XIX, a comunidade científica acreditava que as leis da mecânica clássica – dividida em teoria corpuscular e teoria ondulatória – eram suficientes para descrever os fenômenos da natureza até então observados, pois acreditava-se que a matéria era formada por corpúsculos (partícula), que a luz era formada por ondas e que ambas – matéria e luz – eram coisas distintas.

Observando a linha cronológica das descobertas científicas, podemos dizer que, num espaço de tempo muito curto, uma revolução científica foi conduzida. Entre o final do século XIX e o início do século XX, o comportamento da matéria deixou de ser descrito somente pela mecânica clássica – cujos limites de validade foram bem definidos à época – e passaram a ser descritos também pela mecânica quântica. Nesse contexto, podemos dizer que a Química Quântica, a partir da parceria com a física atômica e molecular, propõe-se a descrever matematicamente o comportamento da matéria em nível microscópico e molecular, visto que a mecânica clássica naufragou na tentativa de descrever os sistemas atômicos.

Segundo Dias (1982), Mecânica Quântica foi fundamentada no modelo de onda, no qual o átomo possui um núcleo positivo circundado de elétrons, que são descritos como “nuvens” movendo-se em orbitais. As posições desses elétrons são definidas a partir de uma distribuição de probabilidades e não mais por pontos discretos. Essa distribuição de probabilidades é conhecida a partir da equação de onda – a equação de Schrödinger – elevada ao quadrado,  $\psi^2(x)$ .

### 4.3 O QUE É MODELAGEM MOLECULAR?

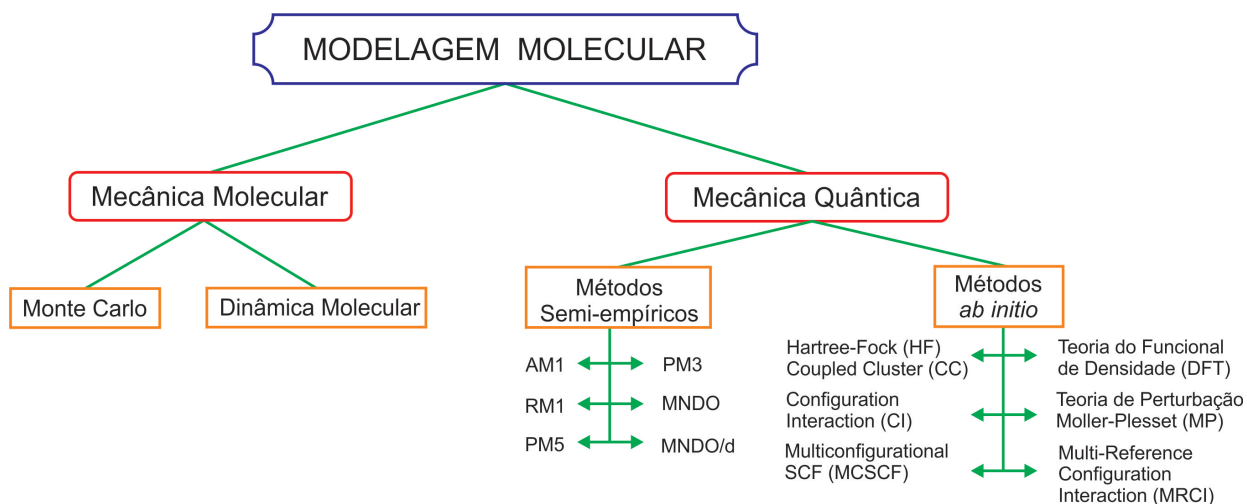
Segundo Höltje et al. (2008), os métodos modernos de modelagem molecular foram desenvolvidos a partir da primeira metade do século XX. Os autores explicaram que o uso da cristalografia foi uma via decisiva para o desenvolvimento da modelagem molecular, uma vez que as representações bidimensionais das estruturas complexas dos cristais se mostravam inadequadas. Naquele tempo, o uso de *kits* moleculares era a única opção e esta tarefa, por um bom tempo, foi sendo desenvolvida a ponto de se conseguir construir as estruturas tridimensionais dos cristais de forma bastante exata. Foi somente no início dos anos de 1970 que, segundo os autores, foi possível realizar a descrição de uma molécula na tela do computador. Desde então, os programas de modelagem molecular foram sendo desenvolvidos e o ferramental computacional tem se tornado bastante eficiente.

A modelagem molecular tem como principal objetivo prever o comportamento de sistemas reais. É a partir dela que podemos prever e descrever o comportamento de estruturas moleculares até mesmo antes de sintetizá-las em laboratório. Para tanto, é preciso estabelecer e definir um modelo que possa descrever corretamente o comportamento de um sistema, incluindo as interações inter e intramoleculares; realizar os cálculos necessários e analisar os resultados obtidos a fim de chegar à conclusão da validade do modelo. A modelagem molecular também é largamente utilizada no planejamento de novos fármacos (BARREIRO et al., 2002), na criação de estratégias de combate à AIDS (PEÇANHA; ANTUNES, 2002), na pesquisa de processos de polimerização (LENZI et al., 2004), na obtenção de novos produtos para a indústria de cosméticos (SCOTTI et al., 2007), dentre várias outras aplicações largamente descritas em artigos publicados nos periódicos da área. Especificamente na área do ensino, a realidade é um pouco diferente. Há uma mescla de avanços e resistências à incorporação das ferramentas de modelagem molecular nas atividades didáticas.

Os principais programas de modelagem molecular, dos quais o *Spartan* é um dos mais usados, possuem uma variedade de procedimentos e métodos matemáticos

que são utilizados para cálculo de energias e de geometrias moleculares, dentre outros. Podemos dividi-los em três grandes grupos conforme a figura 3.

**Figura 3:** Descrição básica dos diferentes métodos utilizados na Modelagem Molecular



Fonte: Do autor.

Os métodos da mecânica molecular usam a mecânica estatística e a mecânica clássica (leis de Newton) como base de cálculo e são dois: Monte Carlo, que tem como base a mecânica estatística; e Dinâmica Molecular, que usa como princípio as leis de atração e repulsão de Newton. Os métodos da mecânica quântica podem ser divididos em semi-empíricos e *ab initio*. Os métodos semi-empíricos são oriundos do método de Hartree-Fock, e se valem de várias aproximações, além de utilizarem alguns parâmetros obtidos experimentalmente, tais como: geometrias de equilíbrio, calores de formação, momentos de dipolo e potenciais de ionização. Pelos métodos semi-empíricos, não são considerados os elétrons internos, somente os da camada de valência, assim como somente são considerados os orbitais “s” e “p” e simplificações matemáticas são feitas. Temos como exemplo: AM1; RM1; PM3; MNDO, dentre outros (HINCHLIFFE, 2008).

Dentre os modelos da Mecânica Quântica, também denominados de *ab initio*, cuja base é a resolução da equação de Schrödinger, temos: *Hartree-Fock* (HF); *Coupled Cluster* (CC); *Configuration Interaction* (CI); *Multiconfigurational SCF* (MCSCF); *Density Functional Theory* (DFT); *Møller-Plesset Perturbation Theory* (MP); *Multi-reference Configuration Interaction* (MRCI). A etimologia do termo *ab initio* informa que este termo significa “desde o princípio” e, portanto, podemos inferir que esses métodos

são baseados nos princípios da mecânica quântica. De uma maneira geral, os métodos *ab initio* podem ser definidos como métodos de cálculo que usam os princípios teóricos da Química Quântica e que não incluem os métodos empíricos ou semi-empíricos.

Os métodos *ab initio* são mais complexos, possuem mais acurácia, servem melhor para moléculas mais simples, por serem cálculos densos em termos de ferramental matemático e computacional. Embora mais adequados para moléculas mais simples, já existem formas atualmente de aplicar os métodos *ab initio* em estruturas bastante complexas. Os conjuntos de bases dos métodos *ab initio* foram inicialmente desenvolvidos pelo físico americano John Clarke Slater e foram chamados de funções de base de Slater. No entanto, esse conjunto de funções gerava um custo computacional muito grande para os cálculos. Posteriormente, as funções de base de Slater foram, em alguns casos, substituídas por funções gaussianas, mas o custo disso foi a redução da precisão na descrição dos orbitais atômicos e, conseqüentemente, o desvio da acurácia dos cálculos.

Quando visitamos a teoria da mecânica quântica, podemos afirmar que, sob o ponto de vista matemático, a configuração eletrônica de um átomo é descrita como uma função de onda. Estas funções de onda são um conjunto base de funções matemáticas que possibilitam a descrição dos orbitais atômicos. Quando dois átomos se ligam, ocorre a combinação linear dos orbitais atômicos para formar os orbitais moleculares. A tradução matemática disso é que os orbitais moleculares são representados pela combinação linear de funções base – Gaussianas ou de Slater (ARRUDA, 2009). O desenvolvimento e utilização de novas funções de base em *softwares* de modelagem molecular é que torna as versões pagas destes programas tão caras e melhores, sob o ponto de vista dos resultados, em relação às versões livres. Portanto, a primeira coisa que um usuário do programa precisa responder é: para aquilo que precisa ser feito, um método semi-empírico é suficiente ou é necessário utilizar um método *ab initio*? A resposta a essa pergunta nem sempre é direta e rápida.



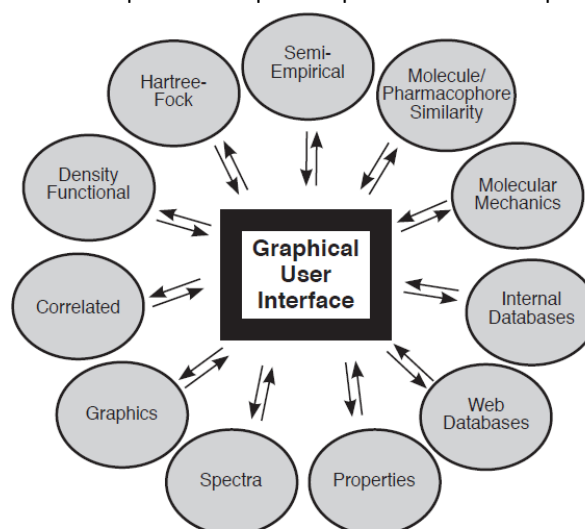
### 4.3 O FUNCIONAMENTO DOS SOFTWARES DE MODELAGEM MOLECULAR

Os principais e mais completos *softwares* de modelagem molecular são o *Spartan*, o *Hyperchem* e o *Gaussian*. Além destes, existem outros, mais específicos, como o MOPAC, o RasMol e o Arguslab<sup>7</sup>, dentre outros. Para fins de exemplificação dos princípios de funcionamento, vamos utilizar o *software* Spartan como padrão, pois foi este *software* o escolhido para o desenvolvimento dessa pesquisa, em função das suas potencialidades e por possuir, na nossa opinião, uma interface gráfica mais amigável e intuitiva que os demais.

Podemos simplificar informando que esta interface compreende uma janela intuitiva e interativa, que se comunica com uma vasta gama de técnicas computacionais, a fim de possibilitar ao usuário do programa a interpretação dos resultados. Esta interface possibilita acesso a uma série de métodos computacionais, incluindo os modelos da mecânica molecular, os semi-empíricos, assim como os modelos de orbitais moleculares Hartree-Fock, bem como vários modelos correlatos, tais como: modelos de densidade funcional e Møller-Plesset.

A figura 4 abaixo, retirada do manual do *Spartan* (WAVEFUNCTION, 2011) mostra as técnicas computacionais que se comunicam com a interface do programa.

**Figura 4:** Descrição dos módulos independentes que compõem o software Spartan



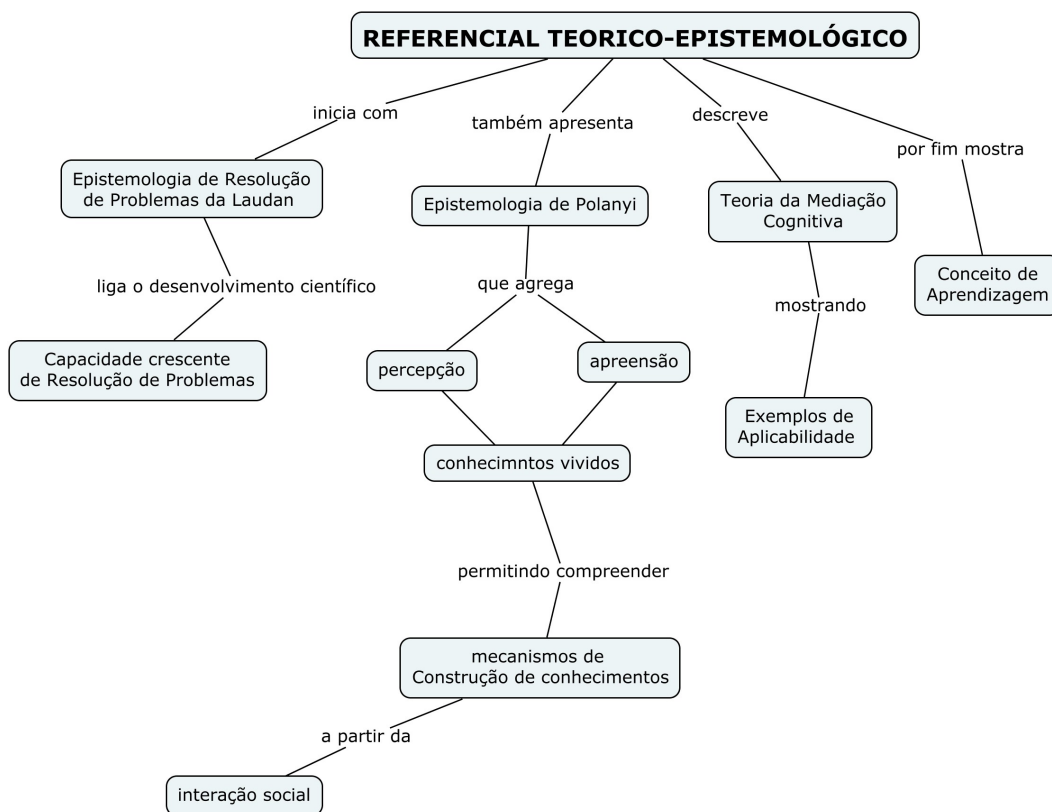
Fonte: <https://www.wavefun.com/support/AGuidetoMM.pdf>

<sup>7</sup> <http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html>

Quando abrimos o *software* e construímos uma molécula simples, como o n-butano, o que vemos na tela é a representação dessa molécula na forma que mais nos convier: *wire, ball and wire, tube, ball and spoke, space filling, line, hide*. Mas, estas diversas formas são apenas representações. Na verdade, quando construímos a molécula, o software monta uma estrutura de vetores num plano cartesiano, com módulo, direção e sentido. De fato, os programas de modelagem molecular com base na mecânica quântica têm, como base teórica, a teoria do orbital molecular (TOM), em que pese a interface gráfica dialogar com a teoria da ligação de valência (TLV), uma vez que a aba de construção de moléculas apresenta os diferentes átomos já com as opções de hibridização conhecidas. Talvez essa opção se dê para romper uma possível resistência epistemológica ao uso do software que está além da resistência técnica de uso da tecnologia, uma vez que a TLV é largamente utilizada tanto no ensino médio quanto no superior. Por sua vez, a TOM é utilizada em algumas disciplinas específicas de cursos de Química na graduação.

A apresentação do funcionamento do *software Spartan* versão 8, com o detalhamento de cada função existente no menu do programa é encontrada no apêndice B, pois acreditamos não se fazer necessário um detalhamento neste texto sobre essas funções.

## REFERENCIAL TEÓRICO-EPISTEMOLÓGICO



*Se os problemas constituem as perguntas da ciência, as teorias constituem as respostas. A função de uma teoria é resolver a ambigüidade, reduzir a irregularidade a uniformidade, mostrar que o que acontece de modo inteligível é previsível. É a esse complexo de funções a que me refiro quando falo de teorias como soluções de problemas.*

*(Larry Laudan)*

De forma a embasar o trabalho da tese, iniciamos pela escolha de um referencial epistemológico. Dentre os racionalistas e os que atribuem uma abordagem mais social à construção do pensamento científico, optamos por escolher Larry Laudan que liga o desenvolvimento científico à capacidade crescente de resolver problemas. A resolução de problemas é a base de nossas atividades educativas com modelagem molecular, que pode ser vista como uma ferramenta poderosa de resolver problemas em Química. Ademais, nossa tomada de dados é estruturada em torno da resolução de problemas e o nosso referencial teórico considera que toda tarefa cognitiva que o cérebro irá realizar é um problema que pode ser não resolvido (previamente), resolvido ou anômalo, conforme categorizado pela epistemologia de Laudan.

Além do referencial epistemológico de Laudan, o qual fundamenta nossa escolha de referencial teórico, achamos igualmente importante apresentar a epistemologia de Michael Polanyi (POLANYI, 1958) para alicerçar nossa escolha metodológica. Polanyi traz à tona o conceito de conhecimento tácito, implícito e inerente de cada sujeito. Sendo o conhecimento implícito um dos nossos focos de atenção, as construções de Polanyi são importantes no sentido de justificar a metodologia de análise gestual como principal ferramenta para desvendar este conhecimento implícito. Isto porque os gestos descritivos que fizemos quando estamos explicando os procedimentos que utilizamos para resolver um problema, via de regra, revelam os conhecimentos implícitos utilizados na resolução do problema.

### 5.1 A EPISTEMOLOGIA DE LAUDAN

Segundo Laudan (2011, p. 17), *“a ciência se caracteriza como uma atividade de resolução de problemas”*. A epistemologia de Laudan tentou produzir um resgate da racionalidade da ciência. Laudan defendeu que os problemas são as perguntas da ciência; as teorias, as respostas. O autor apresentou uma taxonomia dos problemas, classificando-os em empíricos e conceituais. Além disso, Laudan caracterizou os problemas empíricos como sendo de primeira ordem, originados do mundo natural e que, de alguma maneira, cause estranheza a quem os observa, necessitando de

explicação. Estes problemas caracterizam-se como “*questões substantivas acerca dos objetos que constituem o domínio de determinada ciência*” (ibidem, p. 23). Quanto aos problemas conceituais, Laudan os caracterizou como de segunda ordem. Sua essência não se dissocia das teorias que os geraram e, por consequência, são considerados pelo autor como problemas de ordem superior aos problemas empíricos, visto que foram gerados na tentativa de resolução destes.

Os problemas empíricos foram classificados pelo autor em função do papel que cumprem na avaliação das teorias: a) não resolvidos; b) resolvidos; e c) anômalos. Os problemas não resolvidos por nenhuma teoria estimulam o progresso da ciência, pois resolvê-los é uma das formas de tornar científicas as teorias. Os problemas resolvidos são considerados como resolvidos quando os pesquisadores deixam de considerá-los como uma pergunta não respondida dentro do contexto da pesquisa, pressupondo a existência de uma teoria que, aparentemente, resolve o problema.

Por fim, Laudan explicou que as anomalias são resolvidas por teorias alternativas, ao invés de conhecidas. A existência de anomalias em uma teoria, segundo as práticas científicas tradicionais, deve forçar o pesquisador a abandonar a teoria e considerar os dados empíricos que as geraram como dados inconsistentes em relação à teoria. No entanto, Laudan se opôs a essa prática, caracterizando-a como um obstáculo conceitual que dificulta a compreensão do papel das anomalias, pois: a) a ocorrência de uma anomalia, de fato, levanta dúvidas quanto a validade da teoria, mas não obriga o pesquisador a abandoná-la; e b) as anomalias não precisam ser incompatíveis com as teorias.

Quanto aos problemas conceituais, Laudan se distanciou da filosofia empirista quando afirmou que estes problemas são tão importantes no desenvolvimento da ciência quanto as soluções para os problemas empíricos, pois “*são característicos das teorias e não têm existência independente das teorias que os apresentam, nem sequer aquela autonomia limitada que os problemas empíricos às vezes possuem*” (LAUDAN, 2011, p. 68). O autor ressaltou o importante papel que os problemas conceituais desempenharam na história das ciências, afirmando: “*qualquer teoria acerca da natureza da ciência que não atribua papel aos problemas conceituais perde o direito de se dizer uma teoria sobre como a ciência realmente evoluiu*” (ibidem, p.93). Os

problemas conceituais são definidos conforme a dependência da forma com os quais são originados, como externos e internos. Os problemas conceituais externos existem quando a teoria que os gerou está em conflito com outra teoria. Por sua vez, os problemas conceituais internos ocorrem quando a teoria que os criou é incoerente e contraditória.

A partir desse debate posto, Laudan iniciou um esboço daquilo que denomina um modelo de progresso da ciência baseado na solução de problemas:

São simples as suposições centrais de um modelo: (1) o problema resolvido – empírico ou conceitual – é a unidade básica do progresso científico; e (2) o objetivo da ciência é ampliar ao máximo o alcance dos problemas empíricos resolvidos, ao mesmo tempo em que reduz ao mínimo o alcance dos problemas anômalos e conceituais. (...) A efetividade total quanto à solução de problemas é determinada por meio da avaliação do número e da importância dos problemas empíricos que ela resolve, deduzindo o número e a importância das anomalias e dos problemas conceituais que ela gera. (LAUDAN, 2011, p. 93-94).

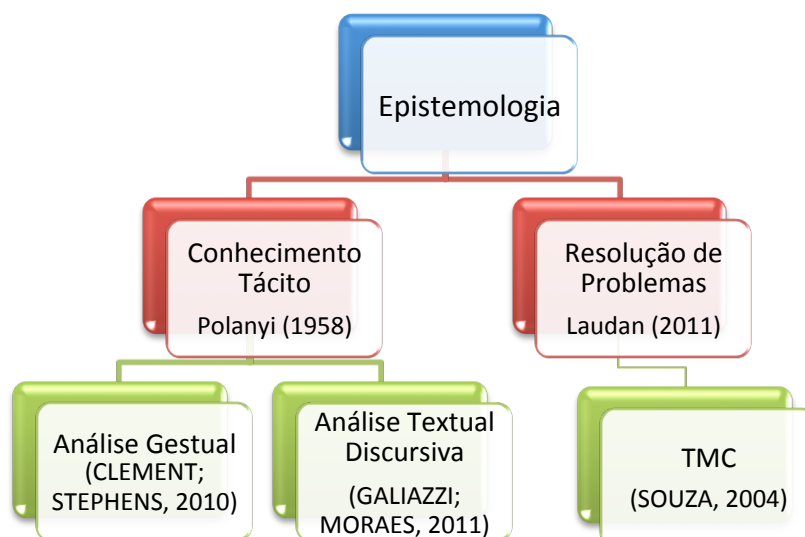
Podemos nos valer da epistemologia de Laudan para defender que o ensino de ciências também seja desenvolvido em sala de aula por meio de resolução de problemas, até por ser uma forma de refletir o progresso da ciência como uma atividade de sala de aula. Diferentemente do ensino de ciências por descoberta, concordamos com Santos e Goi (2012) e acreditamos ser um excelente caminho a adoção de atividades didáticas de resolução de problemas “*como forma de ensinar os conceitos situando-os em seus conceitos históricos e metodológicos de descoberta e, também, de justificação*” (SANTOS; GOI, 2012, p. 8).

Laudan (2011) também desenvolveu a ideia de que tudo que observamos do mundo natural tem um olhar muito específico, pois cada observador vai utilizar os conhecimentos e pressupostos previamente existentes antes da observação para tentar compreender o que está sendo observado. Portanto, nossos conhecimentos prévios são importantes no processo de resolução de problemas e grande parte deste conhecimento prévio utilizado é tácito (POLANYI, 1958). Para Polanyi, todo o novo conhecimento começa a ser desenvolvido por um conhecimento tácito que, muitas vezes, não conseguimos explicar, pois “*sabemos mais do que podemos expressar*” (POLANYI, 1958, p. 70). Polanyi afirmou que o conhecimento tácito é muito pessoal e exemplifica a dificuldade que temos de explicá-lo ao mostrar que uma pessoa pode desenvolver uma *expertise* sem, contudo, conseguir verbalizar como coloca em prática

sua habilidade. A principal contribuição de Polanyi diz respeito aos seus esforços na constituição de um modelo do conhecimento humano, o qual agrega a percepção e a apreensão de significados a partir da experiência vivida. Na visão do autor, o conhecimento tácito é intrínseco de cada sujeito, visto que é construção individual. Esse conhecimento tácito nos permite compreender, dentre outras coisas, os mecanismos da construção de conhecimentos a partir da interação social.

Dentro de nossa pesquisa, o conhecimento tácito é a base fundamental de análise junto com o conhecimento explícito presente no discurso produzido pelo estudante durante as entrevistas. Ao se deparar com uma atividade de resolução de problemas, o estudante irá evocar um conjunto de conhecimentos prévios e, conforme argumentamos, boa parte dele é tácito. Naturalmente é impossível a análise do conhecimento tácito se este não é transformado em explícito. Por conta disso, resolvemos focar especificamente no conhecimento tácito que se apresenta sob a forma de imagens mentais. Entendemos que é a partir das imagens mentais que os conhecimentos tácitos se tornam explícitos por elementos específicos, diretos e indiretos do discurso do estudante, e principalmente sob a forma de gestos descritivos. Assim, o estudante, ao ler o problema proposto para sua resolução, irá evocar imagens mentais e outros conhecimentos prévios a fim de tentar resolver estes problemas. Durante a entrevista, o estudante irá descrever como chegou à resposta do problema. Durante sua explanação, o estudante irá evocar as mesmas imagens mentais que produziu no ato de resolver os problemas. Essas imagens serão desvendadas por gestos descritivos e discurso. Os gestos descritivos, assim como outros indicadores de imagens mentais, foram codificados por nós e analisados para que possamos compreender o papel da modelagem molecular na resolução de problemas em Química. A figura 5 a seguir, mostra um esquema dos referenciais teórico-epistemológicos usados.

**Figura 5:** esquema do referencial teórico-epistemológico adotado



Em relação ao conhecimento científico, Polanyi defendeu que este também é fruto da tentativa de interiorização de problemas que são identificados. Essa interiorização faz parte do processo de solução dos problemas, visto que os cientistas utilizam o conhecimento tácito para formular problemas. Neste sentido, direcionamos as ações didáticas realizadas durante o desenvolvimento dessa pesquisa conforme estes pressupostos. Além de utilizar a didática de resolução de problemas, acreditamos que as ações didáticas devem também ser desenvolvidas levando-se em consideração a cultura e os conhecimentos prévios dos estudantes. Além deste referencial epistemológico, apresentaremos, a seguir, o referencial teórico que sustenta a pesquisa.

## 5.2 A TEORIA DA MEDIAÇÃO COGNITIVA EM REDE – TMC

Nas últimas décadas os pesquisadores da área de educação Química têm se debruçado em compreender as formas de aprendizagem a fim de possibilitar novas abordagens para o ensino de Química. Mortimer e Machado (1997) defenderam a seguinte perspectiva:

(...) a construção do conhecimento em sala de aula depende essencialmente de um processo no qual os significados e a linguagem do professor vão sendo



apropriados pelos alunos na construção de um conhecimento compartilhado. O ensino não pode ser visto simplesmente como um processo de reequilíbrio (Piaget, 1965), no qual a exposição dos sujeitos às situações de conflito levaria à superação das concepções prévias e a construção de conhecimentos científicos. A superação de obstáculos passa necessariamente por um processo de interações discursivas, no qual o professor tem um papel fundamental, como representante da cultura científica. Nesse sentido, aprender ciências é visto como um processo de “enculturação” (Driver, Asoko, Leach, Mortimer, Scott, 1994), ou seja, a entrada numa nova cultura diferente da cultura do senso comum. Nesse processo, as concepções prévias do estudante e sua cultura cotidiana não têm que, necessariamente, serem substituídas pelas concepções da cultura científica. A ampliação de seu universo cultural deve levá-lo a refletir sobre as interações entre as duas culturas, mas a construção de conhecimentos científicos não pressupõe a diminuição do status dos conceitos cotidianos, e sim a análise consistente das suas relações (MORTIMER; MACHADO, 1997, p. 140-141).

O conhecimento por parte do professor da chamada cultura do senso comum – a cultura dos estudantes – é importante para o estabelecimento das relações necessárias ao processo de ensino/aprendizagem. Dessa forma, ponderar sobre os elementos da bagagem cultural do estudante é considerado de grande importância para o ensino atual. Uma das bagagens culturais mais importantes e impactantes que os estudantes trazem à sala de aula atualmente é resultante da sua interação com a informática.

Vivemos numa era digital na qual o uso de computadores e dispositivos eletrônicos com acesso à internet é uma ação corriqueira. Pessoas de todas as idades passaram a estar conectadas diariamente com seus *smartphones*, *notebooks* ou *tablets*. A informação circula rapidamente e em abundância pela rede mundial de computadores – a *world wide web*. E essa informação está à disposição das pessoas num clique de *mouse* ou em um abrir de aplicativo. Segundo a Pesquisa Nacional por Amostra de Domicílios, do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística - IBGE (BRASIL, 2011), 65% dos estudantes com dez anos ou mais que estudam na rede pública e 95% que estudam na rede privada utilizam a internet de algum dispositivo móvel. As potencialidades comunicativas destes dispositivos são cada vez mais marcantes e os adolescentes de hoje vivem imersos num contexto de hipermídia bastante amplo, diferentemente dos adolescentes do século XX.

Esse grupo de indivíduos com alto nível de letramento digital pode ser caracterizado como nativos digitais (BENNETT, 2012), pois se desenvolveram cognitivamente a partir de uma estreita relação com a tecnologia, ao passo que os

indivíduos que se desenvolveram fora desse contexto, mas que acabaram sendo introduzidos posteriormente são chamados de imigrantes digitais. O autor citou Prensky (2001) para caracterizar estes grupos: *“todos os jovens que cresceram desde o advento generalizado do computador pessoal podem ser considerados nativos digitais, e, por eliminação, todas as pessoas mais velhas são imigrantes digitais”* (PRENSKY, 2001, apud BENNETT, 2012. p. 1).

Para Prensky (2001), os estudantes de hoje representam as primeiras gerações que cresceram usando videogames, computadores, câmeras de vídeo digitais, etc. O autor caracterizou:

Agora fica claro que como resultado deste ambiente onipresente e o grande volume de interação com a tecnologia, os alunos de hoje pensam e processam as informações bem diferentes das gerações anteriores. Estas diferenças vão mais longe e mais intensamente do que muitos educadores suspeitam ou percebem. (...) Nossos estudantes de hoje são todos “falantes nativos” da linguagem digital dos computadores, vídeo games e internet. (PRENSKY, 2001. p. 1). Tradução nossa.

Na verdade, Prensky foi um dos primeiros autores a sugerir o termo nativos digitais para o grupo de indivíduos que nasceu a partir da década de 1990 e que tinham esse alto letramento digital, o que lhes conferiu algumas particularidades cognitivas, tais como: capacidade de lidar com várias informações rapidamente e de processar vários assuntos de forma simultânea, além de desempenharem múltiplas tarefas. Posteriormente, Franco (2011) contribuiu com a caracterização do conceito de nativos digitais, esclarecendo que nem todos os nascidos entre 1990 e 2000 podem ser caracterizados como nativos digitais. Isso se deve ao fato de que esta caracterização é dependente do fácil acesso às tecnologias digitais e à rede de computadores. Nesse sentido, Franco defendeu que possamos falar de nativos digitais sem, contudo, associá-los a uma determinada faixa etária, mas sim caracterizando que os nativos digitais são aqueles que, desde os primeiros anos de vida, tiveram o letramento digital.

Esta forma diferenciada de processamento de informações, que é uma das características dos nativos digitais, foi caracterizada por SOUZA (2004) quando abordou as possíveis mudanças decorrentes da era digital. Obviamente, podemos imaginar que essa era digital influencia de forma importante a maneira como as

peessoas veem o mundo e se posicionam diante dos fatos. Para o autor, a quantidade de conhecimento que flui nas redes de computadores possibilita um crescimento cognitivo nas pessoas que costumam ficar conectadas com seus dispositivos móveis, pois estas acabam por criar novas formas de lidar tanto com os dispositivos quanto com as informações que circulam na rede. Isso significa, de um modo geral, que as formas de pensamento dos nativos digitais são diferentes, pois nossos processos de pensamento são moldados por mediação com o meio e essa mediação vai mudando a própria cultura destes grupos.

Diante deste contexto, o autor desenvolveu sua argumentação, discorrendo sobre a existência de uma hipercultura:

Logo, é possível se afirmar que, na atual Revolução Digital, testemunha-se a emergência de uma Hipercultura, onde os mecanismos externos de mediação passam a incluir os dispositivos computacionais e seus impactos culturais, enquanto que os mecanismos internos incluem as competências necessárias para o uso eficaz de tais mecanismos externos. Em termos de impactos observáveis, isso significa que todas as habilidades, competências, conceitos, modos de agir, funcionalidade e mudanças culturais ligadas ao uso de computadores e da *Internet* constituem um conjunto de fatores que difere substancialmente daquilo que tradicionalmente se percebe como cultura. (SOUZA, 2004, p.86)

O mesmo autor construiu um conjunto de conceitos, dentro do seu proposto referencial teórico, dos quais nos chama atenção os “*mecanismos externos de mediação*” e os “*mecanismos internos de mediação*” – trazendo uma perspectiva diferenciada no que tange considerar a chamada cognição extracerebral. Na verdade, o ponto inicial da construção desses conceitos é o fato de que o uso dos dispositivos eletrônicos se dá por um processo de mediação. Então é natural inferir que estes dispositivos se tornam mecanismos externos de mediação e que os mecanismos internos são construídos com o passar do tempo e com a necessidade de aquisição de novas competências para o uso destes dispositivos.

Esse processo de mediação com mecanismos externos sempre existiu, mesmo antes de pensarmos em usar computadores pessoais. Concordamos com Souza (2004) em relação à afirmação de que nosso cérebro é sabidamente limitado, incapaz de processar todas as informações que estão cotidianamente ao nosso alcance. Portanto, diariamente utilizamos o processamento externo para nos auxiliar, pois a

cognição humana também se dá pela interação com o ambiente, fornecendo à estrutura cognitiva uma capacidade adicional de processamento. Este mecanismo de processamento externo sempre existiu, desde tempos históricos.

Quando necessitamos lembrar algo, ou mesmo uma tarefa importante, lançamos mão de processamento externo. Por exemplo, no momento em que elegemos um local específico de nossa casa e lá dispomos objetos importantes que precisam ser levados ao trabalho no dia seguinte, estamos utilizando processamento externo para nos auxiliar a memória. Ou mesmo quando aprendemos a cozinhar alimentos, estamos nos utilizando de mecanismos externos de processamento para nos auxiliar no processo interno de digestão dos alimentos. Atualmente, com mecanismos externos capazes de processar informações e tomar decisões independentemente – como os computadores – houve uma mudança mais significativa nesse processo de mediação. A figura 6 mostra o quadro com a descrição feita por Souza (2004) das diversas formas possíveis de mediação, bem como os mecanismos envolvidos.

**Figura 6:** A evolução das formas de mediação cognitiva.

<b>Forma de Mediação</b>	<b>Mecanismos Externos</b>	<b>Mecanismos Internos</b>	<b>Processamento Extracerebral</b>
<b>Psicofísica</b>	Física do Objeto e do Ambiente	Sistemas Sensoriais	Percepção
<b>Social</b>	Interação em grupo	Habilidades sociais	Percepção e Memória
<b>Cultural</b>	Sistemas Simbólicos e Artefatos	Conhecimento Tradicional e/ou Formais	Percepção, Memória, Categorização e Aprendizagem
<b>Hipercultural</b>	Tecnologia da Informação	Conceitos e Habilidades do domínio da TI	Percepção, Memória, Categorização e Aprendizagem, Julgamento, Elaboração, Tomada de Decisões

Fonte: (SOUZA, 2004)

O autor explicou que a necessidade de superar as limitações cognitivas do *homo sapiens* foi definida pela seleção natural e que, portanto, a criação de

mecanismos de mediação faz parte de um processo de evolução, sendo que cada etapa inicial é incorporada às demais:

Assim sendo, espera-se que tal desenvolvimento ocorra através de uma sucessão de etapas, sendo impulsionado por um processo aleatório de tentativa e erro, estocasticamente caminhando em direção a estruturas de mediação cada vez mais poderosas e sofisticadas. Com base no que se conhece atualmente acerca dos impactos de fatores ambientais na cognição humana é possível inferir que os mecanismos de mediação cognitiva evoluíram de uma natureza psicofísica para uma dimensão social e, em seguida, para um paradigma cultural. Afinal, isso não apenas corresponde à ordem em que tais coisas emergiram na história da humanidade, mas também à ordenação da menor para a maior complexidade. (SOUZA, 2006, p. 154)

O autor explicou que o processo de desenvolvimento cognitivo impulsionado por mediação extracerebral faz com que nosso cérebro incorpore de forma crescente e cumulativa aspectos do processamento extracerebral, passando das formas mais simples de mediação às formas mais complexas. Assim, as diferentes maneiras de mediação explicitadas na figura 6 acima representam uma sequência cumulativa de mecanismos internos e externos. Com isso, há um crescimento em camadas, em que cada etapa incorpora as anteriores. Embora haja uma incorporação cumulativa de mecanismos internos e externos (psicofísico -> social -> cultural -> hipercultural), sendo estes bastante distinguíveis, o autor também elucidou que essa sucessão pode ocorrer com certos paralelismos e sobreposições, de maneira análoga às fases piagetianas.

Podemos, então, concordar com o autor quando este defende que o surgimento da hipercultura fez com que nosso cérebro começasse a pensar de forma hipercultural. A partir desse marco, criou-se um pensamento hipercultural, caracterizado por competências capazes de interagir com dispositivos do meio hipercultural, e que apresenta: *“lógica matemático-científica; representações visuais; formas elaboradas de classificação e ordenamento; estratégias eficazes para identificar o essencial e desprezar o resto; algoritmos eficientes para ‘varrer’ ou ‘folhear’ grandes conjuntos de informações e conhecimentos”* (SOUZA, 2004, p.87). Esse arcabouço de novas competências necessárias para dar conta desta nova cultura digital – a hipercultura – propicia que um processo de mediação ocorra e, com isso, novos conhecimentos são adquiridos.

Em outro estudo (SOUZA et al., 2010), o autor da TMC pesquisou o impacto cognitivo que o uso de um jogo do tipo RPG<sup>8</sup> causa em um conjunto de 1280 estudantes de ensino médio. Inicialmente, o objetivo da pesquisa era comprovar as previsões iniciais de que *“o engajamento em tais jogos é positivamente associado ao maior nível de capacidade psicométrica, especialmente lógica e habilidades numéricas e, portanto, também para o desempenho escolar”* (SOUZA, 2010, p. 1571). Ao final do trabalho, os resultados apontaram que estes estudantes conquistaram também, surpreendentemente, um escore *“muito melhor”* (sic) em sociabilidade, tornando-se mais sociáveis do que antes.

Isso ocorreu porque o jogo, por ser massivo e com vários jogadores jogando ao mesmo tempo (*multiplayer*), implicou no desenvolvimento de mecanismos internos de mediação que possuem forte componente social e os estudantes acabaram adquirindo esta competência para além dos momentos em que estavam jogando. Para o autor da TMC, esse mecanismo interno de mediação foi chamado de *“driver”*<sup>9</sup> em uma analogia à informática. Nesse sentido, o autor explicou que um mecanismo externo de processamento de informações interagiu com os estudantes, que criaram *“drivers”* específicos que permaneceram mesmo após a mediação com o mecanismo externo não existir mais. Estes estudantes adquiriram competências que foram desenvolvidas no processo de mediação e essas competências modificaram suas estruturas cognitivas, tornando-os mais sociáveis. Com base principalmente nestes pressupostos, o autor desenvolveu uma teoria cognitiva a qual chama de Teoria da Mediação Cognitiva em Rede.

Segundo Souza et al. (2012), a Teoria da Mediação Cognitiva em Rede procura explicar o processamento da informação pelo cérebro, propiciando uma abordagem ampla para a cognição humana. É uma teoria contextualista e construtivista. O autor apresentou o desafio de *“fornecer uma síntese teórica coerente de teorias psicológicas e estruturais que são geralmente vistas como separadas, ou mesmo em conflito umas com as outras, de modo a produzir um modelo unificado”* (ibidem, p.2).

---

<sup>8</sup> RPG vem do inglês e sua tradução é “jogo de interpretação de personagens”. No jogo, vários jogadores assumem determinados papéis de personagens e criam suas narrativas de forma colaborativa. Não há vencedores nem perdedores, pois estes jogos são mais colaborativos do que competitivos.

<sup>9</sup> O Termo “driver” é um dos termos chave da TMC e constitui-se em estrutura interna facilitadora da mediação Extracerebral. Será melhor caracterizado a seguir.

A TMC foi fundamentada e referenciada pelo autor em cinco premissas relativas à cognição humana e ao processamento de dados:

(...) 1) A espécie humana tem como maior vantagem evolutiva a capacidade de gerar, armazenar, recuperar, manipular e aplicar o conhecimento de várias maneiras; 2) Cognição humana é efetivamente o resultado de algum tipo de processamento de informação; 3) Sozinho, o cérebro humano constitui um finito e, em última instância, insatisfatório, recurso de processamento de informação; 4) Praticamente qualquer sistema físico organizado é capaz de executar operações lógicas em algum grau; 5) Seres humanos complementam o processamento da informação cerebral por interação com os sistemas físicos externos organizados. (SOUZA et al., 2012, p.2, tradução nossa).

O autor explicou que, com o surgimento da Revolução Digital, houve mudanças importantes nas sociedades e culturas de todo o mundo, influenciando o homem em níveis individuais e coletivos pelo impacto das tecnologias digitais sobre o pensamento. Na sequência, o autor indicou que a cognição humana é o resultado de processamento de informações e uma parte importante desse processamento é realizado fora do cérebro, pois este é limitado para processar todas as informações disponíveis.

Por consequência, utilizamos o processamento externo através da interação com estruturas do ambiente para aumentar a capacidade de processamento de informações. Especificamente quando utilizamos um computador para processar informações ou mesmo realizar um cálculo mais complexo, estamos utilizando-o como um mecanismo externo de mediação. Para tanto, precisamos construir alguns mecanismos internos que nos possibilite manusear este computador e compreender não somente o seu processamento, mas também as informações que ele está nos oferecendo.

A figura 7, a seguir, mostra o esquema de como ocorre o processamento cognitivo através de estruturas do ambiente, que fornecem uma capacidade adicional de processamento de informações.

Figura 7: Processamento cognitivo por mediação com estruturas do ambiente



Fonte: SOUZA, 2004.

Esse arcabouço de novas competências, necessárias para dar conta desta nova cultura digital – a hipercultura – propicia que um processo de mediação ocorra e novos conhecimentos sejam adquiridos.

### 5.2.1 Os “Drivers”

Nas ciências da computação, *drivers* são definidos como programas que agregam todas as informações necessárias para o bom funcionamento de um determinado dispositivo (OLIVEIRA et al., 2001). São os *drivers* que permitem a comunicação entre o sistema operacional do computador e os respectivos dispositivos, permitindo que os aplicativos instalados no computador possam interagir com este *hardware* com um bom nível de abstração sobre o seu funcionamento. De acordo com Souza et al. (2012), um mecanismo análogo ocorre nos seres humanos “*por meio de uma representação mental de um sistema físico que é composto por um conjunto de ‘teoremas-em-ação’, no sentido estabelecido pela Teoria dos Campos Conceituais de Vergnaud*”(SOUZA et al., 2012, p. 2322).

Fazendo um paralelo com a TMC, os *drivers* permitem a comunicação entre a estrutura cognitiva do sujeito e o mecanismo externo de processamento de informações. Esta comunicação é possível a partir da criação de representações mentais de maneira que ambos possam interagir e o sujeito possa entender o



funcionamento deste mecanismo externo a ponto de compreender e agregar à sua estrutura cognitiva as informações nele contidas. Estes mecanismos internos é que tornam possível a utilização dos mecanismos externos, e são chamados pelo autor da TMC de “*drivers*”, tecendo uma analogia à computação, própria a uma abordagem baseada na metáfora computador-cérebro da psicologia cognitiva (BRUNER, 1983).

São basicamente quatro os tipos de *drivers* que o autor da TMC apresentou: de natureza psicofísica, social, cultural e hipercultural. Os *drivers* de natureza psicofísica são os que comandam a mediação com o mundo físico a partir da percepção (sistema sensorial). Os *drivers* sociais são desenvolvidos a partir das habilidades sociais, na mediação direta com pessoas ou grupo de pessoas. Por sua vez, os *drivers* culturais são acionados quando estamos no processo de aquisição de uma determinada cultura, do conhecimento formal. Por fim, os *drivers* hiperculturais são desenvolvidos a partir da mediação com algum aparato hipercultural.

O autor da TMC desenvolveu a ideia básica de que os *drivers* são carregados de representações simbólicas, algoritmos e conceitos-chave, detentores de “*um conjunto de representações, procedimentos e conceitos que podem ser aplicados a um sistema físico, biológico ou social para que ele possa ser usado como uma verdadeira Máquina Universal de Turing*<sup>10</sup>” (SOUZA, 2004, p. 70).

De acordo com o autor, os *drivers* são dispositivos que trabalham como “máquinas virtuais” internas, que possuem um papel importante na definição do pensamento humano no contexto da mediação e vão para além da conexão com o mecanismo externo:

É razoável supor que os mecanismos internos de mediação funcionem através da produção de um *shell*, ou seja, de uma “máquina virtual” que “espelha” ou “representa” o mecanismo externo. Trata-se de um processo necessário para o estabelecimento de uma interface entre o cérebro e o mecanismo extra cerebral, mas também permite, até certo ponto, uma “emulação” ao menos parcial dos mecanismos externos em questão. Isso implica, portanto, numa internalização parcial dos mecanismos externos, o que ajuda a explicar por que as habilidades permanecem aumentadas mesmo quando os mecanismos externos estão ausentes. (SOUZA, 2004, p. 81-82).

---

<sup>10</sup> Máquina Universal de Turing é descrita como um mecanismo simples que formaliza a ideia de realização de cálculos, imitando o comportamento humano. Fonte: [http://www.fai-mg.br/portal/download/Revista%20Inicia\\_Artigo\\_04.pdf](http://www.fai-mg.br/portal/download/Revista%20Inicia_Artigo_04.pdf).

Para garantir o processo de mediação cognitiva com um mecanismo externo, nosso cérebro cria competências específicas para se comunicar com este mecanismo – que é um auxiliar no processamento de informação. A partir dessa mediação, o cérebro adquire um ganho de processamento de informações que se mantém mesmo que a conexão com o mecanismo externo seja interrompida. E esse ganho de processamento de informações é considerado pelo autor da teoria como aquisição de conhecimentos. Souza et al. (2012) resumiu este processo da seguinte forma:

A fim de integrar o processamento de informação feito pelo cérebro com um executado por mecanismos externos, é necessário que haja uma ligação lógica entre estes dispositivos. Por outras palavras, alguma forma de traduzir entradas, saídas e processamento entre eles. Isto é muito semelhante ao ter de instalar “controladores de dispositivos” de *software* num sistema de computador, de modo que este seja capaz de reconhecer e fazer funcionar um equipamento externo específico, tal como uma impressora, um *scanner* ou outro dispositivo de armazenamento. Nos seres humanos, isto pode ser conseguido por meio de uma representação mental de um sistema físico que é constituído de um conjunto de “teoremas-em-ação”, no sentido estabelecido pela teoria dos campos conceituais de Vergnaud (Vergnaud, 1997), que são análogos ao funcionamento dinâmico do referido mecanismo externo, por conseguinte, tornando possível a um indivíduo interagir com este mecanismo externo para fins de processamento de informação. Como tal, o desenvolvimento deste “mecanismo interno” ocorre por meio da interação entre o indivíduo e o sistema físico correspondente, isto é, através do processo descrito na Epistemologia Genética de Piaget como “equilibração”. (SOUZA et al., 2012, p. 2321-2322). Tradução nossa.

Segundo Neufeld et al. (2011) a principal função das representações mentais é a de substituir no nosso cérebro um objeto do mundo externo. Ou seja, “*a representação possibilita trabalhar com o objeto sem que o mesmo seja apresentado em termos físicos*” (NEUFELD, 2011, p. 104). São como cópias do mundo, que são criadas mentalmente por nós. Podemos, então, imaginar que são as representações mentais que dotam um indivíduo de capacidade de executar atividades mentais para fins de resolver algum problema.

De acordo com Vasconcelos e Oliveira (2012) “*as representações referem-se às estruturas do conhecimento nos processos de compreensão, memória, raciocínio e solução de problemas, incluindo as funções de percepção, reconhecimento de padrões, formação e interpretação de imagens*” (VASCONCELOS; OLIVEIRA, 2012, p. 7). Para os autores, tais representações estão divididas entre internas e externas. As internas são subdivididas em simbólicas e distribuídas, sendo que estas últimas ainda se

distinguem as análogas ou imagísticas (expressam imagens concretas, análogas ao que percebemos na realidade) e as proporcionais (expressam ideias ou conteúdos abstratos). As representações externas são subdivididas em pictóricas ou diagramáticas (representadas por diagramas) e linguísticas (dependem de palavras ou de notações linguísticas).

Desta classificação feita por Vasconcelos e Oliveira, destacamos as representações mentais análogas, que estão vinculadas às imagens concretas e são chamadas de análogas ou imagísticas por serem análogas aos objetos que percebemos no nosso cotidiano. São estas representações mentais imagísticas que temos especial interesse nessa pesquisa, pois essas representações traduzem o conhecimento tácito dos estudantes. Trazendo para o contexto da nossa pesquisa os preceitos da TMC, quando os estudantes estão em processo de mediação extracerebral com uma simulação computacional de modelagem molecular, representações mentais imagísticas análogas ao conteúdo da simulação são criadas na estrutura cognitiva dos estudantes. A criação dessas representações ocorre a partir do processo de aquisição de *drivers* específicos. Alguns deles são necessários para que o estudante possa interagir com o mecanismo externo, compreendendo seu funcionamento. Mas existem outros *drivers* que se formam nesse processo a partir do momento em que o estudante consegue compreender o funcionamento da simulação e passa a interagir com seu conteúdo científico para que novos conhecimentos sejam adquiridos.

Nas ciências da computação, o termo simulação diz respeito “*ao processo de projetar um modelo computacional de um sistema real e conduzir experimentos com este modelo com o propósito de entender o seu comportamento e, ou, avaliar estratégias para a sua operação*” (FREITAS FILHO, 2008, p. 43). Invariavelmente, quando tentamos compreender o funcionamento de um determinado objeto ou sistema, precisamos criar no nosso cérebro uma representação análoga ao objeto de estudo e pensar em um modelo que explique o seu funcionamento, com regras específicas. O próximo passo é imaginar esse modelo em funcionamento para, por fim, comparar os resultados imaginados com a realidade (MOREIRA, 1996). Portanto, podemos afirmar que estamos realizando uma simulação mental quando temos a capacidade de imaginar um modelo em funcionamento.

O termo simulação mental é pouco explorado da literatura da área de educação Química. No entanto, precisamos caracterizar esse conceito em função da natureza da nossa pesquisa. Como já descrito anteriormente, quando um estudante realiza uma simulação computacional de modelagem molecular, ele cria novos *drivers* para não somente compreender o funcionamento do *software*, mas também para interagir com o conteúdo químico da simulação. A partir do momento em que o estudante começa a interagir com esse conteúdo químico, ele constrói uma representação mental análoga ao conteúdo da simulação. Com isso, o estudante avança para a construção de um modelo mental que explique o funcionamento da simulação. Nesse sentido, o estudante passa a imaginar um modelo em funcionamento. Então, podemos dizer que o estudante está realizando uma simulação mental.

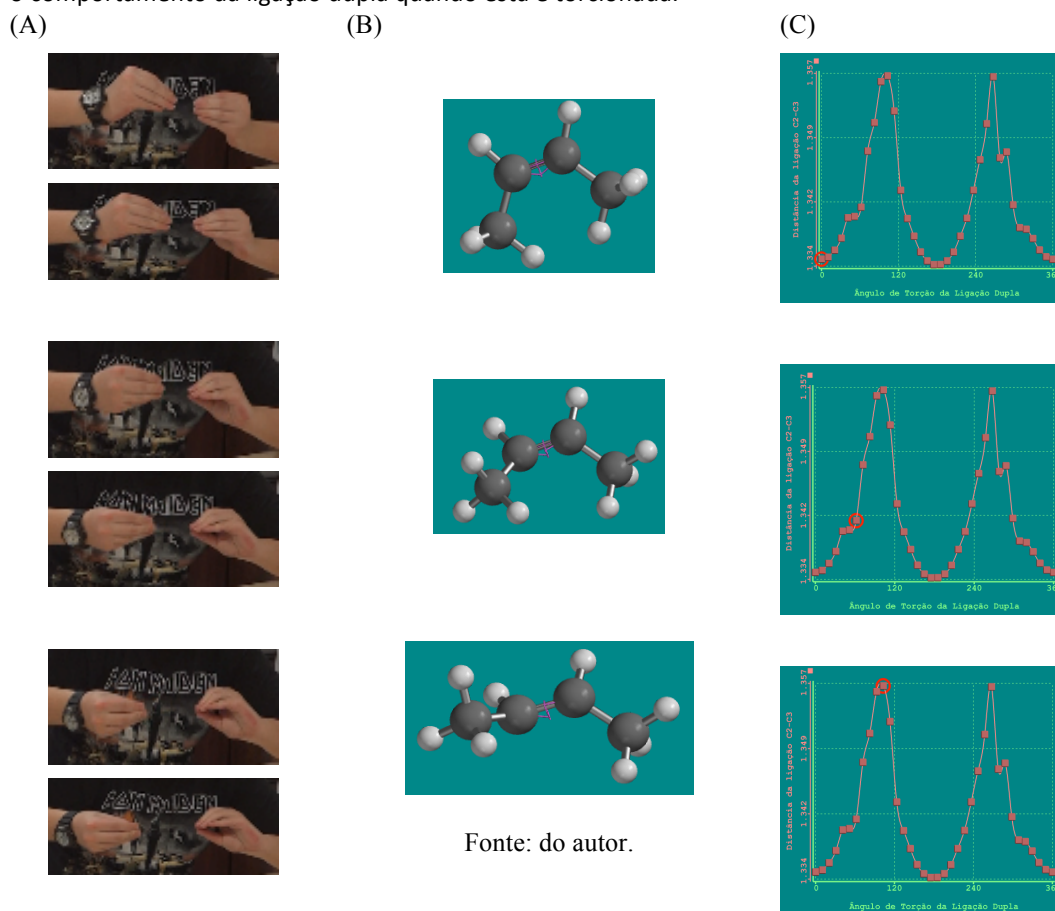
Para criarmos mentalmente este modelo, precisamos de certas representações e *drivers*. Especificamente na modelagem molecular, acreditamos que haja uma simulação mental quando o estudante modela mentalmente o comportamento de um determinado sistema químico, seja ele um átomo ou uma molécula. Para modelar mentalmente, este estudante precisa de representações e *drivers* específicos da modelagem molecular e estas representações e *drivers* podem ser totalmente de natureza hipercultural, a partir da mediação com a simulação computacional de modelagem, ou podem ser construídos a partir da interação com *drivers* previamente existentes.

Para exemplificarmos o que queremos dizer com simulação mental, trazemos recente artigo publicado nos anais do IX Encontro de Pesquisa em Ensino de Ciências (RAMOS; SERRANO, 2013b) em que mostramos que *“os estudantes que já possuíam alguma habilidade visuoespacial, ao interagir com a simulação de modelagem molecular, desenvolveram novos drivers, conferindo-lhe a possibilidade de avançar em termos de pensamento lógico e começar a modelar”*. Para modelar, o estudante precisa “rodar” uma simulação mental, análoga à simulação computacional. O experimento que realizamos foi uma simulação de modelagem molecular em que estudantes de um curso técnico em química manusearam um *software* de modelagem molecular para resolver algumas situações-problema envolvendo conteúdos de estereoisomeria *cis/trans*.

A figura 8, a seguir, mostra um conjunto de gestos descritivos realizado por um estudante após o uso da simulação. Podemos perceber nos gestos realizados que o estudante utilizou *drivers* de natureza hipercultural num processo de simulação mental, para explicar o comportamento da ligação dupla de um alceno quando esta é torcida. A principal conclusão que os autores chegam ao analisar os resultados do experimento foi que:

(...) a mediação com o computador – atuando como um mecanismo de processamento externo – permitiu que o estudante pudesse não somente melhorar alguns “*drivers*” existentes na sua estrutura cognitiva (de visualização, por exemplo), mas também criar novos “*drivers*” (de rotação 3D intramolecular, por exemplo) que são utilizados mesmo quando a conexão com o mecanismo de processamento externo foi desfeita. (RAMOS, SERRANO, 2013b, p. 7).

**Figura 8:** Gestos descritivos realizados por um estudante, num processo de simulação mental para explicar o comportamento da ligação dupla quando esta é torcida.



A simulação de modelagem molecular realizada pelo estudante constituiu em forçar a torção da ligação dupla do *cis*-2-buteno (mostrada na coluna B da figura) e

analisar as consequências dessa torção em relação à energia e ao comprimento da ligação torcionada (traduzido no gráfico que relaciona a distância da ligação C2-C3 do *cis*-2-buteno com o ângulo de torção da ligação dupla). O estudante explicou em gestos descritivos o que compreendeu sobre esse comportamento. Ao mesmo tempo em que efetuou um giro entre ambas as mãos (apresentado na coluna A e representando o giro da molécula realizado na simulação computacional), o estudante também realizou um movimento de afastamento das mãos, o qual demonstrou a sua compreensão desenvolvida acerca do rompimento progressivo da ligação dupla com a torção, uma vez que é de conhecimento que as ligações duplas são menores que as ligações simples.

### 5.2.1 TMC – uma Síntese Teórica

Como dito anteriormente, o autor da TMC procurou sintetizar algumas teorias psicológicas e estruturais de forma coerente, assimilando aspectos essenciais de cada uma dessas teorias a fim de construir um modelo unificado que fosse capaz de compreender a cognição humana. Para tanto, buscou alguns elementos das consagradas teorias de Lev S. Vygotsky, Gerard Vergnaud, Jean Piaget e Robert J. Sternberg.

A TMC faz uso da teoria sócio-construtivista de Vygotsky especificamente em relação aos conceitos de internalização de sistemas de signos e de zona de desenvolvimento proximal. Segundo o autor da TMC, um dos pilares da teoria sócio-construtivista de Vygotsky é o de que o desenvolvimento humano ocorre por meio de interação social e nessa interação social ocorre a transmissão cultural e o desenvolvimento cognitivo.

Para Souza (2004), esta “enculturação” vygostskiana se dá pela interação e, com ela, pela aquisição de sistemas de signos que se caracterizam por um conjunto de representações de inúmeros objetos e operações de pensamento. Souza também constrói a ideia de que há um conjunto de informações que estão fora do alcance dos sujeitos, mas potencialmente atingíveis. Portanto, o processo de mediação com algum

mecanismo externo do ambiente pode contribuir nesse processo. A partir dessa mediação, ocorre um ganho de processamento de informações pelo cérebro humano e a aquisição de novos sistemas de signos. Esse ganho, segundo o autor, pode possibilitar mais efetivamente o atingimento do nível de desenvolvimento potencial a partir do processo de mediação. Souza aponta que a ZDP se caracteriza como *“uma visão dinâmica da internalização, delimitando o internalizado, o que irá ser internalizado e o que está sendo internalizando. Também é um construto que define as condições necessárias a todo o processo”* (SOUZA, 2004, p. 122).

Da mesma forma, o autor da TMC foi buscar na teoria dos campos conceituais de Vergnaud alguns elementos importantes, dentre eles o conceito de teorema-em-ação. De acordo com Souza (2004), quando estabelecemos uma conexão com algum mecanismo externo, precisamos criar certos *drivers* que nos auxiliam a compreender o funcionamento deste mecanismo e a interagir com este mecanismo para fins de processamento de informações. Para Souza, estes *drivers* são representações mentais análogas aos teoremas-em-ação de Vergnaud e são desenvolvidos para permitir o processo de mediação e de aquisição de processamento de informações.

Em resumo, o autor argumentou:

(...) o processo de mediação produz a vantagem óbvia de permitir que um indivíduo possa aumentar significativamente a sua capacidade computacional (e, portanto, os poderes cognitivos) por um processamento distribuído entre o cérebro e uma sofisticada rede de aparelhos externos. No entanto, a possibilidade de utilizar vários tipos de complexas e sofisticadas “próteses cognitivas” não é a única incidência. Com efeito, pode-se também concluir que, dada a natureza das representações mentais (teoremas-em-ação), a sua mera existência dota o indivíduo com um conjunto de ferramentas lógicas que aumenta a sua competência em domínios específicos, mesmo na ausência do sistema externo físico correspondente. Assim, os padrões individuais de pensamento, isto é, as suas abordagens lógicas, estratégias, competência e raciocínio, são, numa extensão significativa, definidas pelos mecanismos de mediação formados por meio de uma história pessoal de interação com os diferentes tipos de grupos sociais, ferramentas, instrumentos e outros elementos culturais, muito como previsto nas teorias sócioconstrutivistas. (SOUZA et al., 2012, p. 3, tradução nossa).

Desta forma, Souza fez a conjugação das teorias, abordando a interação social vygotskiana e teoremas-em-ação de Vergnaud, propondo a existência de um ganho cognitivo substancial a partir da mediação com o computador. O autor da TMC ainda se fez valer do conceito piagetiano de equilíbrio para explicar de que forma os

*drivers* são construídos no cérebro a partir da interação entre o indivíduo e o mecanismo externo de processamento de informações. De fato, há uma convergência em relação à forma proposta de aquisição de *drivers* com o processo de equilíbrio piagetiano, visto que tanto um quanto outro descreve o desenvolvimento cognitivo em função de processos dinâmico básicos.

Segundo Souza (2004), Robert Sternberg desenvolveu a Teoria Triárquica a partir do paradigma do processamento da informação, considerando que a estrutura cognitiva humana possui uma arquitetura específica, com três facetas: 1) a faceta analítica, responsável pela nossa capacidade analítica; 2) a faceta criativa, responsável pelo pensamento criativo e pela adaptação inovadora e eficaz às novas situações; 3) a faceta prática, responsável pela nossa habilidade de aprender, compreender e responder às tarefas cotidianas. Souza afirmou que para Sternberg a inteligência se resume na capacidade que um indivíduo tem de conquistar sucesso e realização na vida real. Por outro lado, o fracasso representa a ausência de um dos atributos acima dispostos, além de *“procrastinação, incapacidade de retardar a gratificação e excesso ou falta de autoconfiança”* (SOUZA, 2004, p. 127).

Souza (2004) fez a devida relação entre a teoria de Sternberg na medida em que apontou que os mecanismos internos de processamento de informações apresentam perfeita equivalência com a faceta analítica da teoria Triárquica. Isso porque, uma vez que *“os Componentes de Aquisição de Conhecimento permitem a assimilação de algoritmos, os Componentes de Desempenho permitem a sua implementação e os Metacomponentes podem controlar o funcionamento do sistema”* (ibidem, p. 128). O autor ainda fez um paralelo da TMC com as facetas criativa e prática, explicando:

As Facetas Criativa e Prática da Teoria Triárquica envolvem a interação entre o indivíduo e o mundo exterior, realizando funções que possibilitam a capacidade de adaptação (resiliência) por assimilação e/ou criação de sequências inéditas de operações lógicas (novos algoritmos). À luz da TMC, essas subteorias de Sternberg explicam o surgimento e funcionamento dos mecanismos internos de mediação, exceto apenas pela diferença de que, no caso da primeira, considerasse que a função primordial dessas estruturas cognitivas seria a de possibilitar o uso de sistemas externos (físicos, sociais, culturais e/ou hiperculturais) como dispositivos computacionais (mecanismos externos), com as demais funções sendo consequências secundárias. (SOUZA, 2004, p. 128).



No entanto, Souza apontou as diferenças entre ambas as teorias. Enquanto a teoria Triárquica estabelece um modelo para a cognição humana baseado numa metáfora com o computador, a TMC propõe a criação de um modelo de cognição baseado numa rede de computadores:

Assim sendo, a teoria de Sternberg tenta explicar a cognição humana exclusivamente em termos de estruturas individuais internas em interações complexas e adaptativas com um ambiente mutável, enquanto que a TMC procura fazer o mesmo expandindo a metáfora computacional para um grande conjunto de sistemas individuais interagindo por meio de redes complexas em arquiteturas distribuídas. (SOUZA, 2004, p. 129).

Após a apresentação do referencial teórico, achamos pertinente mostrar alguns exemplos na literatura, de aplicabilidade da teoria.

### 5.2.2 Alguns exemplos de aplicabilidade da TMC

A TMC tem sido usada como referencial teórico de trabalhos de pesquisa na área do Ensino de Ciências. Destacamos o estudo de caso envolvendo isomeria geométrica (RAUPP et al., 2010). Neste trabalho, estudantes de ensino médio utilizam *softwares* de construção de modelos moleculares e o objetivo do estudo é “*investigar como ocorre a evolução da capacidade representacional dos estudantes de química de nível médio após o uso de um software de construção de modelos moleculares*” (ibid, p. 20). A metodologia do trabalho envolveu três etapas: uma revisão dos conteúdos sobre isomeria geométrica; um pré-teste envolvendo resolução de problemas de representação dos isômeros trabalhados; o uso do software ChemSketch 10.0 (ACD LABS, 2013) e um pós-teste similar ao pré-teste, após o uso do software.

O aporte teórico da TMC permitiu aos autores a análise do conteúdo dos dados coletados no experimento no sentido de detectar uma possível evolução na habilidade de representação das moléculas, causada pela utilização do *software*:

Esta evolução, quando detectada, é, de acordo com a TMC, causada pela equilibrção de elementos inerentes à lógica externa de representações assimiladas durante a interação com o *software* 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). (RAUPP et. al. 2010. p. 23)

Após a análise dos dados, os autores concluem:

Ao interagirem com os conteúdos científicos em sala de aula, os estudantes constroem representações mentais que representam uma internalização dos invariantes operatórios com os quais interagem. Mais ainda, tais representações vêm acompanhadas de verdadeiros teoremas-em-ação que refletem os padrões e a dinâmica dos objetos com os quais se interage. (...) O uso deste software aparentemente auxilia na internalização destas representações, após o estudante fazer uso delas externamente, pela internalização das representações e dos invariantes operatórios associados com a construção de modelos 3D e a rotação destes modelos. Eventualmente, isso leva a uma acomodação, onde os invariantes e representações pré-existentes na estrutura cognitiva do estudante são transformados em função da nova lógica que o software apresenta. (ibid, p. 31).

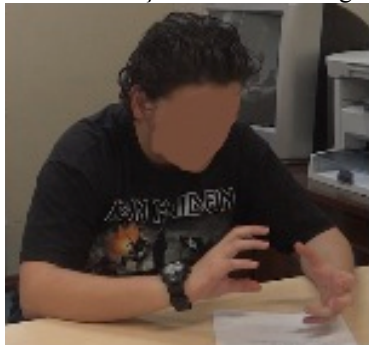
Além deste exemplo, também destacamos mais dois trabalhos. No primeiro, Ramos e Serrano (2014) desenvolveram um estudo exploratório cujo objetivo foi o de utilizar o aporte teórico da TMC para buscar identificar quais os *drivers* específicos são originados do processo de visualização molecular e quais são específicos do processo de modelagem molecular. A hipótese levantada pelos autores do trabalho partiu da ideia de que *“quanto mais implícito ou internalizado é o conhecimento sobre representações moleculares bidimensionais e tridimensionais, melhor é a capacidade de pensar em termos de modelagem molecular”*. Os registros utilizados para análise foram os vídeos das entrevistas realizadas antes e depois da simulação, assim como pré-testes e pós-testes. A metodologia utilizada para a identificação dos *drivers* foi a análise dos gestos descritivos<sup>11</sup>. O estudo exploratório permitiu a identificação de *drivers* que são específicos de visualização molecular, assim como de *drivers* que são específicos de modelagem molecular, conforme mostra a figura 9 a seguir.

---

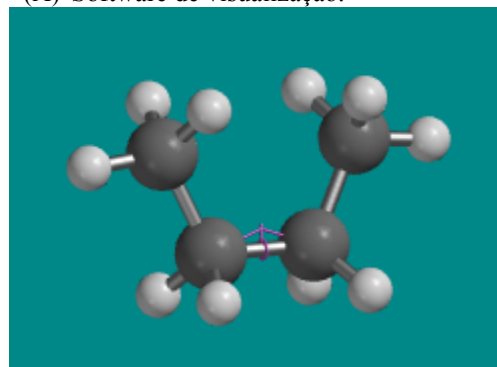
<sup>11</sup> Este experimento é parte integrante da pesquisa que estamos realizando e a metodologia utilizada será melhor explicada no capítulo 3 desta tese.

**Figura 9:** Gestos mais significativos da análise gestual.

(A) Gesto de rotação da molécula rígida.



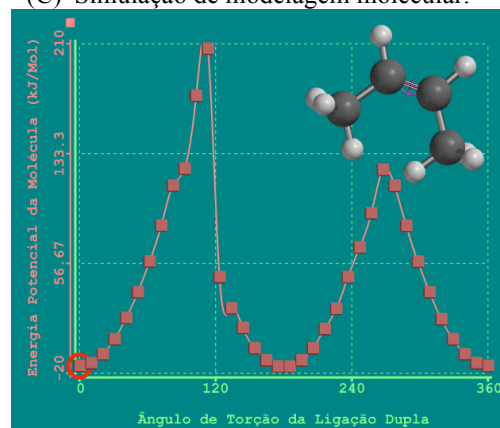
(A) Software de visualização.



(B) Gesto da torção da molécula.



(C) Simulação de modelagem molecular.



Em 9(A), o estudante faz um gesto típico de quem somente visualiza uma molécula como algo rígido (ao lado, a tela de um software de visualização). Esse gesto é um gesto típico de visualização de moléculas. Em 9(B), o mesmo estudante faz um gesto relacionado à torção da molécula, imaginando-a como algo não rígido (ao lado, a tela da modelagem molecular computacional).

Nas considerações, os autores explicaram que o manuseio de uma simulação de modelagem molecular computacional fez com que os estudantes tivessem que desenvolver *drivers* específicos para interagir com o conteúdo da simulação a ponto de compreender as informações que estão sendo mostradas. Nesse processo, as habilidades visuoespaciais dos estudantes foram desenvolvidas. Além do mais, os autores identificaram a presença de *drivers* de modelagem molecular, que são diferentes dos *drivers* de visualização, e que melhoraram a aptidão dos estudantes para modelar, desencadeando outros processos:

Essa aptidão para a modelagem molecular também é condicionada à existência de uma visão dinâmica das transformações. Quando o estudante consegue simular mentalmente uma rotação 3D de parte da molécula ele

está utilizando a capacidade de rotacionar mentalmente partes da molécula, que foi adquirida sob a forma de representação e *driver*, com o uso do software. Esta capacidade de visualizar de forma dinâmica o comportamento das moléculas é importante para a modelagem molecular e para a parte preditiva do comportamento de sistemas, pois os estudantes precisam dominar os níveis microscópicos e simbólicos para conseguir explicar os fenômenos macroscópicos. Da mesma forma, precisam avançar do pensamento sensorial gerado por *drivers* psicofísicos para um pensamento de mais alta ordem, propiciado por *drivers* hiperculturais. (RAMOS, SERRANO, 2014, p. 8).

O segundo trabalho (ROCHA; SERRANO, 2013) versou sobre o uso de *software* de simulação no ensino de física e como este uso pode se tornar uma ferramenta de processamento extra cerebral. Além disso, o estudo objetivou identificar as possíveis modificações que este uso causa na estrutura cognitiva dos estudantes de graduação. Para tanto, foi criada uma amostra experimental e outra controle e as etapas foram: pré-teste escrito com situações-problema; entrevista de pré-teste, simulação com um sistema carga-campo elétrico; pós-teste com situações-problema; entrevista de pós-teste. Os registros foram analisados por análise gestual de vídeos e análise de conteúdo dos testes escritos.

Em suas considerações, os autores reconheceram a aquisição de novos *drivers* por mediação com mecanismo externo de processamento de informações, sendo consolidados sob a forma de *scripts*, liberando memória de trabalho e ampliando a capacidade cognitiva. Essa melhora na capacidade cognitiva permite um domínio progressivo das situações-problema, e tem como consequência um crescimento da capacidade de conceitualização.

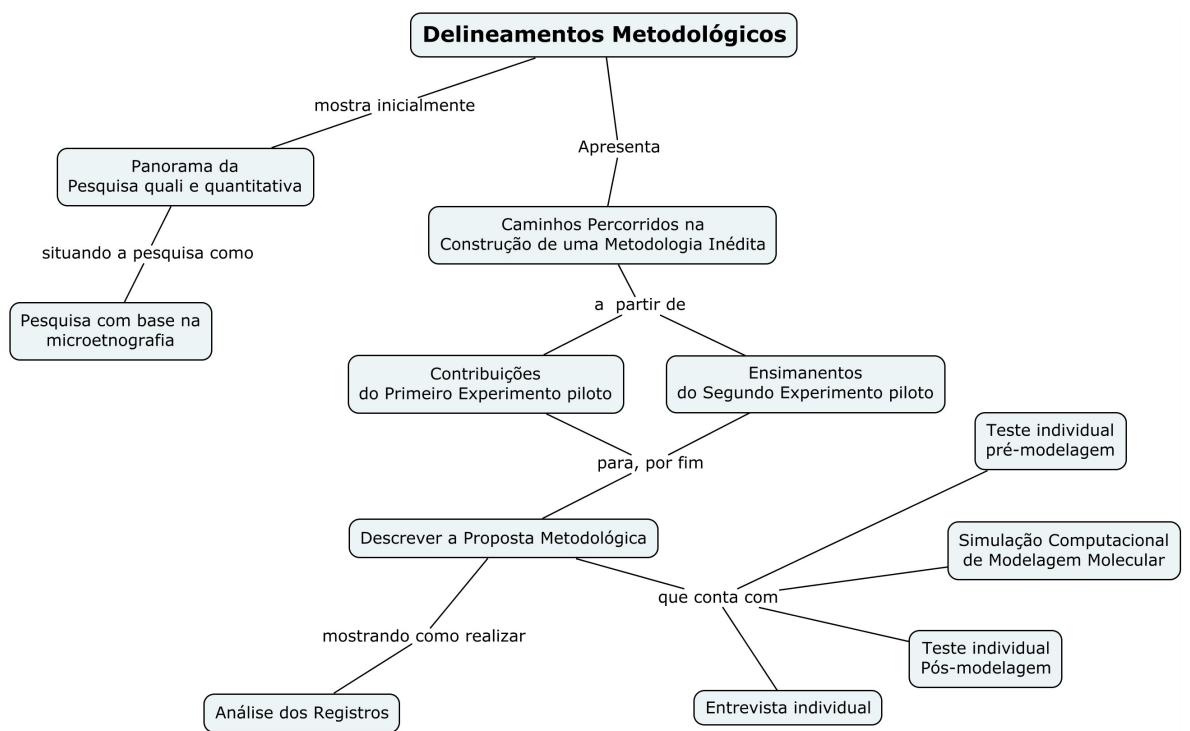
### 5.3 O CONCEITO DE APRENDIZAGEM À LUZ DO MARCO TEÓRICO-EPISTEMOLÓGICO

Por fim, e não menos importante, gostaríamos de apresentar o que compreendemos ser o conceito de aprendizagem à luz do marco teórico-epistemológico adotado e dos resultados dessa pesquisa de doutorado. Após longa imersão nas construções teóricas da epistemologia de resolução de problemas e Laudan e da TMC de Souza, podemos definir que **aprendizagem caracteriza-se como o ganho de competência, por meio da aquisição de novas representações**

**e drivers, em prol de uma capacidade maior de resolução de problemas.** Tanto problemas considerados já resolvidos quanto não resolvidos; tanto problemas simples quanto problemas mais complexos.

Quando um estudante consegue resolver um problema científico considerado anômalo, que não era possível de ser resolvido com o corpo teórico que possuía, ele passa a ser considerado resolvido a partir do ganho de competência adquirido pelas ferramentas de modelagem molecular. Mesmo problemas considerados como resolvidos podem, em certos casos, ser melhor resolvidos a partir de um ganho de processamento de informações propiciado pela modelagem molecular. Nesse caso, o estudante tende a adotar esse novo marco teórico por compreender que ele é mais efetivo na resolução de problemas. Esse fato, para Laudan, é um dos marcos do progresso científico e, para nós, um dos marcos do aprendizado em ciências. Esses conceitos serão melhor trabalhados nas considerações finais.

## DELINEAMENTOS METODOLÓGICOS



*A mente que se abre a uma nova idéia  
jamaís voltará ao seu tamanho  
original.  
(Albert Einstein)*

Segundo Creswell (2010), tanto a abordagem quantitativa quanto a qualitativa tem uma evolução histórica. Os métodos quantitativos de pesquisa dominavam o cenário das pesquisas sociais desde o final do século XIX até meados do século XX. O autor revelou que somente a partir da metade do século XX os métodos qualitativos tiveram um aumento de interesse e utilização por parte dos pesquisadores.

Um artigo publicado por Gatti (2004) trouxe à tona o debate sobre a utilização de dados quantitativos em pesquisa educacional, mostrando que o uso dessa metodologia nunca teve tradição sólida nesta área do conhecimento. A autora citou alguns estudos que mostravam que a pesquisa educacional era muito pouco desenvolvida no início dos anos de 1970 e que, do pouco que se produzia, mais de 70% não tinha como foco metodológico a análise quantitativa, mas sim a *“análise descritiva de tabelas de frequências, algumas poucas correlações e raríssimos estudos empregavam análise multidimensional”*. A autora citou Di Dio para caracterizar o cenário da época:

Di Dio (1974, p. 520) assim se expressa: 1. A esmagadora maioria das investigações são históricas ou estudos descritivos, levantamentos e outros enfoques não-experimentais. 2. O instrumento de medida preferido é o questionário. 3. Quando são empregadas técnicas estatísticas, trata-se usualmente de percentagens e coeficientes de correlação. (Di Dio, apud GATTI, 2004, p. 13-14).

Creswell (2010) informou que a pesquisa quantitativa é muito utilizada quando o objetivo é testar alguma teoria de forma objetiva, examinando relações entre variáveis, sendo que estas variáveis podem ser medidas por instrumentos, gerando dados numéricos que são analisados por métodos estatísticos. Por sua vez, o mesmo autor explicou que a pesquisa qualitativa se encaixa muito bem quando o objetivo é o que explorar e compreender o significado que os sujeitos da pesquisa atribuem a um determinado problema a ser estudado. Além das abordagens qualitativas e quantitativas, pesquisas que se desenvolvem a partir de métodos mistos também tiveram um aumento a partir da segunda metade do século XX. A abordagem de método misto combina as duas anteriores, envolvendo o uso conjunto das metodologias quantitativa e qualitativa, e não somente a mistura destas. Segundo Creswell (2010, p. 27), os métodos mistos são empregados quando *“a força geral de um estudo seja maior do que a da pesquisa qualitativa ou quantitativa isolada”*.

Das estratégias de pesquisas quantitativas existentes, destacam-se a pesquisa experimental e a de levantamento. A primeira tem seu foco em determinar se um tratamento específico pode ou não influenciar num resultado. A segunda proporciona um panorama numérico de tendências, atitudes ou opiniões de uma população a partir de um estudo amostral, podendo incluir estudos transversais ou longitudinais e utilizando questionários ou entrevistas estruturadas para a coleta dos dados.

Das abordagens qualitativas, destacamos: A) a etnografia, cujo foco de estudo é um grupo cultural intacto em seu cenário natural e por um período de tempo prolongado; B) a micro-etnografia, que propõe-se a realizar uma microanálise, documentando com mais precisão e aprofundamento a dinâmica da interação face a face entre o(s) sujeito(os) da pesquisa e o pesquisador, utilizando gravações de vídeo; C) o estudo de caso, em que a exploração de um evento, atividade ou indivíduo(s) é profunda, sendo que os dados são coletados por um período prolongado; D) a fenomenologia, como uma estratégia que visa identificar a essência das experiências humanas, relatadas pelos próprios sujeitos, com respeito a um determinado fenômeno, sendo que o número de sujeitos é pequeno e os dados são coletados com profundidade; e E) a história de vida, que caracteriza-se pelo estudo das vidas dos sujeitos, sob o seu ponto de vista, em que o papel do pesquisador é o de recontar essa narrativa colaborativa cronológica.

Nas últimas décadas, muitos pesquisadores têm voltado sua atenção às salas de aulas e aos sistemas educacionais, se deparando com um cenário complexo, em cujas técnicas mais tradicionais de pesquisa encontram dificuldades em descrevê-los (KELLY; LESH, 2000). Os autores defendem:

Estamos agora em um momento no qual a crescente maturidade da pesquisa em ensino de ciências e matemática deslocou sua atenção em relação ao rigor dos métodos experimentais tradicionais como o melhor caminho para a compreensão científica para um interesse renovado no desenvolvimento de métodos alternativos para a pesquisa. (...) O que caracteriza o sentimento deste livro é o reconhecimento de que a legitimidade das questões de pesquisas em educação não deve ser pré-determinada ou limitada às potencialidades e capacidades de uma metodologia de pesquisa em particular. Em vez disso, as necessidades de aprendizagem e ensino, a descrição analítica, e as necessidades de comunicação da comunidade de pesquisadores devem ajudar a produzir e testar uma diversidade de métodos de pesquisa. (KELLY; LESH, 2000, p. 35-36, tradução nossa)



Como dito anteriormente, o foco principal da pesquisa é compreender de que forma é alterada a estrutura cognitiva dos estudantes após a utilização de *software* de modelagem molecular. A perspectiva teórica que fundamenta nossa pesquisa mostra que a utilização de mecanismos externos no processo de mediação cognitiva tem como consequência propiciar um aumento da capacidade de processamento de informações do cérebro e, portanto, cria melhores condições para a cognição a partir da modificação e/ou criação de *drivers* na estrutura cognitiva dos estudantes. Portanto, uma das formas de compreender quais as contribuições das ferramentas de modelagem molecular no processo de aquisição de conhecimentos por parte dos estudantes é a partir da identificação dos *drivers* advindos desse processo de mediação. Para tanto, identificamos a necessidade de construção de uma metodologia inédita, que conseguisse dar conta de identificar os *drivers* criados no processo de mediação a partir não somente do discurso verbal, mas também – e principalmente – através do discurso não verbal.

### *6.1 Os CAMINHOS PERCORRIDOS PARA A CONSTRUÇÃO DA METODOLOGIA*

Para delinear a metodologia de pesquisa, foram necessários quatro experimentos realizados com públicos diferentes e com distintas formas. Desses quatro experimentos, os dois primeiros foram considerados experimentos piloto e os demais definitivos. A figura 10, a seguir, mostra um quadro com as principais características destes experimentos. O experimento definitivo 1 serviu como base para a qualificação desse trabalho de pesquisa. Após a qualificação, foi realizado o experimento definitivo 2, cujos dados estão dispostos e analisados no capítulo sete.

Figura 10: Quadro resumido das características dos experimentos realizados

<b>Característica</b>	<b>Piloto 1</b>	<b>Piloto 2</b>	<b>Definitivo 1</b>	<b>Definitivo 2</b>
<b>Público alvo</b>	Seis estudantes de curso técnico.	Vinte e cinco estudantes de graduação, divididos em dois grupos.	Cinco estudantes de graduação.	Seis estudantes de curso técnico
<b>Etapas do Experimento</b>	Teste individual pré-modelagem; Entrevista teste pré; Modelagem em dupla; Teste individual pós-modelagem; Entrevista teste pós.	Teste individual pré-modelagem; Entrevista teste pré; Modelagem em dupla; Teste individual pós-modelagem; Entrevista teste pós.	Teste individual pré-modelagem; Modelagem; Teste individual pós-modelagem; Entrevista.	Teste individual pré-modelagem; Entrevista teste pré; Modelagem; Teste individual pós-modelagem; Entrevista teste pós.
<b>Teste Escrito</b>	Uma questão.	Cinco questões.	Treze questões.	Nove questões
<b>Modificação</b>	Mais questões nos testes	Ter apenas um grupo	De 6 à 10 questões	Roteiro/resolução de problemas

A seguir, há a descrição das metodologias pensadas para os dois primeiros experimentos piloto, visto que o primeiro experimento definitivo está descrito mais adiante, no capítulo 7.

### 6.1.1 As contribuições do Primeiro Experimento Piloto

O primeiro experimento piloto foi realizado com seis estudantes do primeiro semestre do Curso Técnico em Química do Instituto Federal do Rio Grande do Sul – Campus Porto Alegre. A nossa pergunta de pesquisa para este estudo foi: como e de que forma são internalizadas as representações utilizadas durante a atividade de modelagem molecular no conteúdo de análise conformacional e estereoquímica? Partimos da seguinte hipótese inicial: quanto mais implícito ou internalizado é o conhecimento do estudante acerca de representações moleculares bi e tridimensionais, melhor é a sua habilidade visuoespacial e, portanto, há uma maior aptidão para a modelagem molecular.

Nesse sentido, procuramos realizar uma atividade simples de análise conformacional e estereoquímica e que envolvia conceitos como os de energia potencial, de barreira de potencial existente na torção da ligação dupla, dentre outros. A partir do momento que estes conhecimentos são construídos, as imagens mentais são consolidadas e o grande desafio passa a ser o de identificar sua presença a partir de metodologias aceitas.

O experimento foi pensado em cinco etapas:

- 1) **Teste individual pré-modelagem:** foi realizado um teste individual pré-modelagem que consistiu na seguinte pergunta: “Explique o que é estereoquímica (*cis/trans*) como se estivesse explicando para um colega de classe. Explique se é possível a rotação em torno da ligação dupla para a conversão da forma *cis* em *trans* e vice-versa. Utilize exemplos, gráficos, desenhos de moléculas ou qualquer mecanismo que achares importante ou necessário para justificar a tua resposta”;
- 2) **Entrevista individual pré-modelagem:** fizemos uma entrevista individual antes da realização da simulação de modelagem molecular, na qual o principal objetivo era o de propiciar que o estudante explicasse como resolveu a questão do teste pré-modelagem e quais os processos de pensamento que foram desencadeados na resolução do problema apresentado. O método utilizado para a entrevista foi baseado no Protocolo *Think Aloud* (VAN-SOMEREN et al., 1994) e denominado por nós de “*Report Aloud*” pelo fato de que o estudante reporta o seu processo de pensamento quando estava respondendo as questões do teste. O registro desta etapa foi feito em vídeo;
- 3) **Modelagem Computacional em dupla:** os estudantes realizaram a modelagem em dupla com registro em vídeo. Foram duas simulações cujos roteiros foram produzidos por nós e devidamente validados<sup>12</sup> por outros estudantes. A primeira foi a análise conformacional do n-butano, na qual os estudantes deveriam manipular o *software Spartan* a fim de criar a molécula, realizar a otimização de sua geometria (método semi-empírico,

---

<sup>12</sup> Todos os roteiros de modelagem molecular que envolvia o uso do *software Spartan* foram previamente validados na sua eficácia por estudantes do mesmo nível de ensino que o público alvo. Para tanto, os validadores realizaram a simulação utilizando os roteiros e avaliaram a clareza e nível de dificuldade dos referidos tutoriais.

parametrização PM3), criar os parâmetros para o gráfico de energia em função do ângulo de torção, plotar o gráfico e avaliar os resultados obtidos. Na segunda, os estudantes abriram uma simulação do *cis*-2-buteno já estruturada, na qual há três informações: a) um gráfico de energia potencial em função do ângulo de torção da ligação dupla, b) um gráfico do comprimento da ligação C2-C3 em função do ângulo de torção da ligação dupla e c) um gráfico relacionando a energia potencial com o ângulo de torção da ligação dupla e mostrando os orbitais moleculares HOMO<sup>13</sup> desta ligação dupla;

- 4) **Teste individual pós-modelagem:** após a realização da modelagem computacional, os estudantes realizaram um teste individual no qual consta a mesma questão do teste pré-modelagem;
- 5) **Entrevista individual pós-modelagem:** foi realizada uma entrevista individual logo após o teste pós-modelagem na qual utilizamos a mesma técnica de condução. O principal objetivo foi o de verificar se houve alguma mudança no processo de raciocínio do estudante para responder a questão do teste pós-modelagem, agora tendo ele passado pela simulação computacional. O registro foi feito em vídeo.

Este experimento rendeu duas publicações em eventos da Área de Ensino de Ciências (RAMOS; SERRANO, 2012, 2013b). Uma das modificações na metodologia inicial que optamos em fazer para o experimento seguinte foi a de fazer os testes pré e pós-modelagem com um número maior de questões teóricas. O motivo dessa decisão foi o de ter mais opções de questionamentos para a entrevista. Um teste com somente uma questão não abre muita margem para abordarmos os conteúdos da simulação, além de não ter um problema típico que exija o uso de conhecimentos químicos para a resolução de uma situação-problema, dificultando a condução da entrevista. Por outro lado, um teste (pré e pós modelagem) com mais questões teóricas acerca dos conteúdos da simulação permite ao pesquisador uma melhor compreensão da evolução cognitiva dos estudantes após ter passado pela simulação, além de dar a oportunidade de identificarmos os seus conhecimentos tácitos.

---

<sup>13</sup> Os orbitais HOMO, segundo a Teoria do Orbital Molecular, são os orbitais ocupados de maior energia. Fazendo um paralelo com a Teoria de Ligação de Valência, os orbitais HOMO são os orbitais da camada de valência.

Achamos importante aprofundar um pouco a etapa metodológica que embasou as entrevistas. O método de condução das entrevistas foi desenvolvido por nós e difere do protocolo *Think Aloud* de Van-Someren somente no momento em que o sujeito precisa explicar o seu processo de raciocínio ao resolver uma situação problema. No protocolo *Think Aloud* o sujeito pensa em voz alta quando está em processo de resolução da situação problema.

Por sua vez, no protocolo *Report Aloud* a tarefa de pensar em voz alta é realizada depois que o sujeito resolveu a situação problema. Optamos por realizar essa mudança no protocolo original *Think Aloud* levando em conta as vantagens e desvantagens específicas de cada uma das propostas. Se na técnica original *Think Aloud* tem como ponto positivo o fato de o entrevistador ter acesso direto no ato da descrição do que o estudante está pensando, a própria técnica em si provoca uma alteração na atividade de resolução de problemas que é, por certo, significativa! No mínimo a reflexão sobre como o problema será resolvido é maior do que se o estudante estivesse resolvendo sozinho, seja pelo emprego da técnica, seja pela presença de um observador.

Por sua vez, a técnica modificada *Report Aloud* tem como ponto negativo o fato de que o pesquisador não sabe ao certo se aqueles passos reportados foram efetivamente os mesmos utilizados pelo estudante na resolução do problema (que, em geral, ocorre uma semana antes). Contudo, o processo de resolução dos problemas propostos não é perturbado pela técnica e ocorre mais naturalmente. Ao analisar os resultados obtidos, verificamos que mesmo após uma semana transcorrida entre a atividade de resolução de problemas e a entrevista, ao se deparar com as suas respostas, o estudante é capaz de se lembrar dos detalhes mais importantes, e muitas vezes se mostra surpreso em ter pensado de uma forma em particular, como observamos diversas vezes nas filmagens.

### 6.1.2 Os Ensinamentos do Segundo Experimento Piloto

Para o segundo experimento piloto, optamos por fazer três alterações em relação ao primeiro: além de agregar a modificação oriunda da avaliação do primeiro experimento piloto (aumentar o número de questões dos testes), também optamos por mudar o público alvo e, por fim, realizar o experimento com dois grupos distintos, um grupo que utilizou a ferramenta de modelagem molecular e outro que não utilizou. No primeiro experimento, tivemos como público alvo os estudantes de educação básica e entendíamos naquele momento que deveríamos realizar um experimento com estudantes de graduação. Então, procuramos junto à Coordenação do Curso de Química da Ulbra algum contato de professor que pudesse ceder alguns períodos de sua disciplina para a realização do experimento. O contato foi feito e o segundo experimento piloto foi realizado contando com um tempo de 1h e 30min e a seguinte metodologia:

- 1) **Teste individual pré-modelagem:** foi aplicado um teste individual prévio à simulação computacional com todos os estudantes presentes na sala de aula. Construímos um teste com cinco questões sobre os conteúdos da simulação: representações de moléculas de cadeia aberta e fechada em 2D e 3D; possibilidade de rotação de uma ligação dupla e as consequências disso em relação às suas propriedades; configurações *cis* e *trans* de moléculas e sobre o conceito de estereoisomeria *cis/trans*;
- 2) **Entrevista individual pré-modelagem:** O principal objetivo desta entrevista era o de propiciar que o estudante explicasse como resolveu as questões do teste pré-modelagem e quais os processos de pensamento que foram desencadeados na resolução dos problemas apresentados. O método utilizado para a entrevista foi o Protocolo *Report Aloud*, adaptado por nós de Van-Someren et al. (1994) e o registro feito foi em vídeo;
- 3) **Modelagem Computacional em dupla:** foi feita a modelagem em dupla com os estudantes da amostra experimental com registro em vídeo, que iniciou com a simulação envolvendo a torção da ligação dupla do *cis*-2-

buteno e, após, foi feito o cálculo da energia dos compostos *cis* e *trans* do 1,4-dicloro ciclohexano para definir qual a molécula mais estável;

- 4) **Teste individual pós-modelagem:** foi realizado um teste pós-modelagem no qual constaram as mesmas questões do teste pré-modelagem;
- 5) **Entrevista individual pós-modelagem:** foi planejada uma entrevista individual somente com os estudantes que utilizaram a ferramenta de modelagem molecular. Para a condução da entrevista, foi utilizado o Protocolo *Report Aloud*, e o principal objetivo era de verificar se houve alguma mudança no processo de raciocínio do estudante para responder a questão do teste pós-modelagem, agora tendo ele passado pela simulação computacional. O registro foi em vídeo.

Após o aceite do professor, no dia da realização do experimento aplicamos o teste pré-modelagem com os vinte e cinco estudantes presentes na sala de aula. Após a realização do teste pré-modelagem, escolhemos de forma aleatória metade dos estudantes para a realização das simulações em outra sala na qual estavam prontos os computadores. Os estudantes que não foram sorteados seguiram na sala original com a professora responsável pela disciplina. Ao final da simulação, tínhamos como objetivo realizar o teste pós-experimento com os estudantes que utilizaram a ferramenta de modelagem molecular, mas devido ao adiantado da hora esta etapa foi feita nos dias seguintes, imediatamente antes da realização da entrevista pós-modelagem.

A Figura 11 mostra o esquema de etapas que planejamos para ambos os grupos no experimento piloto 2. Ao todo, fizemos vinte e cinco testes pré-modelagem e dezoito testes pós-modelagem, sendo que destes últimos, nove foram com estudantes que utilizaram a ferramenta de modelagem molecular e nove com estudantes que não usaram.

**Figura 11:** etapas do experimento planejadas para o segundo experimento piloto.

<b>Grupo que utilizou a ferramenta de modelagem molecular</b>	<b>Grupo que não utilizou a ferramenta de modelagem molecular</b>
Teste pré-modelagem	Teste prévio
Entrevista pré-modelagem	Entrevista teste prévio
Modelagem molecular computacional	Aula com a professora titular
Teste Pós-modelagem	Teste final
Entrevista pós-modelagem	Entrevista final

Para este segundo experimento piloto foi feito um planejamento conforme as etapas já descritas. Entretanto, a falta de tempo não permitiu a sua execução plena, pois não conseguimos realizar as seguintes etapas: 1) No grupo que utilizou a ferramenta de modelagem molecular: entrevista pré-modelagem; 2) No grupo que não utilizou a ferramenta de modelagem: entrevista teste prévio e entrevista final.

As etapas de execução do segundo experimento piloto foram: 1) No dia do experimento: teste pré-modelagem com todos os estudantes da turma; simulação computacional com metade da turma; teste pós-modelagem com os estudantes que não utilizaram a ferramenta de modelagem; 2) Na semana seguinte ao experimento: teste pós-modelagem e entrevista pós-modelagem com apenas três estudantes do grupo que utilizou a ferramenta da modelagem.

Este experimento nos mostrou quatro aspectos importantes. O primeiro, e talvez o mais importante naquele momento, foi a definição de que precisamos de tempo para a realização de um experimento com essa metodologia tão complexa. O segundo aspecto foi a constatação de que talvez não seja necessária a realização de uma entrevista logo após o pré-teste. O terceiro aspecto foi que não é necessária a divisão entre grupo que usou e que não usou a ferramenta de modelagem molecular. Por fim, o quarto aspecto foi a certeza de que é muito mais fácil conduzir a entrevista e buscar a informação acerca das representações e *drivers* dos estudantes sobre o conteúdo abordado quando os testes pré-modelagem e pós-modelagem possuem mais questões.

Com relação ao tempo, essa foi uma atividade realizada em dois períodos – cerca de 1 hora e 30 minutos – autorizados gentilmente por uma professora da Ulbra. De fato, esse tempo mostrou-se inviável para a realização de toda a atividade.



Chegamos à conclusão de que precisamos de tempo para aplicarmos os testes e, principalmente, para realizarmos as simulações computacionais sem atropelos. A boa realização de todas as etapas é fundamental para o sucesso do experimento, visto que os estudantes precisam de tempo para se apropriar dos comandos do programa, criando *drivers* específicos que vão possibilitar o manuseio do programa e a compreensão da informação que o *software* está apresentando. Sendo assim, iniciamos a construção de uma proposta de realização de um curso de extensão, para que haja o tempo necessário para a realização dos experimentos, sem a necessidade de usar períodos das disciplinas do curso de Química.

Com relação à entrevista, percebemos que existia a possibilidade de eliminar a entrevista pré-modelagem. Essa decisão foi tomada com base na premissa de que, com apenas uma entrevista no final, é possível identificar as representações e *drivers* adquiridos pelos estudantes por mediação com o computador. No entanto, para que a entrevista consiga revelar este conhecimento, pensamos ser importante que a postura do pesquisador, quando da realização da mesma, seja a de buscar incessantemente a informação de quando e como um determinado conhecimento ou representação foi aprendido pelos estudantes. Além disso, cabe ao entrevistador buscar constantemente a realização de comparações entre as respostas dos testes pré-modelagem e pós-modelagem.

Trazemos como exemplo alguns trechos de uma das entrevistas que conduzimos, em que podemos mostrar algumas das perguntas que fizemos ao estudante no sentido de elucidar a natureza de uma representação específica:

**Pesquisador:** Então como tinha te dito, a ideia é saber como tu pensaste, o que tu pensaste, o teu processo de raciocínio para responder as questões do teste. Então eu dividi nossa entrevista em quatro partes e a primeira parte é sobre a questão das representações 2D e 3D. A primeira questão tratava disso. Tu tinhas o composto 2-buteno e tu tinhas que fazer a representação 2D e 3D. Quando tu leste essa questão aqui pela primeira vez, que tu viste que era para fazer essa representação, qual foi a primeira coisa que veio na tua cabeça?

**Estudante:** a primeira coisa que me veio à cabeça foi realmente a estrutura.

**Pesquisador:** e essa estrutura, ela apareceu de cara, ou tu primeiro focaste numa parte dela para depois expandir?

**Estudante:** pelo nome, eu primeiro foquei na ligação dupla. É onde eu tomo como partida. Eu deixo ela como divisor, daí eu vou montando conforme o número de carbonos.

**Pesquisador:** divisor em relação ao que?

**Estudante:** divisor pra mim é como se fosse um centro, o centro da atenção. E aí, dali eu parto... não é a ramificação, parto para o resto da cadeia.

**Pesquisador:** sim, daí tu partes do centro para a periferia. E tu enxerga essa molécula como? Tu enxergas os átomos? Como tu enxergas, quando vem na tua cabeça essa imagem, tu enxergas ela como? Como letras, como bolas, regiões diferentes?

**Estudante:** eu foco mais é na ligação e, como eu sei o número de ligações que o carbono faz, eu tento...

**Pesquisador:** certo, e essa imagem, ela veio fragmentada. Primeiro a liga dupla e depois o resto.

Estudante: isso.

**Pesquisador:** e aí como é que tu enxergas essa ligação dupla? Assim, como tu aprendeste, como é que tu enxerga? Da onde vem essa representação?

(...)

**Pesquisador:** certo, e como é que tu enxerga essa molécula? Tu enxerga ela dinâmica, tentando girar, como é que tu vê isso na tua cabeça?

(...)

**Pesquisador:** porque antes tu vias ela estática. Ou seja, se tu estás dizendo que a molécula, a ligação é rígida, a molécula não pode girar, tu vias ela estática. Certo? Ela não girava. E agora? Como é que tu vê agora ela na tua cabeça?

(...)

**Pesquisador:** e a energia, como é que tu vê a energia nesse processo? Tu enxergas algum gráfico? Tu enxergas algum comportamento? Isso é simultâneo ou tu não enxerga? Como é que tu vê isso?

(...)

**Pesquisador:** tá, e como é essa associação? Assim, de uma forma mais qualitativa assim. Como é essa associação? Se tu começasse com a molécula *cis*, por exemplo, como seria a associação da energia? Se tu fores imagina assim, primeiro tu tens a molécula *cis*, aí ela vai girar e vai chegar em *trans*, só esses 180 graus aqui. Como é que tu vê a energia no início, no caminho e no fim?

(...)

**Pesquisador:** tá, e isso tu consegues enxergar mais dinâmico assim, ou são fotos estáticas? Tu consegues perceber, assim, o comportamento ou não?

**Estudante:** hoje eu consigo perceber melhor, antes do curso não.

**Pesquisador:** tu não tinhas nenhuma noção?

**Estudante:** não, tinha sim. Mas eu não visualizava, fazia, agregar isso. Vamos dizer assim juntar mais, juntar. É, ligação aqui e energia aqui. Hoje eu já consigo te representar isso. Provavelmente eu fiz uma associação.

**Pesquisador:** certo, então lá, antes, tu... essa representação ela foi adquirida recentemente?

Com relação à divisão dos sujeitos em dois grupos (grupo de estudantes que usaram a ferramenta de modelagem e que não usaram), nossa intenção inicial foi a de efetuar essa separação para tentar identificar se haveria algum tipo de evolução qualitativa distinta em comparação de um grupo e outro. Analisando somente o conteúdo dos testes (pré e pós), chegamos à conclusão de que não há a necessidade de tal divisão, uma vez que não conseguimos identificar modificação suficientemente importante para justificar sua manutenção.

Por fim, com relação ao aspecto do conteúdo dos testes pré-modelagem e pós-modelagem, identificamos como acertada a decisão de introduzir mais questões. Isso porque, ao responder um teste com mais questões, os estudantes têm a oportunidade de traduzir para o papel um leque maior de representações e *drivers*, dando a oportunidade ao pesquisador do diálogo e do questionamento quando da entrevista. Por fim, é importante ressaltar que os dados deste segundo experimento estão guardados, mas não foram utilizados para fins de publicação em função das ressalvas acima descritas. Com base neste caminho percorrido, compreendemos ser o momento de apresentar o resultado final de metodologia construída, que foi aplicada no primeiro experimento definitivo, cujos dados estão apresentados e analisados no capítulo seguinte.

## 6.2 DESCRIÇÃO DA PROPOSTA FINAL DE METODOLOGIA DE PESQUISA

Após o acúmulo de experiências produzido pelos dois experimentos pilotos, chegamos no momento de delinear os procedimentos metodológicos que construímos pela experiência vivida na pesquisa a fim de partirmos para os experimentos definitivos. É importante ressaltar que a metodologia de pesquisa apresentada nesse capítulo é inédita e acreditamos ser suficiente para elucidar quais as contribuições da modelagem molecular computacional para o aprendizado dos estudantes a partir da identificação de novas representações e *drivers* que foram adquiridas pelos estudantes a partir do processo de mediação com um mecanismo externo de processamento de informações – a simulação computacional de modelagem molecular.

A base de análise metodológica que adotamos é do tipo micro-etnográfica. Moreira (2002) conceitua a micro-etnografia como sendo:

(...) uma etnografia focada, isto é, uma etnografia que se ocupa de olhar repetidas vezes e de analisar detalhadamente registros audiovisuais de interações humanas em cenas-chave, em situações-chave de interação social, acompanhadas de observação participativa do contexto mais amplo no qual ocorrem tais cenas (op. cit., p. 51). É uma etnografia da comunicação, focando sujeitos individuais e seu discurso em certos cenários. (MOREIRA, 2002)

Por mais que nossos registros não sejam colhidos em espaço de sala de aula com todos os sujeitos envolvidos – o que normalmente ocorre da etnografia clássica – entendemos que a micro-etnografia se encaixa como base metodológica por se tratar, segundo Ezpeleta e Rockwell (1989), do tipo de etnografia que mais contribui para o desenvolvimento de pesquisa educacional, pois “*concentra-se na análise detalhada do registro (gravador ou vídeo) da interação que se dá nos ‘eventos educacionais’ de qualquer tipo*”. Os registros utilizados para a análise dos dados de nossa pesquisa foram, essencialmente, os vídeos gravados de entrevistas semiestruturadas e o objetivo foi analisar a linguagem verbal e não verbal dos estudantes para buscar indícios de criação de novas representações e *drivers* advindos da mediação por computador. Neste nosso caso, o evento educacional no qual nossa análise de tipo micro-etnográfica se debruçou foi o evento de resolução de um problema químico que envolva conceitos e representações presentes durante a atividade auxiliada por meio de *software* de modelagem molecular.

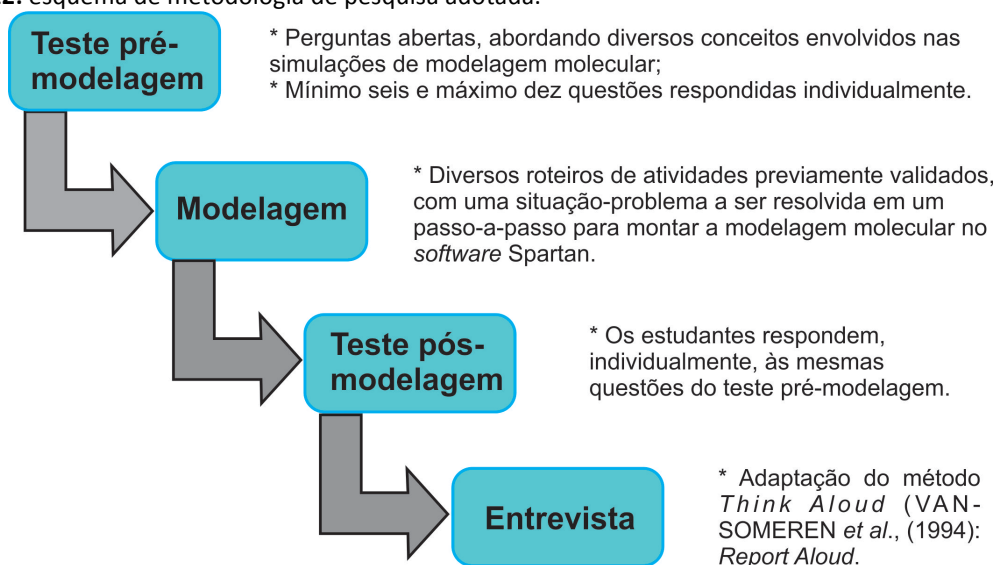
A linguagem verbal, presente nas transcrições das entrevistas, foi apreciada por nós com base na metodologia de Galiazzi e Moraes (2011): a análise textual discursiva. Por sua vez, a linguagem não verbal, caracterizada pelos gestos descritivos realizados pelos estudantes durante as entrevistas e principal ferramenta de identificação de *drivers* adotada, foi por nós analisada a partir da adaptação da metodologia oferecida pela linha de trabalho de Monaghan & Clement (1999) e Clement & Stephens (2010). Tais linhas de pesquisa revelam o conhecimento implícito inerente à visualização interna (simulação mental), através da externalização por análise gestual. A base da metodologia de Monaghan & Clement no trabalho supracitado consistiu em utilizar alguns indicadores, tais como os movimentos de mãos, para sugerir que os estudantes estavam se utilizando de imagens dinâmicas de simulações mentais durante a tarefa de resolução de problemas de movimento relativo.

Uma das conclusões as quais os autores chegaram é que o uso de simulações computacionais pode facilitar aos estudantes a apropriação de simulações mentais e este fato tem implicações positivas na aquisição de conhecimentos. Essa conclusão também é compartilhada pelo autor da TMC, na medida em que esta teoria acolhe a ideia de que o processo de mediação com um mecanismo externo de processamento

de informações propicia ao estudante construir na sua estrutura cognitiva as representações mentais análogas a estes mecanismos externos, sob a forma de imagens mentais. A partir desta metodologia, adaptada para nossa realidade de pesquisa, é possível identificar padrões de gestos e relacioná-los com os conhecimentos implícitos existentes na estrutura cognitiva dos estudantes e considerados por nós como *drivers* (CLEMENT; STEINBERG, 2002; CLEMENT; STEPHENS, 2010).

Laudan (2011) desenvolve a ideia de que tudo que observamos do mundo natural tem um olhar muito específico, pois cada observador vai utilizar os conhecimentos e pressupostos previamente existentes antes da observação para tentar compreender o que está sendo observado. Portanto, nossos conhecimentos prévios são importantes no processo de resolução de problemas, e grande parte deste conhecimento prévio utilizado é tácito (POLANYI, 1958). A figura 12 a seguir mostra a metodologia de pesquisa de forma esquemática.

**Figura 12:** esquema de metodologia de pesquisa adotada.



Neste sentido, a fim de poder identificar quais as representações e *drivers* – conhecimentos tácitos – adquiridos antes e depois da mediação por computador, propomos uma forma de condução para os experimentos futuros, cujo detalhamento das etapas é o seguinte:

### 6.2.1 Teste individual pré-modelagem

O teste escrito pré-modelagem é individual e conta com perguntas abertas, abordando os diversos conceitos envolvidos nas simulações de modelagem molecular. Este teste escrito tem por objetivo verificar a capacidade dos estudantes em colocar no papel (externalizar) seus conhecimentos prévios e de representação sobre os conceitos que serão posteriormente envolvidos na simulação computacional de modelagem molecular, pois a maioria das perguntas são feitas de forma com que o estudante tenha que explicar o conceito como se estivesse explicando para um colega de classe. A depender da quantidade de conteúdos abordados nos experimentos de modelagem molecular, o pré-teste deve ter um mínimo de seis e um máximo de dez questões abertas.

### 6.2.2 Simulação Computacional de Modelagem Molecular

Após o teste pré-modelagem, os estudantes manipulam o *software* de modelagem molecular, realizando as diversas tarefas propostas nas simulações. Cada experimento específico conta com um roteiro no qual consta uma situação problema a ser resolvida pelo estudante. Nessa situação, é solicitado ao estudante realizar o raciocínio acerca do conceito em tela e predizer os resultados, modela, observa o comportamento da(s) molécula(s) ou do sistema e confronta as hipóteses criadas no processo de predição com o que está acontecendo na tela do computador, numa tarefa típica de resolução de problemas. Cada roteiro por nós elaborado passou por uma validação prévia com alguns estudantes que não sejam os mesmos que farão o experimento para execução de ajustes que por ventura fossem necessários. Nesta etapa da metodologia, ocorre a mediação dos mecanismos internos presentes na estrutura cognitiva dos estudantes com os mecanismos externos de processamento de informações e, segundo nossa perspectiva teórica, novas representações e *drivers* são criados.

### 6.2.3 Teste individual pós-modelagem

Após a realização da simulação de modelagem computacional, ocorre a etapa de teste individual pós-modelagem, na qual os estudantes respondem às mesmas questões do teste pré-modelagem, mas com o diferencial de terem passado pela simulação de modelagem computacional.

### 6.2.4 Entrevista Individual

Propusemos a realização de uma entrevista semiestruturada individual logo após o teste pós-modelagem, na qual o principal objetivo é o de propiciar que o estudante explique como resolveu as questões ou grupos de questões do teste pós-modelagem e quais os processos de pensamento desencadeados na resolução dos problemas apresentados. O método proposto para esta entrevista, como já discutimos, é o *Report Aloud*. O registro desta etapa é feito em vídeo.

A entrevista individual logo após o teste pós-modelagem tem como objetivo buscar evidências de possíveis mudanças no processo de raciocínio dos estudantes, quando estes estão resolvendo as questões do teste pós-modelagem, em comparação com o teste pré-modelagem. A comparação das respostas oferecidas no primeiro teste com as do segundo teste é feita ao longo da entrevista e os estudantes são questionados sobre as diferenças nas respostas que, por ventura, são identificadas. Nesta etapa, procuramos não somente identificar quais mudanças ocorrem no processo de raciocínio dos estudantes, mas também qual a origem dessa mudança, questionando-os a todo o instante acerca destes importantes aspectos. Portanto, procuramos identificar como e quando as representações e os *drivers* foram adquiridos e, com isso, podemos identificar qual o papel da simulação computacional de modelagem molecular nesse processo. Cabe aqui ressaltar que a realização de duas entrevistas (uma logo após o pré-teste e outra após o pós-teste) não está totalmente descartada por nós e pode ser utilizada em experimentos futuros.

### 6.2.5 Análise dos Registros

A figura 13 mostra o esquema de análise dos registros colhidos a partir da metodologia adotada.

**Figura 13:** esquema de análise dos registros



Os registros obtidos desse processo metodológico são basicamente os testes – pré e pós – e os vídeos das entrevistas semiestruturadas realizadas. Os testes são utilizados basicamente para a condução das entrevistas e para uma análise comparativa posterior sobre possíveis modificações no padrão de respostas dos estudantes após terem passado pela simulação de modelagem molecular. Os principais registros que utilizamos para a realização da análise de dados são as transcrições das entrevistas, para a linguagem verbal; e a imagem de vídeo, para a linguagem não verbal.

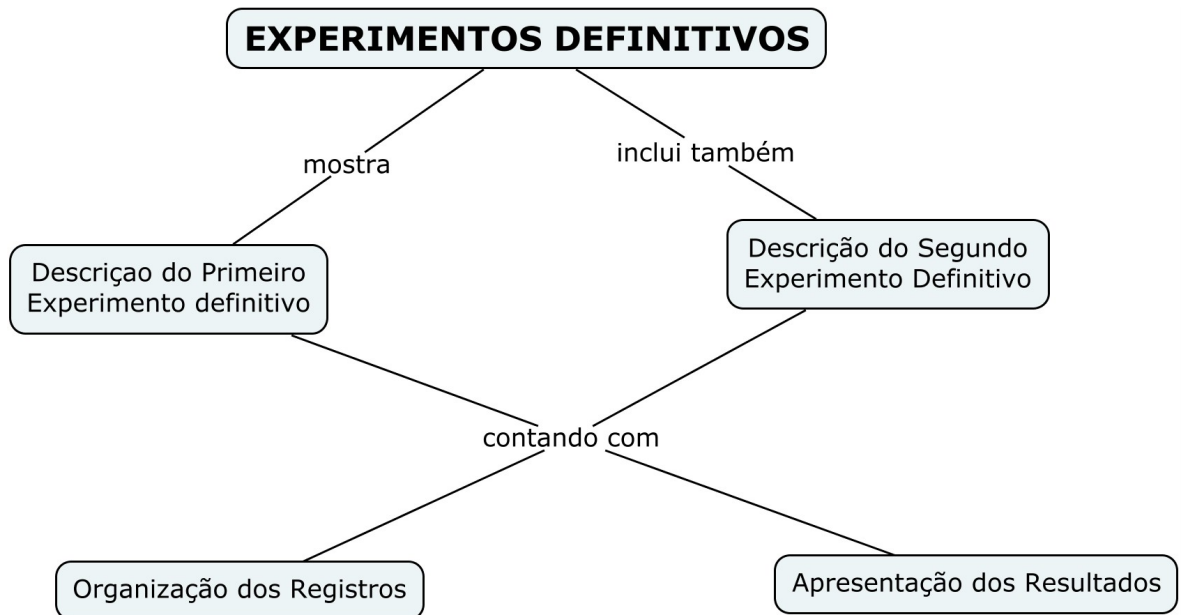
Uma possibilidade de organização dos registros já utilizada por nós e prevista por Galiazzi e Moraes (2011) é a de dividir os mesmos conforme as categorias que emergiram do roteiro da entrevista semiestruturada. Dessa forma, todas as respostas dos entrevistados são agrupadas conforme uma ordem definida previamente. No entanto, não descartamos a possibilidade de criarmos categorias diferentes, a partir da leitura flutuante do *corpus*. Após agruparmos todos os registros, iniciamos a catalogação de todos os gestos descritivos que os estudantes produzem ao responder os questionamentos na entrevista. Essa catalogação é feita pela identificação e



descrição do gesto produzido a partir da visualização das imagens de vídeo, assim como a definição do momento e do contexto em que o gesto foi produzido.

Partimos da premissa de que um gesto descritivo realizado no momento em que o estudante está explicando o seu processo de raciocínio para a resolução de um problema pode representar a externalização de uma imagem mental ou representação mental produzida pelo estudante para a resolução do problema (WAGNER et al., 2004; HEGARTY, 2004). Então, ao catalogarmos cada gesto descritivo realizado e vincularmos esse gesto a um determinado conteúdo que está sendo abordado, podemos encontrar as representações e *drivers* que o estudante está utilizando para explicar o raciocínio desenvolvido para a resolução do problema.

## EXPERIMENTOS DEFINITIVOS



*A melhor maneira de transformar sonhos em realidade é acordar e realizá-los com audácia e valentia.*

*(Mae C. Janison)*

Ao longo dos três primeiros anos da pesquisa, realizamos alguns experimentos que propiciaram sedimentar o caminho até este momento. O primeiro experimento definitivo, cuja apresentação e análise serviu de base para a qualificação dessa tese, será reapresentado na sequência. Por sua vez, o segundo experimento definitivo realizado após a qualificação, contou com um público alvo de estudantes de um curso técnico em Química e igualmente foi analisado e apresentado nesse capítulo. Os dados de ambos os experimentos definitivos estão dispostos no CD de Registros - Apêndice B.

### *7.1 DESCRIÇÃO DO PRIMEIRO EXPERIMENTO DEFINITIVO*

Trata-se de um curso de extensão realizado nos meses de agosto e setembro de 2013 na ULBRA/RS, intitulado “Introdução à Modelagem Molecular Computacional”, que contou com uma carga horária de 15 horas/aula e com sete estudantes de graduação no total. A proposta completa do curso encontra-se no Apêndice B, em anexo, na qual é possível ter conhecimento dos objetivos, do público alvo, da ementa e do cronograma de aulas, dentre outras informações.

Um teste pré-modelagem foi realizado no primeiro dia do curso, e foi utilizado para nortear as ações ao longo desse, visto que é importante saber os conhecimentos prévios dos estudantes para organizar as atividades em sala de aula e, também, para servir de registro dos conhecimentos tácitos dos estudantes. Um teste pós-modelagem foi aplicado no último dia de aula. Nos demais dias, foram realizadas atividades práticas com o objetivo de apresentar todas as ferramentas do *software* de modelagem molecular – Spartan versão 8.0. Nesses dias, foram entregues os roteiros das simulações de modelagem molecular para que os estudantes pudessem realizar cada uma das atividades, a saber: análise conformacional do etano; estereoisomeria *cis/trans*; reações de Diels-Alder partes 1 e 2; reações de Substituição Nucleofílica de segunda ordem. Todos os roteiros utilizados no curso foram elaborados por nós e devidamente validados por outros estudantes de graduação da Ulbra a fim de que pudessem ser utilizados no curso sem que houvesse algum problema ou erro no

roteiro. Tais roteiros são uma contribuição para possíveis utilizações futuras em sala de aula.

É importante ressaltar que, pelo planejamento inicial do curso, não estavam previstas as simulações abordando reações químicas – Diels-Alder e  $S_N2$ . Essa foi uma opção que fizemos no decorrer do curso, pois avaliamos que seria necessário acrescentar mais atividades para a sua segunda metade, visto que as atividades previstas para esse período foram executadas para fins de demonstração das ferramentas do *software*. Esta opção se mostrou acertada por dois motivos: primeiramente, porque é mais didático mostrar para os estudantes o funcionamento de determinada ferramenta do *software* com uma aplicação concreta e os roteiros que tínhamos já prontos e validados se encaixavam perfeitamente nesse contexto. Por fim, tendo em vista que todos os estudantes que participaram do curso ou eram formados ou estavam cursando a graduação, achamos interessante fazer uma abordagem mais ampla das potencialidades do programa e da própria modelagem molecular.

### 7.1.1 Organização dos Registros

Após a realização de todas as atividades do curso, iniciamos a fase de entrevistas, buscando contato telefônico com todos os participantes para os devidos agendamentos. No final dessa etapa, cinco estudantes aceitaram participar da entrevista. Dos cinco estudantes, dois eram graduados e três eram graduandos em Química industrial ou licenciatura. Destes últimos, o estudante L foi considerado e, a partir de agora chamado por nós, de *expert*, pois trabalha com modelagem molecular em um laboratório da própria Ulbra e já manuseou programas que realizam cálculos que envolvem a Química Quântica. Ao longo da entrevista, esse estudante produziu uma quantidade muito grande de gestos e demonstrou ter um bom conhecimento dos conteúdos abordados, o que nos fez optar por utilizar os registros como referência para fins de comparação com os demais estudantes. Portanto, sempre que necessário, vamos realizar a análise dos registros dos quatro outros estudantes com base no que o estudante L produziu de gestos. Por outro lado, também identificamos um estudante novato, que não tinha experiência em modelagem molecular nem

tampouco havia cursado disciplinas de Química Orgânica, visto que estava apenas no primeiro semestre quando da realização do curso. Sobre esse estudante, falaremos mais adiante.

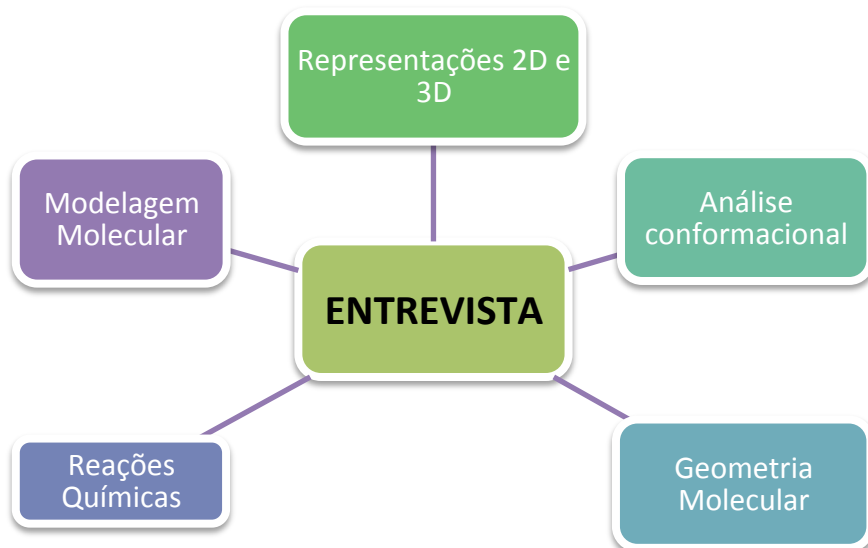
As entrevistas foram conduzidas a partir de um roteiro previamente elaborado, o qual foi seguido com certa liberdade em função das respostas que o próprio estudante ia nos oferecendo, ou seja, sempre que achávamos importante aprofundar um determinado ponto, fizemos o aprofundamento para, posteriormente, retomar o roteiro original. O roteiro das entrevistas foi estruturado com base em cinco eixos: representação 2D e 3D, análise conformacional, geometria molecular, reações químicas e modelagem molecular.

O objetivo das entrevistas foi o de buscar identificar a presença de representações e *drivers* – prévios e novos – a partir da descrição do próprio estudante sobre o seu processo de raciocínio para responder algumas das questões dos testes – pré e pós – dentro de cada um dos eixos temáticos acima descritos. Cada entrevista foi registrada em vídeo e teve uma duração aproximada de 1 hora, sendo que as falas foram totalmente transcritas e os gestos identificados. Ao todo, tivemos aproximadamente 280 minutos de gravações e 100 páginas de transcrições nesse experimento. Os registros integrais das transcrições das entrevistas estão presentes no CD de registros – Apêndice B.

#### A) DEFINIÇÃO DAS CATEGORIAS DE ANÁLISE

Após a transcrição integral das entrevistas, todos os gestos descritivos dos estudantes foram identificados e descritos ao longo do texto, com a indicação do tempo em que ocorreram. Ao final dessa etapa, optamos por agrupar os trechos dos textos das entrevistas conforme os cinco eixos temáticos que as nortearam. Portanto, nossa opção, naquele momento, sem prejuízos de outras, foi construir as mesmas categorias de análise que foram criadas para as entrevistas, já apresentadas e constantes na figura 14 abaixo.

Figura 14: organização das categorias de análise dos dados do primeiro experimento definitivo



Assim, ao final dessa etapa do tratamento dos registros de vídeo, obtivemos cinco arquivos (um arquivo para cada eixo temático) nos quais constam as transcrições das falas e as descrições de todos os gestos produzidos pelos cinco estudantes. A partir dessa categorização e organização dos registros, buscamos identificar as subcategorias envolvidas. **Consideramos como subcategorias os assuntos ou objetos os quais os estudantes estavam abordando quando os gestos descritivos foram produzidos.** Com base nessa última organização, podemos identificar cada gesto e vincular com um determinado conteúdo ou objeto.

### 7.1.2 Apresentação dos Resultados

A tabela 1, a seguir, mostra as categorias e subcategorias de análise que criamos para agrupar os gestos descritivos produzidos pelos estudantes ao longo das entrevistas.

**Tabela 1:** Categorias e subcategorias dos gestos identificados nas entrevistas do primeiro experimento definitivo

Categoria de Análise	Subcategoria de Análise (objeto)
Representações 2D e 3D	Molécula inteira Parte da Molécula Átomo Ligação Dupla Ligação Simples Plano Rotação da Molécula Rotação intramolecular
Análise Conformacional	Conformações <i>cis/trans</i> Ligação Dupla Ligação Simples Rotação intramolecular Gráfico Polaridade da Molécula
Geometria Molecular	Átomo Molécula como um todo Ligações Polaridade e Nuvem Eletrônica
Reações Químicas	Átomo Molécula como um todo Barreira HOMO-LUMO Ligações Polaridade e Distribuição Eletrostática
Modelagem Molecular	Átomos Molécula como um todo Rotação Intramolecular Movimentação de Elétrons/Nuvem Ligação

Portanto, as categorias emergiram dos eixos temáticos previamente escolhidos para estruturar as entrevistas. Por sua vez, as subcategorias se formaram em função daquilo que os estudantes estavam buscando explicar no momento em que os gestos foram produzidos. Por exemplo, na categoria de representações 2D e 3D, foram produzidos gestos descritivos para delinear a molécula inteira, partes da molécula, átomos, ligações duplas e simples, planos presentes na molécula, rotação da molécula como um todo e rotação intramolecular. No apêndice B, há a descrição completa dos gestos produzidos em cada uma das categorias e subcategorias de análise, compilados a partir da descrição de cada gesto.

Para evitar gestos duplicados, optamos por avaliar e apresentar os mais representativos de cada subcategoria, aglutinando algumas delas e buscando acrescentar o contexto no qual esse gesto foi produzido. Então, a apresentação que faremos a seguir mostra apenas os gestos descritivos que avaliamos serem os mais representativos de cada subcategoria, sem prejuízo do conjunto produzido. Todas as imagens apresentadas neste capítulo foram produzidas por nós a partir dos vídeos gravados e a identidade dos estudantes foram preservadas de acordo com princípios éticos da pesquisa.

#### *7.1.2.1 Análise da Categoria Representações 2D e 3D*

A categoria representação 2D e 3D foi a primeira a ser abordada nas entrevistas. O objetivo era tentar buscar as informações acerca de quais representações os estudantes tinham das moléculas em duas e em três dimensões. Ao longo da entrevista para esse tópico, buscamos insistentemente compreender de que forma os estudantes viam as moléculas, os átomos e as ligações químicas; se tinham noção da existência de algum plano nas moléculas, etc. Buscamos também identificar se os estudantes utilizavam mais de uma representação e, caso positivo, quais os momentos em que uma ou outra representação era utilizada.

##### **A) REPRESENTAÇÃO DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS**

Percebemos que há certos gestos universais para representação de átomos ou moléculas, tais como: uma única mão em forma de concha (como se estivesse segurando uma bola pequena), ou mesmo as duas mãos em forma de concha de frente uma para outra (como se as duas mãos estivessem segurando uma bola maior). Esse último foi reproduzido por todos os estudantes para representar o átomo, como mostra a figura 15, a seguir. Em alguns momentos, também serviu para representar uma molécula como um todo.



**Figura 15:** Gesto produzido por todos os estudantes para representar um átomo.





As imagens 15(A) e (B) mostram o gesto com ambas as mãos em forma de concha, realizado pelos estudantes. As figuras 15(B) e (C) mostram a mesma representação sendo feita com uma única mão. Sob o ponto de vista da representação de átomos, o gesto de representá-lo como uma esfera (mão em forma de concha) não foi necessariamente vinculado, em todos os casos, a uma imagem mental do átomo como esfera. A estudante N, por exemplo, enxergou os átomos como letras e sem distinção de cor, mas fez o gesto de mão em forma de concha para representá-lo. Por outro lado, os estudantes D, F e P informaram que enxergavam os átomos em forma de bolas. Sendo que o estudante D, além de enxergar os átomos em forma de bolas, fez a seguinte consideração, quando perguntado sobre diferenças de cor e tamanho:

Não, eu não diferencio os tamanhos. (...) pelo conhecimento que eu tenho, eu consigo visualizar ele de tamanho diferente, o hidrogênio menor, mas no momento de montar em si, eu não faço essa discriminação. (...) eu acho que é um pouco mais em cima do que eu vejo como necessário para aquilo ali. Se tu me pedisses mais detalhado, provavelmente eu detalharia um pouco mais para tentar diferenciar um do outro com cor ou tamanho. (Estudante D)

Esse aspecto relatado pelo estudante D, e percebido em outros momentos nas falas dos outros estudantes, mostra, a nosso ver, algo que naturalmente ocorre no nosso cérebro: a escolha do caminho com menor dispêndio de energia. Nossa hipótese de trabalho é, portanto, que se uma representação mais simples é possível de ser usada, ela será. Essa “economia de energia” que o nosso cérebro faz, ao utilizar modelos e representações mais simples para caracterizar um determinado objeto, também, aparentemente, é vista em outros trechos de entrevistas dos estudantes. Todos, de uma forma ou de outra, relataram que, primeiramente, buscaram a forma mais simples de representar.

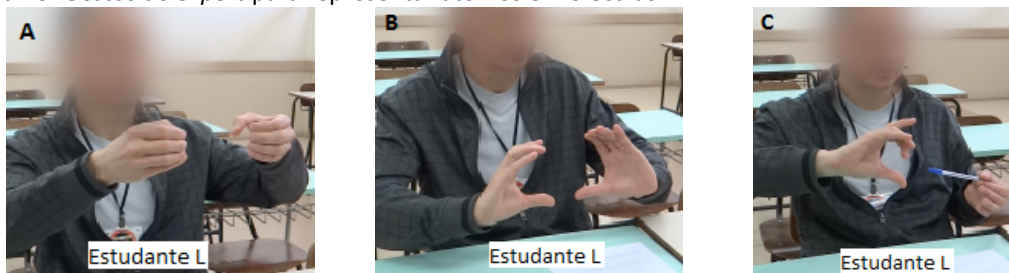
Os demais estudantes, em que pese terem informado conseguir enxergar os átomos como bolas, na sua maioria não veem distinção de cor ou tamanho quando precisam desenhar uma molécula no espaço de duas dimensões. Quando a tarefa, contudo, é de representação em 3D, algumas mudanças ocorrem. A introdução de mais uma dimensão no desenho cria uma dificuldade de representação nos estudantes, pois eles procuram colocar as moléculas posicionadas de forma a diferenciar a posição dos átomos no espaço tridimensional.

A principal dificuldade que os estudantes tiveram foi de trabalhar com a noção de plano e de posicionar a molécula considerando a existência desse plano, usando as representações clássicas de ligações químicas que estão para atrás do plano (  ) e para a frente do plano (  ). Em relação a como eles veem os átomos em 2D e 3D, não houve diferenças significativas, ou seja, os estudantes que visualizaram átomos como bolas o fizeram no espaço 2D e 3D, assim como os que enxergaram letras. Para exemplificar o que queremos dizer, tomamos como exemplo as respostas do *expert*, que tem uma representação de átomos como letras, independentemente se está enxergando as moléculas no espaço de duas ou três dimensões. O *expert* explicou sua forma de ver as moléculas:

Ah, sempre a grafia. Eu não consigo imaginar a questão da esfera. Vamos dizer que depois do curso tu já pensas mais em uma de uma corzinha e outra de outra cor, mas ainda continua sendo a questão das letras. (...) E no 3D a minha preocupação é de usar a representação que torne possível de, no plano, tu representares. (...) Tu tens que dar uma perspectiva para quem olha assim tenha uma ideia de profundidade, mas eu enxergo letra e palitos sem cor.  
(*Expert*)

A figura 16, a seguir, mostra os gestos do *expert* para representar átomos e moléculas. É interessante notar que, apesar dele ter afirmado que vê letras, ele representou em gesto o átomo como bolas. Na imagem (A), o *expert* executou um gesto com ambas as mãos representando átomos; em (B), ele colocou as mãos em forma de concha, representando uma molécula; em (C), fez um gesto com a mão direita, representando um átomo e com a caneta, a ligação química.

Figura 16: Gestos do *expert* para representar átomos e moléculas.



A hipótese que construímos para explicar esse aspecto é que os *drivers* culturais, neste caso, estão muito arraigados, e é difícil para os estudantes deixar de usá-los. A linguagem química, no que diz respeito à grafia dos elementos químicos que hoje conhecemos, data do início do século XIX e tem um componente cultural muito forte. Além disso, há de se considerar que a representação de átomos como letras é mais simples de se usar do que a representação de bolas. Para usarmos uma representação de bolas, precisamos lançar mão de outros artifícios, tais como diferenças de cor e de tamanho para diferenciar os átomos e, como já trouxemos como hipótese que a representação cognitivamente menos dispendiosa será utilizada, o cérebro sempre busca simplificar. Podemos verificar que os gestos produzidos pelo *expert* e pelos demais estudantes são praticamente os mesmos, o que reforça nossa explicação de que os *drivers* culturais e mais simples são preferencialmente utilizados pelo cérebro para representar átomos e moléculas. E, por consequência, os *drivers* hiperculturais somente são utilizados em tarefas mais complexas, as quais os *drivers* culturais não dão conta de resolver.

Como conclusão dessa etapa, temos que as representações utilizadas pelos estudantes, após o uso do *software* de modelagem molecular, podem ser culturais (letras) ou hiperculturais (semelhantes ao *software*); o *expert* prefere utilizar letras, mas com *drivers* de rotação molecular típicos de quem teve contato com o *software*. Assim, concluímos que uma representação mais simples pode se tornar preferencial, mesmo para *experts*.

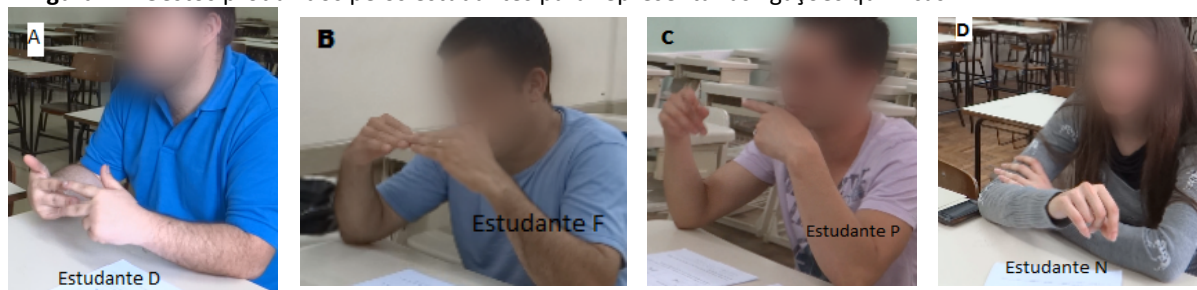
## B) REPRESENTAÇÃO DE LIGAÇÕES SIMPLES E DUPLAS

Com relação às ligações químicas, percebemos algumas nuances interessantes nas falas dos estudantes. Por exemplo, o estudante D, ao explicar como enxergava as ligações duplas, afirmou: “*para a composição aqui eu enxergo como dois palitos. Eu sei*

que não, que tem todo um... tem toda uma... é mais que isso, é diferente do que isso, mas para composição de transcrever, eu enxergo assim". O estudante afirmou saber que existe algo a mais do que simplesmente um traço (representação), mas enxergou o traço.

Os gestos produzidos pelos estudantes quando se referiam às ligações químicas eram, via de regra, de cunho cultural, pois a maioria dos gestos remeteu à representação de palitos, como mostra a figura 17, a seguir. Na imagem (A), o estudante D representou uma ligação dupla com os dedos em "V"; em (B), o estudante F representou a ligação dupla com a formação de um plano; em (C), o estudante P representou uma ligação simples com o dedo indicador; em (D), a estudante N representou uma ligação simples como se estivesse desenhando um traço no espaço.

**Figura 17:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar as ligações químicas.



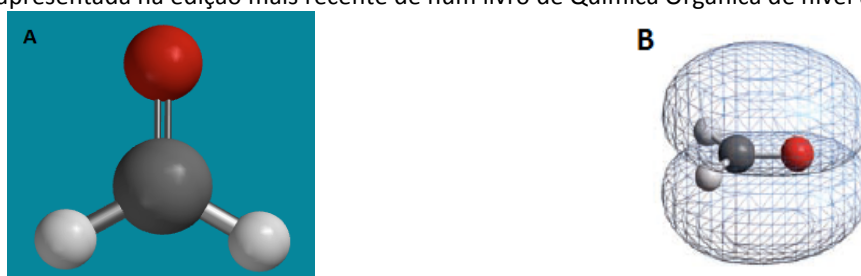
Por outro lado, o estudante P nos mostrou que sua visão de ligação química é diferente:

Daí eu já não enxergo com risquinhos que nem está aqui. Eu enxergo como se fosse um... como é que eu vou explicar... algo que eu já vi e que dá para explicar. Como se fossem umas... sabe quando uma superfície está quente e que tu olhas e parece que tem um vaporzinho assim pra cima? Eu imagino como se fosse uma nuvem meio acinzentada, branco gelo. E as bolinhas são sempre esses desenhos que a gente vê, né? O carbono é cinza, o hidrogênio é branco, o oxigênio é vermelho. São coisas que fixam na cabeça. (Estudante P).

Na representação construída pelo estudante P, podemos identificar os elementos psicofísicos e culturais de representação. Na fala, o estudante comparou a ligação química com o vapor saído de uma superfície quente. Ele representou a nuvem eletrônica da ligação química com uma representação advinda de mediação psicofísica, ou seja, um vapor de convecção do ar mais quente subindo de uma superfície quente. Também há a indicação de *drivers* culturais na medida em que ele

enxergou cores diferentes para os átomos. Essas cores são, via de regra, padronizadas e esse padrão de cores dos átomos é seguido pelo *software Spartan* e também pelos principais livros de Química Orgânica. A figura 18, a seguir, mostra uma molécula de formaldeído construída pelo *software*, com oxigênio em vermelho, carbono em cinza e hidrogênio em gelo, assim como a mesma molécula disposta num dos principais livros de Química Orgânica para graduação (SOLOMONS; FRYHLE, 2011), na qual estão representados, inclusive, os orbitais da ligação “pi”, com uma cor próxima à cor que o estudante relatou ver: branco gelo.

**Figura 18:** Padrão de cores para a molécula de formaldeído. (A) molécula construída no software; (B) molécula apresentada na edição mais recente de num livro de Química Orgânica de nível universitário.

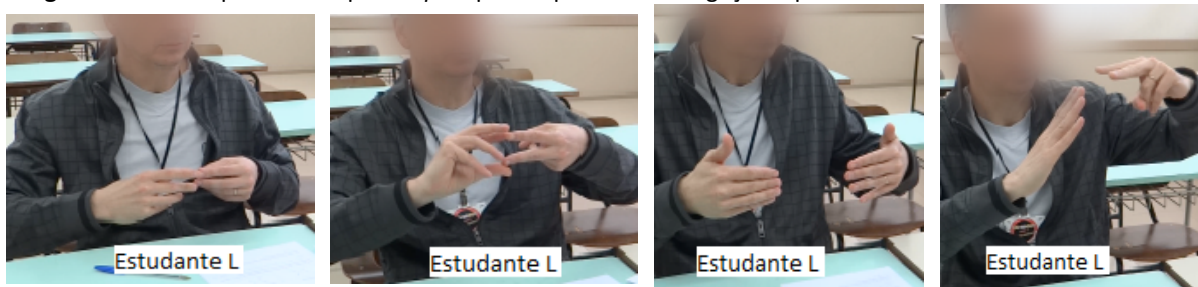


A representação dos estudantes sobre as ligações não difere muito do que o *expert* enxergou. Quando perguntado, ele também informou que enxerga traços, apesar de saber que há muito mais por de trás dos traços:

Assim, ó, se eu disser que depois que eu fiz o curso eu me senti forçado a utilizar o *software*, vamos dizer assim ó, esquece o traço e pensa em nuvem, ele faz uma soma em cima disso aí. Mas não adianta, tu continuas agarrado naquela questão do modelo de paus e bolas, mas vai substituir as bolas por outra, pela representação de tabela. (*Expert*).

O *expert* gesticulou o tempo todo quando falou sobre sua representação de ligações químicas, e os seus gestos deram conta do modelo de palitos, como podemos observar na figura 19, a seguir. Na imagem (A), o *expert* representou uma ligação dupla por dedos em “V”; em (B), a ligação dupla foi representada com dedos em “V” e um átomo por uma mão em forma de concha; em (C), o *expert* representou a ligação dupla com a formação de um plano; em (D), a ligação dupla com dedos em “V” e ligação adjacente com mão espalmada.

**Figura 19:** Gestos produzidos pelo *expert* para representar as ligações químicas.



Novamente um forte indício de que os *drivers* culturais e mais simples são os preferenciais. Ligações químicas são complexas, pois sua existência envolve uma série de fatores espaciais, de simetria e energias favoráveis. No entanto, a representação de palitos foi muito usada por ser simples e por resolver boa parte dos problemas quando se trata de representar essas ligações. A conclusão a qual chegamos em relação a esta subcategoria é que as representações de bolas e palitos são as preferenciais para se representar ligações químicas. A esta representação, é adicionada uma outra representação de densidade eletrônica, que pode ter várias origens (psicofísica, cultural ou hipercultural).

### C) REPRESENTAÇÕES DE PARTE DA MOLÉCULA E DE PLANOS

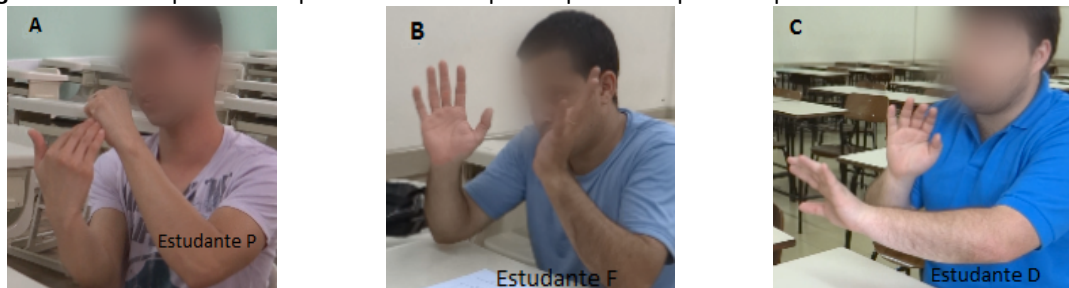
A representação de parte de uma molécula e de planos seguiu a mesma lógica de representação gestual de átomos e ligações. De maneira geral, quando precisaram descrever partes da molécula e a existência de planos, os estudantes utilizaram os mesmos gestos descritivos que utilizaram para descrever os átomos e as ligações. A figura 20 mostra uma série de gestos descritivos que foram usados ao longo da entrevista, especificamente quando os estudantes estavam explicando o posicionamento de átomos numa molécula e a existência de planos nesta molécula.

Podemos perceber que o estudante P usou a mão espalmada para representar a ligação, mas também repetiu o gesto descritivo de um átomo com a mão fechada. O estudante F mostrou dois ligantes dos carbonos unidos por ligação dupla, colocando ambas as mãos espalmadas e com um ângulo bem definido – um ângulo de  $120^\circ$  da geometria trigonal plana. Por fim, o estudante D mostrou, com sua mão direita projetada para si, que parte da molécula está para o lado de trás do plano e, com sua



mão esquerda projetada para frente, que a outra parte está para frente do plano. Neste caso, o plano não foi construído pelas mãos, mas sim encontra-se num plano imaginário no espaço entre as mãos.

**Figura 20:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar planos e partes da molécula.



O *expert* usou a mesma representação para ligação dupla que já foi usada por outros estudantes – os dedos em “V” – e, para a ligação química que une o carbono dessa ligação dupla com um átomo periférico, usou a mão espalmada, como vimos na figura 17. São gestos que demonstraram a manutenção dos *drivers* culturais quando os estudantes precisaram representar átomos, ligações e moléculas.

Quando a tarefa era de representar a existência de planos, o gesto universal foi uma ou duas mãos espalmadas, muito próximas ou em movimento de translação, sendo que o plano é a própria mão. Também identificamos gestos em que o plano não está na(s) mão(s) dos estudantes, mas sim em um plano imaginário entre ambas as mãos, como mostramos na figura 20(C).

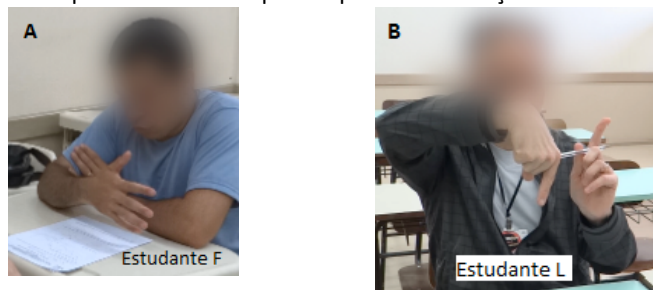
Até o presente momento, ainda não podemos afirmar que existe algum *driver* hipercultural sendo utilizado por algum estudante, pois todos os gestos produzidos nos levam a acreditar que há uma forte presença do elemento social ou cultural, construído no convívio de sala de aula e no manuseio de livros da área. Isso se deve, a nosso ver, ao fato de que, até o momento, os estudantes somente precisaram descrever átomos, seus posicionamentos na molécula, a molécula como um todo e a presença de planos, e essa tarefa é de fácil execução a partir da mobilização de *drivers* mais simples e de natureza cultural ou social.

#### D) REPRESENTAÇÕES DE ROTAÇÃO INTRAMOLECULAR E DA MOLÉCULA

Na subcategoria de rotação da molécula ou de parte dela foi possível perceber que os estudantes novamente utilizaram das mesmas representações para átomos e

ligações quando demonstraram uma rotação, conforme mostra a figura 21 a seguir. Na imagem (A), o estudante F colocou a mão direita espalmada em sentido vertical e depois fez um giro de 90° para demonstrar um giro da molécula como um todo; em (B), o *expert* inicialmente montou a forma *cis* com as mãos e uma caneta e, depois, girou somente a mão direita para montar a forma *trans*.

**Figura 21:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar rotações intramolecular e da molécula.



Nessa subcategoria, foram poucos os gestos realizados, pois o foco aqui não era exatamente trabalhar com a análise conformacional, e sim buscar compreender quais eram as representações e *drivers* dos estudantes acerca de átomos, ligações e moléculas no espaço de duas e três dimensões. A conclusão geral dessa categoria é que as representações utilizadas são as (a) de bolas e palitos para ligações e átomos; (b) de bolas e palitos acrescida de uma representação para densidade eletrônica e (c) de bolas ou letras para átomos. Não detectamos registro de outras formas representacionais como a CPK (Sólida), dentre outras.

#### 7.1.2.2 Análise da Categoria Análise Conformacional

Na categoria análise conformacional, buscamos identificar as representações e *drivers* dos estudantes sobre as diferentes conformações das moléculas e quais as propriedades que se alteram no processo de rotação intramolecular em especial a energia. No pré-teste, abordamos esse tema com algumas questões. Dentre elas uma, retirada diretamente do *software Spartan*, em que o estudante tinha que relacionar a coluna da esquerda, a qual mostrava quatro conformações diferentes da molécula de butano, com a coluna da direita, a qual mostrava distintas posições de energia de um gráfico de energia *versus* ângulo de torção da ligação C2-C3. No pós-teste, a mesma

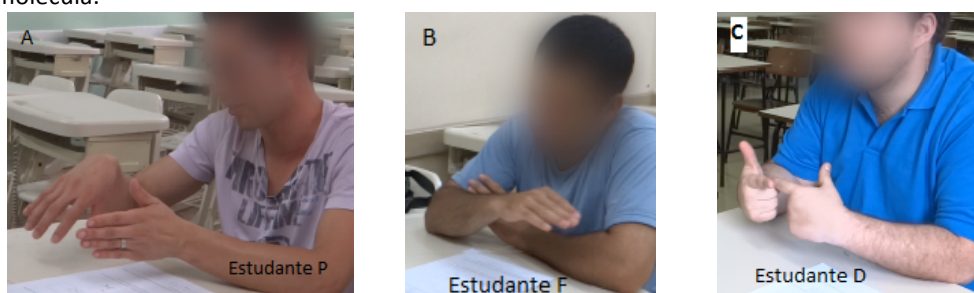


questão de relacionar as colunas foi recolocada. Porém, para as demais questões, optamos por usar moléculas diferentes a fim de ver o comportamento das respostas dos estudantes. Ao longo dessa etapa de entrevista, e com base na questão de relacionar uma coluna com a outra, os estudantes produziram gestos para descrever as diferentes conformações de moléculas, incluindo ligações químicas simples e duplas, gráficos e polaridade de moléculas.

#### A) CONFORMAÇÕES *CIS/TRANS*

Na subcategoria conformações *cis/trans*, vários foram os gestos descritivos para explicar a distribuição dos átomos da molécula. Em sua maioria, os gestos produzidos pelos estudantes seguiram o mesmo padrão da categoria anterior, pois a descrição das diferentes conformações caracterizava-se como uma tarefa muito similar à tarefa de descrever de que forma o estudante enxergava uma molécula num espaço 2D ou 3D. Nesse sentido, optamos por mostrar alguns gestos apenas, mas gestos descritivos que não tinham sido usados em categorias anteriores, como os que apresentamos na figura 22, a seguir. Na imagem (A), o estudante P mostrou com a mão direita a presença dos substituintes no mesmo lado do plano, marcado pela mão esquerda espalmada, compondo a forma *cis*; em (B), o estudante F mostrou o plano que separa os dois lados de uma molécula e que é condição para pensar em conformação *cis/trans*; em (C), o estudante D mostrou a forma *cis* e, depois de um giro da mão esquerda, mostrou a forma *trans*, colocando o polegar pra baixo.

**Figura 22:** Gestos descritivos produzidos pelos estudantes para representar os diferentes confôrmeros de uma molécula.



É importante trazer a fala do estudante F sobre esse tópico específico de conformação *cis/trans*. O estudante explicou:

Sim (quando perguntado se tinha deixado a questão no pré-teste em branco), não sabia o que fazer. Tanto que no primeiro dia eu pedi arrego, disse que não conseguiria acompanhar porque o pessoal estava bem mais avançado. Daí, no

caso, como eu vi isso aqui depois no final, eu tentei lembrar na cabeça o que a gente tinha montado no programa relacionado a *cis* e *trans*. Daí eu comecei com um plano, com o carbono, para depois fazer o resto da montagem. (estudante F).

Podemos considerar este estudante como um novato, pois cursava o primeiro semestre de Química na Ulbra quando participou do curso. Não tinha ainda cursado as disciplinas de Química Orgânica, somente Química Geral e seu conhecimento de moléculas se resumia a montar algumas geometrias. Isso é confirmado pelo próprio estudante, quando afirmou: “*depois, porque antes eu não sabia nada. Nem imaginava o que era cis e o que era trans. Foi depois do programa que eu tive uma base, um básico do que se trata*”(sic).

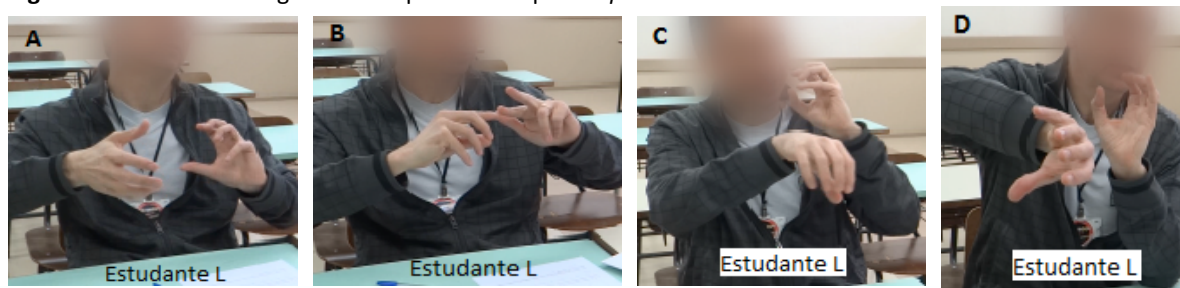
Então, após o uso do *software* o estudante novato incorporou alguns elementos do programa e isto será abordado com mais detalhes posteriormente. Por ora, podemos dizer que nessa categoria, o novato deu indícios de que utilizou a simulação computacional como ferramenta de processamento externo de informações, obtendo um ganho cognitivo, pois já iniciou na fala e nos gestos a mostrar alguns conhecimentos específicos que antes ele não possuía.

Por sua vez, o *expert* executou vários gestos para explicar as distintas conformações que uma molécula pode assumir. Os mais significativos estão dispostos na figura 23, a seguir. Podemos observar que o *expert* fez alguns gestos que vimos nos demais estudantes, como por exemplo em 23(A), em que ele mostrou uma rotação intramolecular, girando ambas as mãos, mas uma em sentido horário e outra em sentido anti-horário. O gesto em 23(B) também foi repetido por outros estudantes. Nele, o *expert* mostrou o rompimento da ligação ‘pi’, representada pelos dedos em “V” da mão esquerda. É fácil notar que os dedos indicadores de ambas as mãos estão unidos e apenas o dedo médio da mão esquerda foi rotacionando até se separar do conjunto, demonstrando o rompimento da ligação.

No entanto, os mais representativos que, na nossa visão, foram efetuados pelo *expert* nesta etapa da entrevista estão em 23(C) e 23(D), não pelo gesto em si, mas sim pela forma dos átomos. Os dois representam a rotação de uma molécula de butano na análise conformacional. Em 23(C), mostra a posição *trans* que foi construída a partir do giro das mãos partindo da posição *cis*. Por sua vez, em 23(D)

mostra uma posição intermediária entre a *cis* e a *trans*. O que apontamos como importante nestes dois gestos é o fato de o *expert* ter, aparentemente, migrado sua representação de átomos como letras para átomos como bolas, apropriando-se da representação hipercultural advinda da mediação por computador.

**Figura 23:** Gestos mais significativos produzidos pelo *expert* sobre análise conformacional.



O *expert*, quando perguntado qual foi a primeira coisa que veio à sua cabeça quando se deparou com a tarefa de relacionar a coluna da esquerda – a qual constava quatro conformações distintas do butano – com a coluna da direita – a qual possuía quatro posições distintas num gráfico de energia versus ângulo de torção da ligação C2-C3 –, respondeu e gesticulou dessa forma:

Me veio a apresentação em aula, lá. O gráfico fazendo isso (realiza movimento senoidais com o dedo indicador), subindo e descendo. Da girada (com ambas as mãos em formato de concha, faz um movimento de giro intercalado) que a gente pedia quando mandava varrer os ângulos de ligação. (...) **Não, não foi mais com letras...** aí tu consegues imaginar. Porque nesse caso, simplifica tu pensares em bolas. Porque tu tens bolas (coloca as duas mãos na frente do rosto em formato de concha), são essas bolas que estão aqui (começa a fazer um movimento de vai-e-vem para frente e para atrás), elas estão em movimento, inclusive. Então pô, o que acontece aqui? (segue com o movimento de vai-e-vem) Aqui fica ruim, aqui fica melhor (gira uma mão pra frente e outra pra trás, fazendo a molécula *trans*, mantendo o movimento de vai-e-vem). Olha só o espaço em que elas podem brincar! (além do movimento de vai-e-vem, também faz pequenos giros com o punho, aumentando a área de vibração). (*Expert*). Grifo nosso.

O *expert* afirmou que muda de representação porque a representação de átomos como bolas é mais simples para este caso em que precisa explicar o movimento, e isso ocorreu porque a primeira lembrança que o *expert* teve quando foi tentar responder a questão foi a lembrança hipercultural, da simulação computacional de análise conformacional que fizemos em aula. No entanto, esse efeito parece ser permanente somente quando a lembrança dele foi hipercultural, e não quando os *drivers* socioculturais foram suficientes para a resolução do problema.

Neste caso, o *expert* voltou a enxergar os átomos como letras, pois esta é a sua representação sociocultural.

É possível que o *expert* tenha desenvolvido *drivers* de rotação intramolecular com representações culturais (por meio do uso de livros ou outros elementos culturais) e apenas adquiriu os *drivers* hiperculturais ao interagir com ferramentas hiperculturais. Nossa hipótese é, portanto, que a primeira vez que o indivíduo adquire uma representação e *driver* funcional para uma classe de situações, uma vez assimilado, essa mesma representação e *driver* será repetida em diferentes situações.

## B) LIGAÇÕES DUPLAS E SIMPLES

Da mesma forma que a representação de átomos e moléculas presente na categoria representação 2D e 3D foi descrita pelos estudantes com gestos muito parecidos aos descritos na categoria análise conformacional, a representação de ligações simples e duplas também teve a produção de gestos descritivos parecidos. Diante disso, e para não nos tornarmos repetitivos, optamos por mostrar nessa subcategoria apenas alguns gestos que achamos mais representativos e diferentes daqueles produzidos anteriormente, incluindo aqui o *expert*, na figura 24.

Em 24(A), vemos o estudante D fazendo gesto da representação de uma ligação dupla, colocando ambos os dedos indicadores em paralelo. Logo depois, o estudante tentou girar as mãos para demonstrar que, por conta da rigidez da ligação dupla, a torção não era possível. Em 24(B), a estudante N mostrou a ligação dupla encostando as pontas dos dedos indicador e médio de ambas as mãos, também para explicar a torção. Por fim, o *expert* mostrou os orbitais da ligação 'pi', em cima e embaixo do eixo da ligação. Em 24(C), o *expert* mostrou os orbitais "pi" da dupla ligação.

**Figura 24:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar as ligações químicas.



Este trecho específico das entrevistas merece um pequeno aprofundamento. Uma das questões presentes tanto no pré-teste quanto no pós-teste abordou a possibilidade de rotação da ligação dupla de um alceno. Sabemos de antemão que existe um certo senso comum, tanto no ensino médio quanto na graduação, de que ligações duplas não podem sofrer rotações. Este senso comum foi reproduzido pelos estudantes em suas respostas no pré-teste.

Dos cinco estudantes entrevistados, dois não responderam a questão em ambos os testes e três responderam negativamente no pré-teste e positivamente no pós-teste. Das respostas do pré-teste, temos a do Estudante D: *“não, pois a ligação dupla é mais rígida”*. Por sua vez, a estudante N responde: *“não, por causa da ligação dupla”*. O *expert* escreveu: *“não. A ligação dupla ocorre por dois planos, o que impossibilita a rotação”*.

A forma como essa informação é transmitida para os estudantes, via de regra, leva à construção de conceitos equivocados. A não vinculação do fenômeno de conformação das moléculas com sua energia faz com que os estudantes percam a possibilidade de construir o conceito integralizador de energia desde o início, e normalmente leva os estudantes a concluir que o principal motivo que impede a torção de uma ligação dupla é a sua rigidez. Essa ideia de rigidez foi explicada pelo estudante D, na entrevista:

Aqui eu fui bem sucinto. Rígida é aquela... eu também vou fazer uma crítica. É, toda a minha vida acadêmica eu sempre ouvi isso, que a ligação dupla não tem como fazer rotação. (...) É que hoje pra mim fica mais difícil de responder assim, porque eu sei que é diferente. Mas a rigidez em si é o que veio, né. Ligação, eu sei que é uma ligação e tem a ligação pi que é diferenciada, né? Mas o conceito sempre me foi visto como se essa ligação não tivesse, vamos dizer assim, que a ligação 'pi' impedisse que isso, que ocorresse movimentos de rotação. Essa foi a minha visão de início. (Estudante D).

O mesmo estudante respondeu no pós-teste: *“é possível torcioner a ligação dupla; porém, para efetuar a mudança de configuração, exige-se uma alta energia. Antes que essa energia seja alcançada ocorre o rompimento da ligação pi”*. O próprio *expert* considerou inicialmente que não é possível torcer a ligação dupla. No entanto, no pós-teste, sua opinião também mudou: *“sim, apesar de energeticamente desfavorável, não existe uma fixação das ligações”*. Na entrevista, o *expert* explicou melhor esse conceito da rotação da ligação dupla:

Porque quando tu tens uma ligação simples, tu tens a rotação permitida, vamos dizer assim. Mas tu tens também a rotação permitida quando tu tens uma ligação dupla. Porque tu tens esse plano, só que tu tens que quebrar isso aqui e refazer a ligação e automaticamente o que tu tens em posição *cis* como referencial, tu tens em posição *trans*. Só que essa ligação se desfez e se refez com o substituinte agora numa posição em relação a esse plano, agora em posição *trans* enquanto antes ele estava numa posição *cis*. Hã, pode ser feito? Pode. Energeticamente desfavorável para transitar entre uma e outra, mas tem que colocar energia pra tu poder fazer a rotação, se não tu não vais ter essa conformação e essa reconformação. (*Expert*).

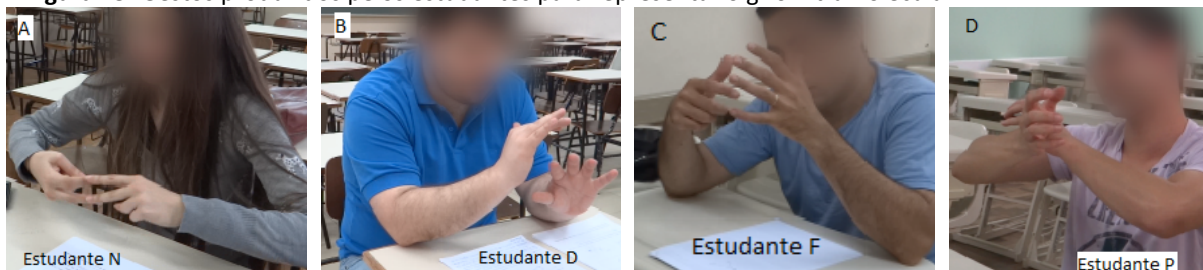
Nossa hipótese é que ocorreu uma mudança na forma que o estudante explicou o porquê da rotação da ligação dupla nos alcenos não ocorrer: antes, no pré-teste a razão era “proibição” ou “rompimento da ligação dupla”, utilizando representação/*drivers* psicofísicos de bolas e palitos, o que naturalmente levaria uma quebra nos palitos. Já após a atividade com modelagem, essa “proibição” foi relativizada, e o estudante argumentou em termos de barreira energética, pois, de fato, ao interagir com o mecanismo externo de mediação (modelagem computacional), o estudante observou a torção na ligação no alceno e a barreira de energia, além do que ocorreu com os orbitais plotados. Isso forneceu ao estudante um novo conjunto de representações e *drivers* que mostrou uma nova forma de encarar o fenômeno que, aparentemente, possibilitou uma releitura dos conceitos químicos em torno do conceito integralizador de energia.

### C) GIRO INTRAMOLECULAR E POLARIDADE DA MOLÉCULA

Este subgrupo representa uma sequência do subgrupo anterior, por agrupar os gestos descritivos dos estudantes quando estes estavam explicando como viam as moléculas quando ocorria uma rotação intramolecular e quais as principais propriedades que mudavam quando o giro acontecia. Nessa subcategoria, começamos a identificar algumas representações e *drivers* hiperculturais, na medida em que os estudantes se depararam com certos conteúdos da simulação computacional que são específicos de modelagem molecular.

Os gestos mais representativos dessa subcategoria estão expostos na figura 25, a seguir.

**Figura 25:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar o giro intramolecular.



Os gestos apresentados na figura 25 desvendam *drivers* hiperculturais. Em 25(A), a estudante N uniu as pontas dos dedos indicadores e médios das duas mãos e tentou girar uma delas. Na sequência do movimento, chegou ao limite da rotação e fez um gesto de algo que se desprende, soltando as pontas dos dedos indicadores para representar o rompimento da ligação dupla. Esse gesto nos remeteu a uma imagem mental de torção da ligação dupla.

A estudante N, em que pese ainda imaginar a ligação como dois palitos, fez o gesto de torção típico da simulação computacional, de natureza hipercultural. Esse gesto de torção, agregado à representação da ligação química, de natureza sociocultural, nos leva a apresentar a hipótese de que um *driver* novo pode ser construído a partir da união de mais de um *driver* de distintas origens. Neste caso específico, um ou mais *drivers* de natureza social e cultural foram usados para criar um novo *driver* de torção de uma ligação dupla, pois todos os estudantes informaram nos seus pré-testes que não era possível torcionar essa ligação. Portanto, um novo *driver* hipercultural pode ter sido criado a partir da conjugação de *drivers* socioculturais.

Em 25(B), o estudante D utilizou de um *driver* hipercultural para fazer o gesto de um contorno com a mão direita, mantendo a mão esquerda fixa. O contorno que o estudante mostrou representa a nuvem eletrônica da ligação “pi” e, quando o estudante fez esse gesto, ele também fez uma referência explícita à simulação computacional, pois a pergunta feita era sobre o quanto o uso do programa de modelagem molecular pode melhorar a habilidade visuoespacial e a resposta do estudante foi a seguinte:

Eu vendo a estrutura e vendo todo aquele processo ali, de, há... uma coisa que eu me recordo aqui é que foi feito, botou a... botou a... a... a nuvem... o mapa de potencial. Que tu consegue visualizar o ponto vermelho que é mais

eletronegativo e o ponto azul que é mais eletropositivo, né? Quando teve alteração tu consegues ver toda essa dinâmica de alteração, de movimentação, por exemplo, das cargas. E isso facilita bastante em ter, criar esse conceito, que nem eu estabeleci, de polaridade, de dizer que tinham dois pontos aqui negativos e dois pontos positivos. (Estudante D)

O estudante falou de algo importante: a visão dinâmica das transformações. Vários estudos publicados nos mostram que o uso de ferramentas de modelagem molecular melhora as habilidades visuoespaciais dos estudantes (WU et al., 2001; SANGER; BADGER II, 2001). Mas nós acreditamos que a contribuição da modelagem molecular vai para além disso. Ter a possibilidade de verificar de maneira dinâmica o quanto uma reação química pode transformar produtos em reagentes, por exemplo, é algo que pode agregar muito conhecimento aos estudantes. Esperamos que, conforme o estudante vá se habituando com o manuseio do *software*, crie novas representações e *drivers*, e desenvolva não somente a habilidade visuoespacial, mas também a habilidade de visualizar de forma dinâmica as transformações que ocorrem. Essa habilidade pode abrir um universo de possibilidades para esse estudante, na medida em que ele, com isso, seja capaz de fazer relações que dificilmente faria sem o uso dessa ferramenta.

Na figura 25(C), temos o estudante novato fazendo um gesto típico de modelagem molecular: um giro intramolecular em que a mão esquerda espalmada é fixa – representando uma parte da molécula – e o dedo indicador da mão direita faz pequenos giros circulares – representando outra parte da molécula. É importante ressaltar que esse estudante novato não possuía conhecimento de moléculas orgânicas e suas propriedades, pois estava no primeiro semestre da graduação quando fez o curso. Esse estudante, ao final do curso, já havia se apropriado de vários conceitos da Química Orgânica e da modelagem molecular, melhorando suas habilidades de visualização a partir de *drivers* hiperculturais que foram construídos diretamente por mediação com o objeto externo de processamento de informações. Essa melhora nas habilidades visuoespaciais foi reconhecida pelo estudante novato



no momento em que ele produziu o gesto emoldurado em 25(C) em resposta à pergunta sobre análise conformacional<sup>14</sup>:

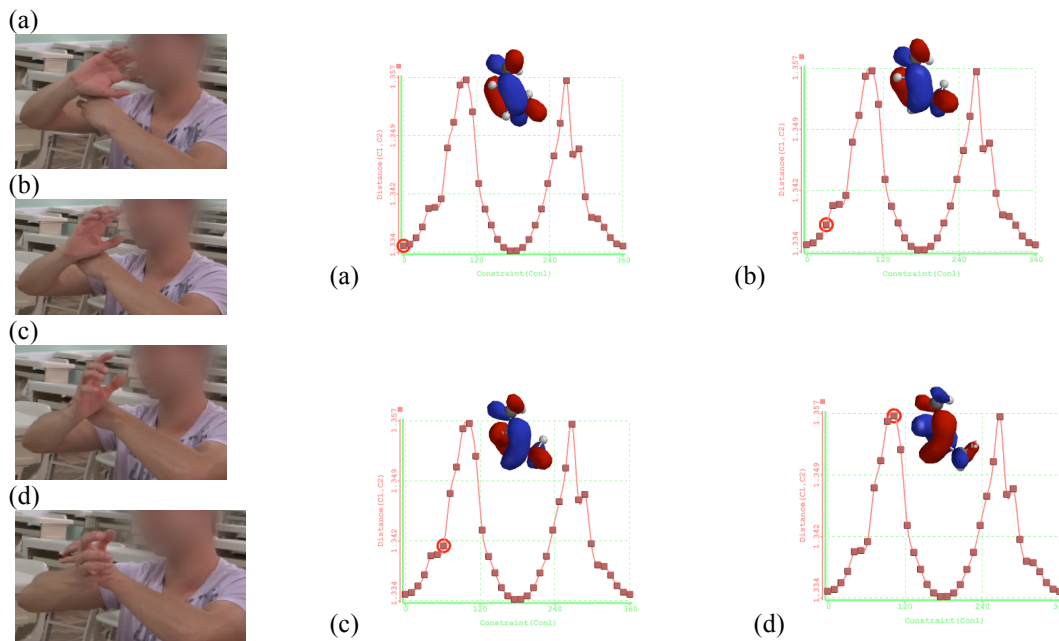
Sim, tu tens como imaginar girando, eu consigo focar na cabeça o desenho da molécula girando. (...) A primeira visão é a molécula. Se for parar para pensar nela girando, agora no momento de falar em gráfico, agora eu consigo imaginar ela dentro do gráfico girando junto com o gráfico. No caso, ela dentro do gráfico girando e o gráfico subindo e descendo. Mas a primeira visão é a molécula. (Estudante novato)

Na figura 25(D) o estudante P realizou, com ambas as mãos e braços, um gesto de torção de uma ligação dupla do *cis*-2-buteno em que representou a torção dos orbitais “ $\pi$ ”, conforme visto na simulação de modelagem molecular. Esse gesto produzido é típico de modelagem molecular, de natureza hipercultural, e está vinculado à imagem mental de torção dos orbitais HOMO da ligação “ $\pi$ ”, construída pelo estudante a partir da aquisição de novos *drivers* propiciada pela mediação com o mecanismo externo de processamento de informações – a simulação computacional. A simulação computacional foi realizada em duas etapas: a primeira mostrou a representação da molécula na forma de bolas e palitos rotacionando em sincronia com o gráfico de energia *versus* ângulo de torção da ligação dupla; a segunda, agregou a representação dos orbitais HOMO da molécula, mostrando a torção destes orbitais.

O estudante, enquanto fez o gesto, explicou que enxergava a nuvem eletrônica da ligação e, quando a molécula iniciava a torção, ele enxergava a nuvem eletrônica também se retorcendo “*o máximo possível entre uma e outra*”. O estudante explicou que via os orbitais em paralelo e “*parece que, de tanto torcer, ela se arrebenta, e depois ela volta ao normal*”. Podemos ver, na figura 26, o detalhamento do gesto produzido pelo estudante. Nas imagens vemos uma sequência de gestos produzidas pelo estudante P enquanto a explicação é dada, seguida de imagens da simulação computacional, que mostra a molécula com a representação dos orbitais HOMO e o gráfico de energia *versus* ângulo de torção da ligação dupla.

<sup>14</sup> O estudante novato faz referência explícita à uma simulação computacional realizada no curso, em que a ligação C2-C3 de uma molécula de butano é rotacionada e, junto à molécula, existe o gráfico de energia *versus* rotação da ligação. A descrição do novato é rica em detalhes e representa o que foi feito na simulação, com a molécula posicionada na área de plotagem do gráfico. Tanto a molécula quanto o gráfico são modificados na rotação.

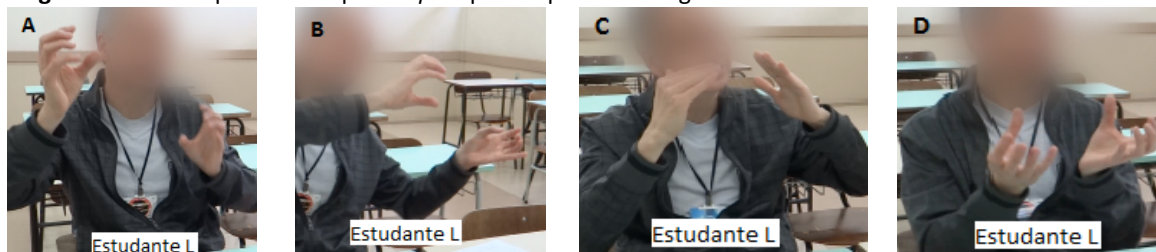
**Figura 26:** Estudante P descrevendo em gestos a representação de uma torção dos orbitais “pi” da ligação dupla de uma molécula, na coluna da esquerda, e a respectiva simulação computacional, na coluna da direita.



Ao final da descrição, o estudante também informou que essa representação específica foi adquirida com o manuseio do *software*. Portanto, aqui também há a criação de novos *drivers* hiperculturais a partir basicamente da mediação por computador.

Nesta categoria, o *expert* também produziu vários gestos. Muitos deles se não são iguais, são muito parecidos aos produzidos pelos demais estudantes, o que nos mostra que houve internalização do conteúdo das simulações e a criação de novos *drivers* de natureza hipercultural. Os gestos mais representativos estão dispostos na figura 27, a seguir.

**Figura 27:** Gestos produzidos pelo *expert* para representar o giro intramolecular.



As imagens contidas em 27(A) e 27(B) fazem parte de um mesmo contexto. O *expert* fez uma explicação de como via as moléculas quando estava diante da tarefa de explicar o comportamento da molécula numa análise conformacional. Na sua

explicação, ele nos informou que a representação de letras é usada quando a imagem mental é estática. No entanto, quando a imagem mental é dinâmica, é mais fácil representar a molécula com bolas e palitos, conforme ele mesmo explicou:

Vamos dizer assim ó, quando congela é mais fácil ver em letras. Quando está em movimento, parece que tu jogas bolas e aí fica mais fácil. Porque ah, cloro aqui, cloro embaixo, cloro em cima. Ah, mas aí tem a conformação, mas na conformação eles estão livres daí não interessa mais, bolinhas centrais, bolinhas girando. Todas elas girando, girando no espaço, girando e girando no espaço. Então, não interessa mais carbonos e cloros o que interessa é o movimento constante, que pode ser diminuído se eu tiver uma redução de temperatura ou algo que diminua a energia necessária para que ele faça o movimento. Agora ele aumentou e assim vai. (*Expert*).

Essa diversidade no uso de representações conforme o nível de complexidade da tarefa foi mencionada pelo *expert* em mais de um momento da entrevista e é interessante perceber que o *expert* usava *drivers* culturais para imagens estáticas e *drivers* que podem ser de natureza hipercultural para representar moléculas em movimento. Essa habilidade de usar múltiplas representações já foi identificada pelos autores da TMC como uma habilidade metacognitiva de gerenciar conceitos e esquemas de modo a fazer o uso otimizado destes no processo de resolução de problemas.

Ao longo da fala acima, o *expert* gesticulou a todo o momento, colocando ambas as mãos em forma de concha e de frente uma pra outra. As suas mãos ficaram o tempo todo fazendo movimentos circulares alternados, representando o giro intramolecular. Além de movimentar concomitantemente as mãos em giros alternados, também movimentou todo o conjunto em translações horizontais e verticais com mudança constante no eixo de translação, mostrando domínio de todas as possibilidades que a molécula teria para girar. Para realizar esse conjunto de gestos, o *expert* precisou ter vários *drivers*, tais como: montagem e visualização de moléculas em 3D; giro intramolecular; giro da molécula como um todo, com movimentos de translação e rotação, dentre outros.

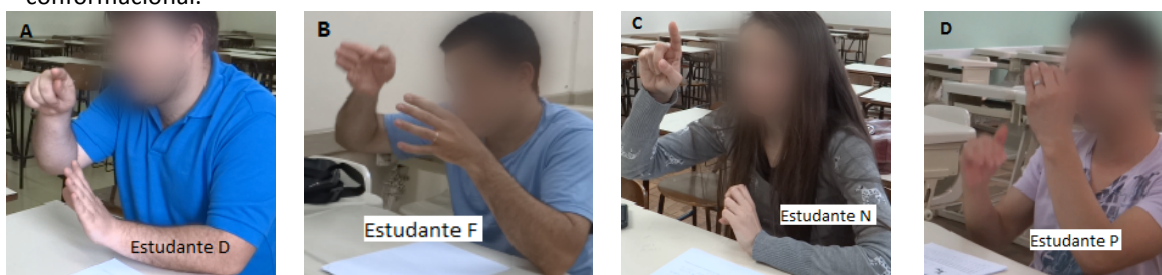
Em 27(C) e 27(D), o *expert* fez gestos mostrando as mudanças que ocorrem na polaridade da molécula conforme ela vai mudando sua conformação no espaço. Especificamente em 27(D), o *expert* realizou o gesto de contorno circular para mostrar o mapa de potencial eletrostático de uma molécula. Nesse momento, ele

afirmou que “em vez de tu pensares num núcleo, tu pensas num volume ocupado pelos elétrons, pelo espaço eletrônico”. Neste ponto da entrevista, o *expert* reconheceu as contribuições do uso do *software* de modelagem molecular para a sua melhora no processo de representação da distribuição eletrônica das moléculas, visto que sua experiência profissional foi com moléculas em sua maioria apolares, cujo foco na polaridade e distribuição de cargas não existia.

#### D) REPRESENTAÇÃO DE GRÁFICO

Esta subcategoria mostra os gestos produzidos pelos estudantes para representar os gráficos de energia quando esses estudantes estavam respondendo às questões específicas de análise conformacional. Aqui também identificamos gestos universais, como usar o dedo indicador para representar o comportamento da curva do gráfico. A figura 28, a seguir, apresenta os gestos mais representativos dessa subcategoria. Em 28(A), o estudante D fez o gesto de contorno de um gráfico com o dedo indicador da mão direita enquanto a mão esquerda representou a molécula. Em 28(B), o estudante F mostrou com a mão direita o movimento de subida e descida do gráfico enquanto a mão esquerda representou a molécula; em 28(C), a estudante N fez o gesto de subida exponencial com o dedo indicador; em 28(D), o estudante P fez o gesto de subida e descida intercalada com as duas mãos, como se fossem barras.

**Figura 28:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar gráficos de energia em análise conformacional.



Com relação ao *expert*, todos os gestos por ele produzidos nessa etapa da entrevista foram realizados conforme o gesto universal de indicar o comportamento da curva com o dedo indicador. Por esse motivo, optamos por não apresentar imagens desses gestos neste momento. No entanto, o nível de detalhamento desse comportamento foi bem maior do que o dos demais estudantes. O *expert* demonstrou nos gestos ter uma boa compreensão do comportamento da energia que envolve a

rotação intramolecular, pois ele mostrou claramente com o dedo indicador as variações de energia para diferentes casos.

### *7.1.2 3 Análise da Categoria Geometria Molecular*

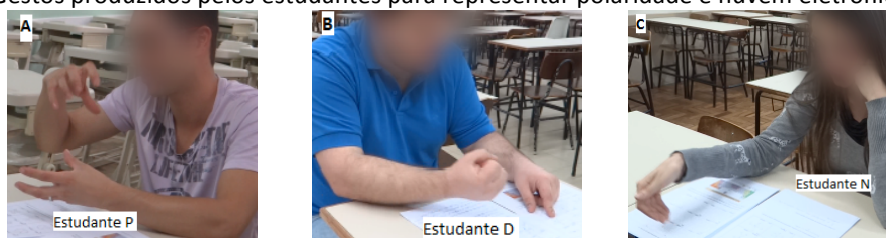
Nesta categoria, procuramos aferir quais os passos que são dados pelos estudantes quando a tarefa foi a de montar moléculas e até que ponto esses estudantes conseguiram visualizar em 3D não somente a molécula, mas também a distribuição de cargas que por ventura existia. Para essa categoria, foram criadas quatro subcategorias: átomos; molécula como um todo; ligações e polaridade e nuvem eletrônica.

As subcategorias átomos, ligações e molécula como um todo tiveram produção de gestos iguais aos produzidos anteriormente quando a tarefa era descrever posição de átomos, moléculas e presença de ligações químicas. Por esse motivo, não vamos apresentar aqui os gestos destas subcategorias, pois a apresentação que já fizemos anteriormente contempla todo o seu conteúdo. Nesse sentido, vamos apresentar somente a subcategoria polaridade e nuvem eletrônica.

#### A) POLARIDADE E NUVEM ELETRÔNICA

Na subcategoria polaridade e nuvem eletrônica, os estudantes produziram gestos para representar o seu nível de conhecimento em relação à presença de polarizabilidade nas moléculas estudadas, o que lhes confere a presença de um momento de dipolo e, por consequência, uma polaridade. Em questões presentes tanto no pré-teste quanto no pós-teste, os conhecimentos dos estudantes acerca de polaridade de moléculas foram testados e, de maneira geral, os estudantes acertaram a presença ou ausência de polaridade nas moléculas em relação à geometria escolhida. No entanto, algumas geometrias foram montadas de forma equivocada. A seguir, na figura 29, apontamos os gestos mais representativos dessa subcategoria.

**Figura 29:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar polaridade e nuvem eletrônica.



Em 29(A), o estudante P mostrou a polarizabilidade da nuvem eletrônica da ligação entre os átomos de nitrogênio e hidrogênio na molécula de amônia. Dois fatos aqui são relevantes: o primeiro é que o estudante afirmou que, na hora de montar a molécula, ele não enxergava os elétrons deslocados mais para o nitrogênio, apesar de saber que isso ocorre por conta da sua maior eletronegatividade em relação ao hidrogênio; o segundo fato é a resposta que o estudante produziu quando perguntado se ele tivesse que pensar a respeito desse fenômeno:

Como é que eu posso comparar? Eu acho que começava por numa cor. Sabe, foi uma convenção bem nada a ver. Sabe aqueles abajures, que tem um tipo de um ninho dentro que tem um óleo lá dentro? Se tu ver, conforme o óleo vai subindo, daí ele fica uma bolinha e fica uma pontinha assim, né? Pra mim, eu imagino como se fosse aquilo ali, né? A parte gorda que está subindo seria mais eletronegativo, a que está puxando, e a parte fininha embaixo seria uma parte positiva. (Estudante P).

Nessa fala, o estudante comparou a polarizabilidade da nuvem eletrônica da ligação N-H com a forma que é produzida num abajur de lava. Há uma clara comparação de algo que foi internalizado na estrutura cognitiva do estudante por intermédio de um *driver* que pode ser psicofísico ou cultural – o abajur de lava – com o novo conhecimento que foi adquirido a partir do uso do *software* de modelagem molecular – o mapa de potencial da molécula da amônia.

Em 29(B), o estudante D fez um gesto com a mão direita fechada, como se estivesse segurando e puxando algo para si. Com esse gesto, o estudante demonstrou para que lado da ligação química os elétrons estavam deslocalizados. Esse estudante, quando perguntado como montaria a molécula de cloreto de metila, explicou:

Primeiro veio o cloreto e a metila, a metila de um modo geral, como se fossem dois pontos. Agora tu falando em geometria é diferente. Aí eu vou centralizar o carbono como se fosse o meu núcleo, o meu centro das atenções, e aí os demais. Vai ser um tetraedro, no caso. Uma maneira de visualizar melhor, eu

colocaria o cloro assim e as três bases de hidrogênio. Então ficaria... daí eu estou visualizando já com bolinhas, porque foi como eu te falei, no 3D eu começo a visualizar com bolinhas. Porque daí eu tenho o carbono, ponho as três bolas de base, o hidrogênio. E eu tenho aqui a ligação com palito. (Estudante D).

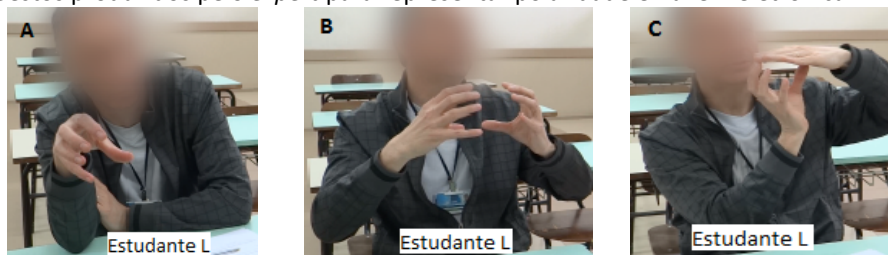
O mesmo estudante declarou que, conforme a situação, ele enxergava letras ou bolas. Quando a tarefa era montar a molécula de amônia, ele afirmou que o processo era o mesmo, ou seja, *“é a mesma situação do cloreto de metila, a mesma situação. Em vez do cloreto é o par”*. O estudante imaginava o par de elétrons do nitrogênio primeiramente como dois pontos, uma representação provavelmente sociocultural: *“mudou no intuito de eu conseguir enxergar essa parte da nuvem ali, né? De ver onde é... mas em si, o básico primeiramente eu vou enxergar assim, eu vou enxergar os dois pontinhos, os hidrogênios e as posições”*.

Então, mesmo sabendo que existe uma nuvem eletrônica ocupando um espaço no nitrogênio, ele enxergava primeiramente um par de pontos. Se essa representação é suficiente para a tarefa posta, ela permanece. Caso contrário, o estudante lança mão de outros *drivers*. No caso, os *drivers* hiperculturais adquiridos no processo de mediação hipercultural com a simulação computacional.

Em 29(C), a estudante N também demonstrou a deslocalização dos elétrons, mas com um gesto um pouco diferente do anterior. Pelo gesto, a estudante levou a mão da direita para a esquerda, com os dedos todos juntos, mostrando na folha o sentido de deslocamento dos elétrons.

O *expert* apresentou um conjunto robusto de gestos para explicar como montava as moléculas e de que forma enxergava a distribuição de cargas de cada molécula. Na figura 30, a seguir, mostramos os gestos mais representativos dessa subcategoria:

**Figura 30:** Gestos produzidos pelo *expert* para representar polaridade e nuvem eletrônica.



Em 30(A), o *expert* fez o gesto de colocar a mão direita mais para o lado direito para representar a deslocalização dos elétrons, afirmando: *“olha, aí nesse caso eu vejo bem parecido como o que a gente viu no curso. Aí eu me identificava quando tu fazias uma distribuição, por exemplo, onde ficava mais azul ou mais vermelho”*. Em 30(B), o *expert* mostrou com ambas as mãos a distribuição homogênea de cargas na molécula do CO<sub>2</sub>, afirmando que a molécula *“vai estar balanceada pela presença de dois átomos mais eletronegativos em cada extremidade”*.

Em 30(C), o *expert* mostrou a consequência de um par isolado na parte superior de uma molécula: *“se eu tivesse um par isolado e ele tivesse que tensionar pela presença desse par, eu já não teria mais essa linearidade. Daí eu já teria como se fosse um plano imaginado, que na parte inferior teria uma concentração de elétrons”*. O interessante neste ponto da entrevista é que o *expert* afirmou que, antes do curso, não tinha a representação colorida da deslocalização da nuvem eletrônica: *“eu enxergo cores até em função do curso, (...) isso veio do software porque eu nem pensava assim antes, era monocromático”*.

#### 7.1.2.4. Análise da Categoria Reações Químicas

Na categoria Reações Químicas procuramos identificar se os estudantes tinham a noção do mecanismo das reações que fizemos em simulação computacional ao longo do curso, tais como: substituição nucleofílica de segunda ordem (S<sub>N</sub>2) e reações de Diels-Alder. Nesta categoria, foram criadas as seguintes subcategorias: átomos; molécula como um todo; barreira HOMO-LUMO; ligações; polaridade e distribuição eletrostática.



Optamos por não apresentar as subcategorias ligações e polaridade e distribuição eletrostática neste momento por avaliarmos que os gestos produzidos aqui são muito parecidos com os gestos produzidos em subcategorias similares quando os estudantes produziram gestos para falar desses mesmos temas. Então, para não nos tornarmos repetitivos, optamos somente por apresentar as subcategorias átomos, molécula como um todo e barreira HOMO-LUMO.

#### A) ÁTOMOS

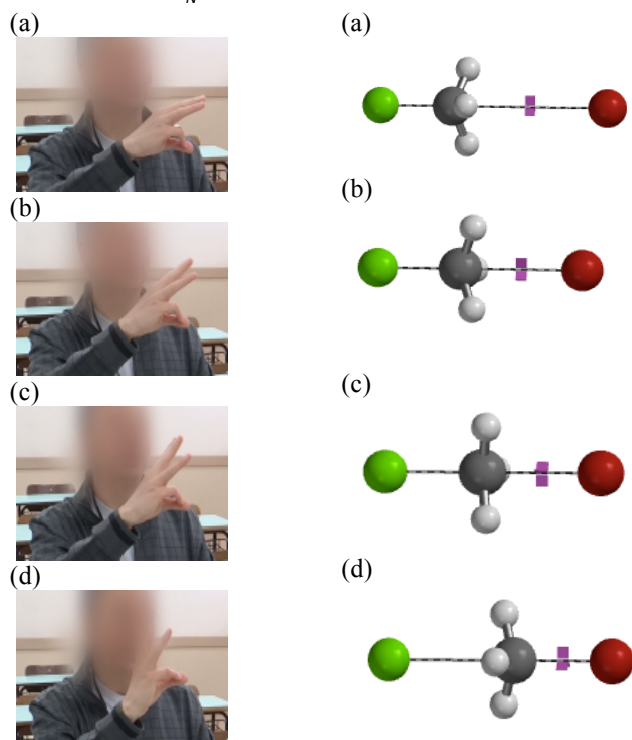
Aqui, identificamos apenas o gesto universal de mão em forma de concha, que foi executado por todos os estudantes para representar átomos, ou um pequeno giro circular no ar com a ponta do dedo indicador para mostrar a posição dos átomos. No entanto, estamos apresentando esta subcategoria neste momento por conta de uma sequência de gestos produzida pelo *expert* para descrever a posição dos átomos de hidrogênio nas reações de  $S_N2$ . Destes gestos, identificamos como mais interessantes uma sequência feita pelo *expert* para descrever a inversão de configuração dos átomos de hidrogênio, no mecanismo da reação de  $S_N2$ .

Quando perguntado qual foi a primeira coisa que veio à cabeça quando teve de responder, no pós-teste, a questão sobre o mecanismo dessa reação, o *expert* falou; “*a primeira coisa que veio na minha cabeça foi de tentar fazer o mais fiel possível pela nossa representação de sala de aula*”. Ele segue a resposta, explicando tudo que apareceu na sua imagem mental:

Eu vi letras e palitos. O bromo se aproximando. Os hidrogênios fazendo aquela configuração que ficaria equatorial. O bromo se aproximando, fazendo aquela interação. O cloro se desligando e os hidrogênios passando para outra posição, inversa à que estavam no início e formando o íon cloreto e o brometo de metila. (*Expert*).

No momento em que o *expert* estava descrevendo a imagem mental que construiu para responder a questão do pós-teste, ele executou uma sequência de gestos como na figura 31, a seguir.

**Figura 31:** Gestos produzidos pelo *expert* para representar a movimentação dos átomos no mecanismo de reação de substituição nucleofílica –  $S_N2$ .



Na sequência acima, o *expert* mostrou em gestos alguns dos *drivers* hiperculturais que construiu a partir da mediação por computador, e que permaneceram mesmo sem a mediação. A simulação computacional da reação de  $S_N2$  mostrou, de forma dinâmica e reversível, a reação entre o íon brometo e o cloreto de metila, passando pela formação de um intermediário (estado de transição), com inversão de configuração dos hidrogênios. O *expert* descreveu com riqueza de detalhes, em sua fala acima, toda a sequência produzida pelo *software*, assim como descreveu com gestos aquilo que visualizou ao longo da simulação: a aproximação do íon brometo; a formação do estado de transição (demarca uma linha pontilhada com gesto); a movimentação dos átomos de hidrogênio, desde o início da inversão, até o final, passando pela posição equatorial; a saída do íon cloreto.

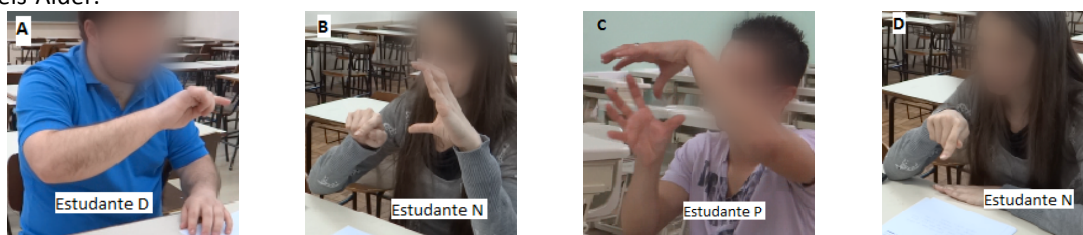
Algumas dessas representações são de natureza cultural, como o próprio *expert* afirmou: “*isso aí vem de livros, eu estou acostumado a enxergar em livros*”. No entanto, temos representações hiperculturais presentes, como as diferentes cores dos constituintes da reação, algo que o *expert* não tinha antes, pois sua representação era monocromática. Nessa imagem mental especificamente, o *expert* afirmou ver a letra dos átomos com cores azuis para eletropositivos e cores vermelhas para eletronegativos, assim como as regiões de uma molécula e essa representação de

cores ele mesmo já dissera não possuir. Então, como o *expert* já tinha representações e *drivers* para átomos, ligações e molécula como um todo, a informação oferecida pelo *software* de modelagem molecular através da mediação por computador propiciou que fossem criados novos *drivers*. Esses *drivers* permitiram: 1) que o *expert* pudesse agregar cores às letras que antes eram monocromáticas, pois a simulação também mostrou o mapa de potencial eletrostático junto com a movimentação das espécies; e 2) que fosse também agregada a parte dinâmica da transformação química, em especial a inversão de configuração dos átomos de hidrogênio. Essas novas representações e *drivers* permaneceram na estrutura cognitiva do estudante, visto que ele as utilizou para explicar, por meio da metodologia de *report aloud*, o seu processo de raciocínio no momento em que estava resolvendo o problema.

## B) MOLÉCULA COMO UM TODO

Nesta subcategoria, somente foram produzidos gestos pelos outros estudantes, pois o *expert* não produziu gestos quando falou de molécula como um todo. Os gestos mais representativos dessa subcategoria estão elencados na figura 32, a seguir.

**Figura 32:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar a molécula como um todo na reação de Diels-Alder.



Em 32(A), o estudante D fez um gesto em ziguezague com o dedo indicador para mostrar a forma de uma molécula de butadieno, na reação de Diels-Alder, que produz um composto cíclico a partir de um dieno (hidrocarboneto com quatro carbonos e com duas ligações duplas conjugadas) e um dienófilo (a acrilonitrila). O estudante explicou:

Eu estou vendo a molécula, vamos dizer, em termos de... representada assim, em ziguezague, que eu me lembro que daí, ao abrir uma ligação pi, a outra, como ela está conjugada, ela tende a acompanhar. Ela tende a acompanhar, né. Então ela está ligada aqui, ela vai se ligar ao carbono mais próximo daquela ligação que acabou saindo. (Estudante D).

Ao explicar o mecanismo de rearranjo, o estudante D também fez o mesmo gesto feito pela estudante N em 32(D), de mostrar um semicírculo com o dedo indicador para representar o rearranjo de posicionamento das ligações duplas durante a reação. Esse movimento de cargas faz parte do mecanismo das reações de Diels-Alder, foi explicado na lousa pouco antes de rodarmos a simulação e também foi visto na simulação. A forma que usamos para representar esse movimento de cargas realizado no rearranjo é o de uma flecha curva em semicírculo que inicia junto à ligação de origem do movimento e termina na ligação de destino. Por esse motivo, os *drivers* envolvidos nesse processo podem ter sido criados tanto por interação de natureza sociocultural quanto por interação hipercultural, ou mesmo por uma mescla de ambas.

Em 32(B), a estudante N colocou a mão esquerda em forma de um “C” para representar um dos reagentes da reação de Diels-Alder (o dieno: butadieno) e, com o dedo indicador da mão direita, mostrou o outro reagente (o dienófilo: acrilonitrila) já na posição mais favorável à reação, voltado para o dieno. Da mesma forma que a situação anterior, podemos inferir que os *drivers* envolvidos para criar essa imagem mental podem ser tanto de natureza sociocultural quanto hipercultural, ou mesmo uma mescla de ambas.

Em 32(C), o estudante P demonstrou com ambas as mãos como imaginava a molécula de cloreto de metila e o giro mental que necessitou dar na molécula para que a reação de  $S_N2$  ocorresse mentalmente. De modo geral, quando imaginamos uma molécula com um carbono, como o cloreto de metila, logo imaginamos o tetraedro em pé, com um vértice voltado para cima e três vértices voltados para baixo, pois é assim que, via de regra, vemos nos livros de química (SOLOMONS, 1996), com o átomo de cloro ligado ao carbono em sentido horizontal. Para que a imagem mental fique igual à disposição do *software*, precisamos realizar um giro de  $90^\circ$  na molécula de cloreto de metila. Esse é um bom indício de que os *drivers* criados para organizar a imagem mental e compreender o mecanismo das reações  $S_N2$  foram de natureza hipercultural, pois, caso contrário, o estudante poderia criar uma imagem mental do cloreto de metila “em pé”, com o cloro na parte de cima e o íon brometo se aproximando pela parte de baixo, ao invés do cloro num dos lados e o brometo se aproximando lateralmente, como mostrava no *software*. Em 32(D), temos novamente a estudante N

fazendo um gesto que remete às representações do movimento de rearranjo das ligações duplas nas reações de Diels-Alder, promovendo pequenos semicírculos com o dedo indicador. A estudante explicou quais imagens mentais conseguiu enxergar:

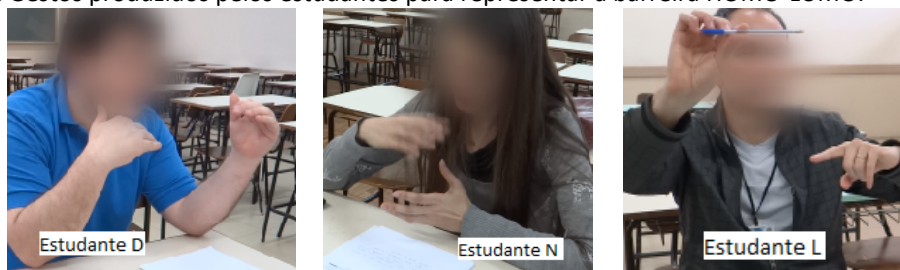
Eu enxergo as duplas ligações mudando de lugar, as duas duplas ligações mudando de lugar pra melhor se arranjar para a entrada do outro composto. Se adequando para entrar o outro composto. (Estudante N).

A estudante afirmou que via os dois reagentes, um de cada vez, já posicionados para ocorrer a reação e que, na medida em que um se aproximava do outro, o rearranjo iniciava para acomodar a molécula que estavam entrando.

## B) BARREIRA HOMO-LUMO

Uma das simulações de modelagem molecular que fizemos durante o curso foi o estudo da influência da barreira HOMO-LUMO nas reações de Diels-Alder. A barreira HOMO-LUMO representa a diferença energética que existe entre estes dois orbitais moleculares de fronteira. Nos orbitais HOMO estão os elétrons da ligação e os orbitais LUMO são os orbitais vazios de mais baixa energia. Para que o rearranjo eletrônico possa ocorrer, os elétrons precisam vencer a barreira de energia entre os orbitais HOMO em que se encontram e os orbitais LUMO vazios. Então, quanto menor for esta barreira, mais favorável será energeticamente para a reação ocorrer. Para esta subcategoria, os estudantes foram perguntados sobre esses significados e os gestos produzidos estão dispostos na figura 33, a seguir.

**Figura 33:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar a barreira HOMO-LUMO.



Podemos perceber que foram poucos os gestos produzidos e com pouca variedade. Além do *expert*, somente os estudantes D e N produziram gestos de barreira de energia. O estudante D produziu um gesto com as mãos em patamares diferentes e os dedos todos juntos para representar a barreira, mas teve dificuldades

em lembrar qual orbital representava o HOMO e qual representava o LUMO. Ele afirmou que *“quanto menor a distância, mais fácil de efetuar a ligação. Quanto tu tens uma distância muito distante tu tens uma dificuldade, um nível energético maior para conseguir que essa reação seja efetuada”*.

A dificuldade de identificar e conceituar os orbitais HOMO e LUMO também foi sentida pela estudante N, que produziu um gesto em que mostrava a barreira fixando a mão esquerda e movendo rapidamente a mão direita para cima. Ela logo explicou que fazia tempo que tinha estudado a parte de Química Orgânica e não lembrava do conteúdo. No entanto, a estudante respondeu corretamente a questão do pós-teste: *“quanto mais próximo estão os orbitais HOMO e LUMO, mas fácil será para o elétron mudar de orbital e menos energia será necessária, e mais rápida será a reação”*. Mas foi na entrevista que a estudante declarou que *“não tinha essa noção e que precisava de mais energia ou não. Eu sei que ele saltava de um orbital para o outro”*. Os drivers envolvidos nessa subcategoria foram construídos a partir da mediação em sala de aula e, portanto, são de natureza sociocultural, visto que a simulação computacional não mostrou essa barreira.

#### *7.1.2.5. Análise da Categoria Modelagem Molecular*

Nessa categoria, os estudantes foram questionados basicamente sobre o que a modelagem molecular representa, assim como o que mudou em cada um depois da realização do curso. Para esta categoria, os estudantes realizaram gestos quando estavam falando de átomos; molécula como um todo; rotação intramolecular; movimentação de elétrons/nuvem e ligação, formando as subcategorias.

Na categoria átomos, identificamos os dois gestos universais já apresentados anteriormente: uma mão em forma de concha ou ambas de frente uma para a outra, também em forma de concha. Da mesma forma, na subcategoria ligação tivemos apenas um gesto, já descrito em subcategorias similares. Portanto, para não nos tornarmos repetitivos, optamos por apresentar somente as subcategorias molécula como um todo, rotação intramolecular e movimentação de elétrons/nuvem.

## A) ROTAÇÃO INTRAMOLECULAR E DA MOLÉCULA COMO UM TODO

Quando os estudantes produziram gestos para falar de rotação intramolecular e da molécula como um todo, estavam falando da contribuição da modelagem em relação a alguns aspectos importantes: a melhora nas habilidades visuoespaciais; a visão dinâmica das reações químicas e a possibilidade de integração de conceitos. A figura 34 mostra alguns dos gestos mais representativos.

**Figura 34:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar o giro intramolecular e da molécula como um todo.



Em 34(A), o estudante novato fixou a mão esquerda espalmada e, com a mão direita em forma de concha, fez uma rotação intramolecular. Quando fez este gesto, o estudante estava se referindo à facilidade com que o *software* permite a visualização das moléculas em 3D:

Eu tinha noção só do desenho ali, que era limitado. E no plano ali, tem algumas geometrias que tu não consegues nem identificar porque ela fica de um jeito estranho que tu não consegues ver ela direito. (...) é, fica aquele desenho que tu não... tetragonal ali, que olha e tu não consegues decifrar como é que está o desenho. Agora, se tu botares ela no computador, tu vais girando e consegues ver ela certinho o ângulo de  $120^\circ$ ,  $90^\circ$ , vai mais fácil. (Estudante novato).

Esse é um dos primeiros benefícios do uso de *software* de modelagem molecular: a melhora nas habilidades visuoespaciais. Mas não é somente isso, pois os *software* de visualização também proporcionam essa possibilidade. O diferencial dos *software* de modelagem molecular são as ferramentas internas de cálculos que possuem e que nos levam a um universo bastante amplo. Em 34(B), a estudante N nos mostrou um ponto de vista mais amplo da questão da visualização. A estudante fixou a mão esquerda e girou a mão direita, formando o contorno de uma molécula. Ao fazer o gesto em 34(B), ela explicou que a modelagem proporciona “*ver mais dinâmico as reações químicas, não tão só estático, não tão só as letras e pauzinhos, tu vês em modo 3D as coisas acontecendo*”. A estudante ressaltou que hoje ela consegue

perceber de outra forma as reações químicas como sendo algo “*mais energético*”, algo em que se pode “*ver a energia acontecer, ali na reação*”.

Em 34(C), o estudante P fez um gesto de uma rotação intramolecular em que a mão esquerda ficou fixa e a direita fez a rotação, com paradas específicas. Ele explicou:

O antes eu só tinha ideia de... daquela coisa simples, da bolinha aqui e do átomo, mas eu não conseguia ver eles se ligando. Após o curso eu consegui ver o comportamento dele; qual o campo que fica em volta de um e do outro; por onde ele pode se ligar. Consegui ver o comportamento das moléculas durante uma ligação, entre uma e outra, como elas se comportam no espaço. No espaço não, porque elas não estão soltas por aí... e antes eu não conseguia ver o básico, não conseguia ver elas... como é que eu vou te explicar? Uma molécula durante a rotação dela eu imaginava uma deformação na nuvem eletrônica. Mas eu não conseguia imaginar que a cada ponto dela teria uma energia diferenciando os pontos da nuvem. E agora eu sei que, dependendo da posição que está uma molécula durante uma reação eu sei que ela vai ter energias diferentes. (Estudante P).

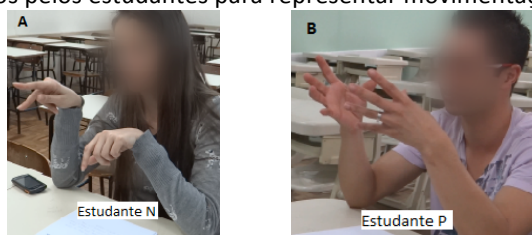
Nessa fala, o estudante P mostrou indícios do desenvolvimento de uma visão mais dinâmica das transformações. O estudante afirmou que conseguia visualizar internamente uma rotação intramolecular 3D e que esta imagem não existia antes do curso. Trata-se de uma capacidade de rotacionar mentalmente partes da molécula, adquirida sob a forma de representação e *driver*, com o uso do *software*. Ao longo do curso, realizamos várias simulações de rotações intramoleculares. Essas simulações mostraram, de forma dinâmica, o comportamento da energia da molécula quando parte dela sofreu uma rotação enquanto a outra ficava imóvel. Podemos identificar melhoras no aspecto de perceber que as transformações químicas ocorrem de forma dinâmica e que a energia envolvida nesses processos é um elemento fundamental.

## B) MOVIMENTAÇÃO DE ELÉTRONS/NUVEM

No contexto de falar sobre modelagem molecular e sobre o que mudou com a realização do curso, os estudantes gesticularam para mostrar um pouco mais dessa tendência de ter uma visão mais dinâmica das transformações, em especial da movimentação de elétrons e da “deformação” da nuvem eletrônica. Foram poucos gestos, mas podemos destacar dois da figura 35.



**Figura 35:** Gestos produzidos pelos estudantes para representar movimentação de elétrons/nuvem.



Em 35(A), a estudante N usou os dedos indicador e médio em forma de “V” para fazer o gesto de um semicírculo, representando o movimento de salto do par de elétrons. A estudante explicou que antes do curso não tinha essa visão mais dinâmica das transformações químicas e da energia envolvida. Ela afirmou: *“Porque a gente só via os elétrons pulando, né? Só conseguia ver os pares de elétrons pulando, mas agora tu já vêes que tem uma energia maior, tu consegues ver isso”*.

Em 35(B), o estudante P colocou as mãos em forma de concha de frente uma pra outra para mostrar o espaço ocupado pela nuvem eletrônica de uma molécula, afirmando que antes do curso ele não via a deformação da nuvem eletrônica, mas que agora ele já tem uma boa noção de que qualquer mudança na configuração da molécula repercute em outras propriedades.

## 7.2. DESCRIÇÃO DO SEGUNDO EXPERIMENTO DEFINITIVO

O segundo experimento foi realizado com seis estudantes do primeiro semestre do Curso Técnico em Química do IFRS – Campus Porto Alegre no formato de um curso de extensão de 12 horas/aula. Os conteúdos abordados foram os seguintes: representações 2D e 3D de moléculas, análise conformacional de alcenos e sua relação com energia, geometria molecular, polaridade de moléculas e reação de substituição nucleofílica –  $S_N2$ . Dos seis estudantes que participaram do curso, quatro saíram do ensino médio direto para o técnico, dois estavam cursando os primeiros semestres da graduação, sendo um em Química e outro em Engenharia Química.

A metodologia adotada para o segundo experimento definitivo contou com as seguintes etapas: teste individual pré-modelagem com nove questões; entrevista pré-modelagem com protocolo *Report Aloud*; simulações de modelagem molecular

abordando os temas acima elencados; teste pós-modelagem com as mesmas nove questões anteriores e entrevista pós-modelagem com protocolo *Report Aloud*. Optamos por realizar a entrevista pré-modelagem neste experimento para nos certificarmos da real necessidade de mantê-la, visto que já apontávamos talvez ser suficiente uma única entrevista no final.

Um aspecto que optamos por introduzir nesse experimento foi em relação ao material didático das simulações. Para cada simulação, o estudante recebia dois materiais distintos: um exercício e um roteiro da simulação. O exercício continha uma estrutura organizativa igual para todas as simulações. Primeiramente, o estudante tinha de resolver um problema químico apresentado, tentando predizer o resultado. Após essa etapa prévia de predição, o exercício remetia para a realização da simulação a partir do roteiro entregue. Por fim, o exercício solicitava ao estudante que comparasse suas respostas com o conteúdo da simulação e fizesse uma reflexão acerca dos motivos de seus acertos ou erros.

### 7.2.1. Organização dos Registros

Os registros do segundo experimento definitivo foram os testes escritos – pré e pós-modelagem – as transcrições das entrevistas, as imagens dos gestos descritivos produzidos e os exercícios das simulações de modelagem molecular. Todas as entrevistas foram filmadas, transcritas e os gestos produzidos em ambas as entrevistas foram identificados e categorizados. Optamos por manter a mesma forma de categorização do primeiro experimento definitivo. Sendo assim, as categorias de análise foram: representações 2D e 3D; análise conformacional; geometria molecular; reações químicas e modelagem molecular. Cabe lembrar que as categorias de análise foram escolhidas de acordo com os conteúdos abordados nas simulações e as subcategorias emergiram do tema que o estudante estava tratando no momento em que o gesto foi produzido.

De forma resumida, seguem os passos que utilizamos para organizar os registros, e que podem servir de roteiro para outras pesquisas:

- ✓ Separar os vídeos das entrevistas em pré e pós-modelagem (caso tenha sido feita somente uma entrevista pós-modelagem, essa etapa é desnecessária);
- ✓ Transcrever integral e fidedignamente todas as entrevistas, separando cada uma num arquivo com o nome do estudante e a indicação de pré ou pós (se for o caso);
- ✓ Em cada arquivo de transcrição, identificar todos os gestos descritivos e descrevê-los no próprio texto, entre parênteses, com cor de texto diferenciada e no local exato do texto onde o gesto foi feito. Colocar o tempo no qual o gesto foi produzido para facilitar sua localização;
- ✓ Após a identificação de todos os gestos, criar as categorias de análise. No caso desta pesquisa, optamos por usar as mesmas categorias que nortearam a entrevista e que serviram de base para organizar o curso (conteúdos abordados), mas outras formas de categorização podem ser utilizadas;
- ✓ Separar cada segmento de entrevista referente a cada uma das categorias em um arquivo único com o título da categoria e a referência pré ou pós (se for o caso). Cada um dos arquivos, deve conter os fragmentos das entrevistas de todos os estudantes participantes referentes à categoria;
- ✓ Para cada arquivo, analisar o contexto de cada um dos gestos, observando o assunto que o estudante estava tratando quando produziu o gesto. Esses assuntos são as subcategorias de análise. Na medida em que as subcategorias vão sendo identificadas, os gestos vão sendo agrupados dentro da subcategoria, em um arquivo em separado cujo nome pode ser “identificação dos gestos”. Sugerimos criar, dentro desse arquivo, uma tabela para cada categoria de análise, devidamente identificada. Para auxiliar o manuseio das tabelas, as seguintes informações são importantes: subcategoria de análise para cada grupo de gestos; identificação do autor de cada gesto; informação sobre o

tempo em que o gesto foi produzido e se o gesto é da entrevista pré ou pós-modelagem (se for o caso).

A tabela 2, a seguir, mostra as categorias e subcategorias que emergiram dos registros específicos desse segundo experimento definitivo.

**Tabela 2:** Categorias e subcategorias dos gestos identificados nas entrevistas do segundo experimento definitivo

Categoria de Análise	Subcategoria de Análise (objeto)
Representações 2D e 3D	Átomo Parte da Molécula Molécula inteira Ligação Simples Ligação Dupla Plano Rotação intermolecular
Análise Conformacional	Plano Ligação Dupla Ligação Simples Rotação intramolecular Rotação Intermolecular Molécula Inteira Parte da Molécula Polaridade da Molécula
Geometria Molecular	Átomo Molécula Inteira Ligações Polaridade e Nuvem Eletrônica Plano
Reações Químicas	Átomo Molécula inteira Ligações
Modelagem Molecular	Molécula inteira Rotação Intermolecular Ligação

Podemos perceber que as subcategorias criadas no segundo experimento definitivo são um pouco diferentes em relação às criadas no primeiro experimento definitivo. No entanto, identificamos no segundo experimento muitos gestos descritivos que consideramos universais no primeiro experimento, tais como: representar o átomo com uma mão em forma de concha, um plano com a mão espalmada, uma ligação química com o dedo esticado, dentre outros.

Para evitar gestos duplicados, optamos por avaliar e apresentar os gestos mais representativos de cada subcategoria, aglutinando algumas delas e buscando acrescentar o contexto no qual esse gesto foi produzido. Então, a apresentação a seguir mostra apenas os gestos descritivos que avaliamos serem os mais representativos de cada subcategoria, sem prejuízo do conjunto dos gestos produzidos. Todas as imagens que apresentadas neste capítulo foram produzidas por nós a partir dos vídeos gravados e a identidade dos estudantes foram preservadas de acordo com princípios éticos da pesquisa.

### *7.2.2. Apresentação dos Resultados*

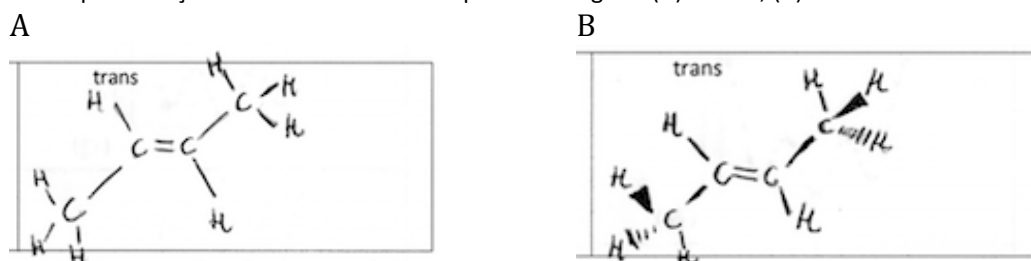
A produção de gestos descritivos no segundo experimento definitivo foi um pouco menor do que a do primeiro. Os estudantes falaram mais e gesticularam menos. Isso pode ter ocorrido em função desses estudantes possuírem pouca familiaridade com os conteúdos abordados e com a estratégia didática adotada no curso. Dos seis estudantes que fizeram o curso, quatro vieram diretamente do ensino médio para o curso técnico e todos manifestaram não ter visto boa parte dos conteúdos que abordamos durante o experimento. Diante disso, podemos imaginar que, para esses estudantes, o processo de criação de imagens mentais e modelos mentais tem o seu tempo, assim como a consolidação de novos conceitos químicos.

#### *7.2.2.1. Categoria Representações 2D e 3D*

Na categoria de representações 2D e 3D, os estudantes relataram dificuldades em imaginar as moléculas no espaço 3D. Alguns sequer lembravam ou sabiam o que era uma molécula *cis* e *trans*. Outros tinham esse conhecimento, mas demonstraram dificuldades em desenhar a molécula em 3D. A maioria que conseguiu realizar o desenho em 2D iniciou pelo foco na ligação dupla para, posteriormente, dispor os demais átomos da molécula.

Dos seis estudantes que realizaram o curso, o estudante B deixou a questão de representação 2D e 3D do teste pré-modelagem totalmente em branco, pois havia afirmado que não tinha ideia do que significavam as formas *cis* e *trans*. Já no teste pós modelagem, o estudante conseguiu representar a molécula *cis* e *trans* com a forma clássica de símbolos químicos e palitos no 2D e com a representação de ligações fora do plano<sup>15</sup> na estrutura 3D, conforme mostra a figura 36, a seguir. Aqui podemos identificar a criação de *drivers* a partir da mescla dos conhecimentos tácitos com os adquiridos. O estudante utilizou os seus conhecimentos tácitos, necessários à montagem de moléculas, e agregou conhecimentos adquiridos para criar novas representações e *drivers* a fim de resolver o problema de representação de uma molécula *cis* e *trans* num espaço 2D e 3D.

**Figura 36:** Representações estudante B no teste pós-modelagem: (A) em 2D; (B) em 3D.



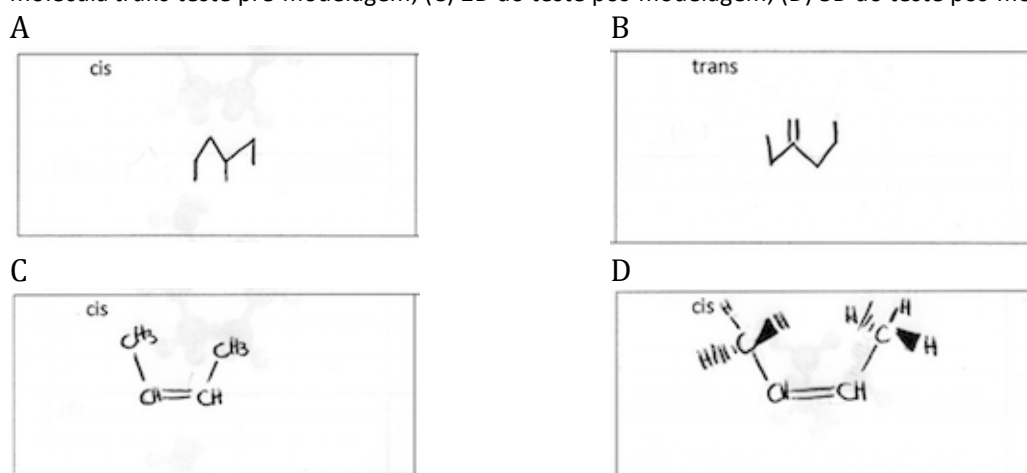
A estudante C fez o desenho 2D e 3D com uma representação clássica de símbolos e palitos no teste pré-modelagem. Mas no teste pós-modelagem desenhou as estruturas *cis* e *trans* no plano 3D com a representação de ligações fora do plano, o que caracterizou uma mudança de padrão de resposta pela aquisição de novos *drivers*, como ela mesma apontou: “no 3D, com a ajuda do programa, eu consegui visualizar ela um pouco diferente do que eu já tinha de 3D na cabeça (...) então eu imaginei as bolinhas como se fossem bolinhas de bilhar onde tinha o símbolo”. A estudante já começa a imaginar as moléculas como bolas e palitos, sendo que as representações dos átomos são como bolas de bilhar – parecidas com as representações hiperculturais do *software* – mas ela desenhou no teste pós-modelagem a estrutura clássica de símbolos químicos e palitos para poder diferenciar melhor.

<sup>15</sup> As representações de ligações fora do plano são aquelas em que uma ligação para frente de um plano é representada por uma linha grossa totalmente preenchida; uma ligação para trás do plano é representada por uma linha grossa tracejada e uma ligação sobre o plano por uma linha fina simples.

As estudantes K e Iv utilizaram representações das moléculas com traços em ziguezague. A segunda teve mais facilidade em desenhar as estruturas, tanto no 2D quanto no 3D. A única diferença de representação entre o teste pré e pós-modelagem da estudante Iv foi a utilização de letras e palitos com ligações fora do plano para o desenho 3D do teste pós-modelagem em detrimento do uso de uma representação mista – ziguezague com ligações fora do plano – no teste pré-modelagem.

A estudante K desenhou apenas a estrutura 2D *cis* e *trans* com traços em ziguezague. Teve dificuldades de transpor da forma estrutural ( $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$ ) para a forma escolhida de representação, deixando as estruturas 3D em branco. A Estudante afirmou: “*porque eu aprendi assim (...) sei lá, pelos desenhos que a gente fazia era sempre em ziguezague*” (estudante K). A mesma estudante também afirmou que não sabia muito bem o que eram as estruturas *cis* e *trans* e, por conta disso, deixou em branco o desenho da representação 3D. Essa mesma estudante mudou sua forma de representar a molécula, tanto no 2D quanto no 3D. Os desenhos realizados no teste pós-modelagem foram todos com a representação de símbolos químicos e palitos, sendo que em 3D a estudante utilizou a representação de ligações fora do plano, como mostra a figura 37 a seguir. Aqui podemos perceber a aquisição de novas representações e *drivers* advindos da interação sociocultural.

**Figura 37:** representações de moléculas da estudante K: (A) molécula *cis* teste pré-modelagem; (B) molécula *trans* teste pré-modelagem; (C) 2D do teste pós-modelagem; (D) 3D do teste pós-modelagem.

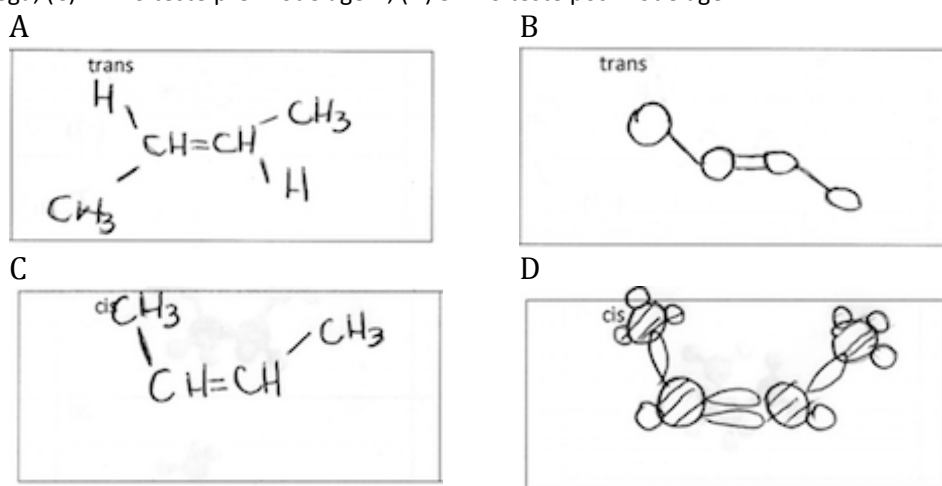


A estudante K, em 37(A) e 37(B) pensou ter desenhado as formas *cis* e *trans* da molécula no teste pré-modelagem, quando, na verdade, desenhou a mesma molécula. Já nos desenhos do teste pós-modelagem, verificamos evolução representacional na

medida em que a estudante já conseguiu desenhar as formas *cis* e *trans* e utilizou representações de ligações fora do plano para o desenho em 3D.

A estudante In também mostrou modificação na forma de representar as moléculas em relação aos testes pré e pós-modelagem. No teste pré-modelagem, a estudante optou por fazer uma representação clássica de símbolos químicos e palitos para o espaço 2D. No espaço 3D, a estudante tentou desenhar uma estrutura de bolas e palitos, mas identificou muitas dificuldades de construir a molécula: “*eu tive muita dificuldade, primeiro porque eu não aprendi em 3D e segundo porque eu não consegui pensar como é que seria o 3D*” (Estudante In). No teste pós-modelagem a estudante In reproduziu a mesma estrutura de símbolos e palitos para o espaço 2D. No entanto, a representação 3D mudou sensivelmente, como mostra a figura 38, indicando a aquisição de representações e *drivers* de natureza hipercultural.

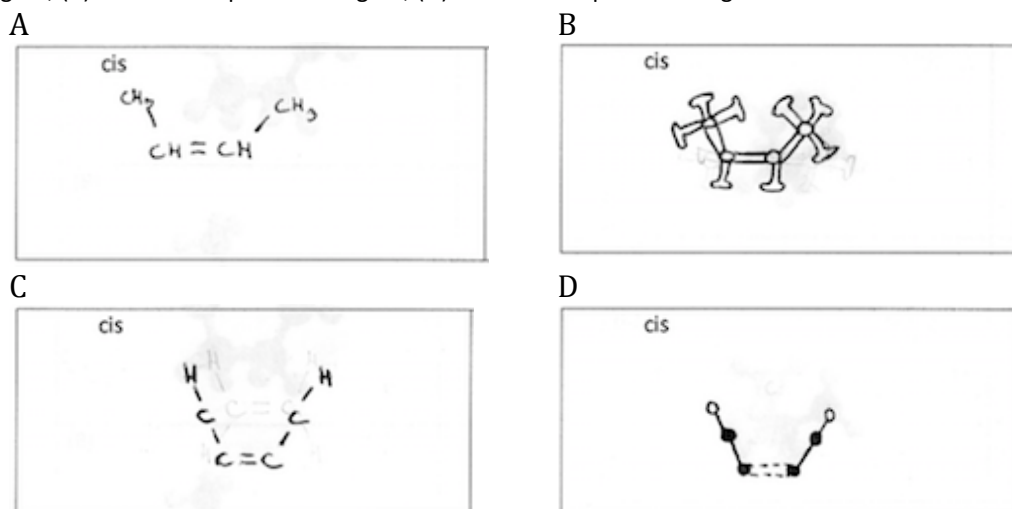
**Figura 38:** representações das moléculas da estudante In: (A) 2D no teste pré-modelagem; (B) 3D do teste pré-modelagem; (C) 2D no teste pós-modelagem; (D) 3D no teste pós-modelagem.



Sem dúvida o exemplo mais contrastante foi o da estudante P. A sua representação 2D, tanto no teste pré quanto no pós-modelagem, foram estruturas clássicas de símbolos e palitos. A mudança ocorreu na representação 3D. A figura 39, a seguir, mostra o comparativo do padrão de representação da molécula no teste pré e pós-modelagem.



**Figura 39:** desenhos da estudante P de uma molécula: (A) 2D no teste pré-modelagem; (B) 3D no teste pré-modelagem; (C) 2D no teste pós-modelagem; (D) 3D no teste pós-modelagem.



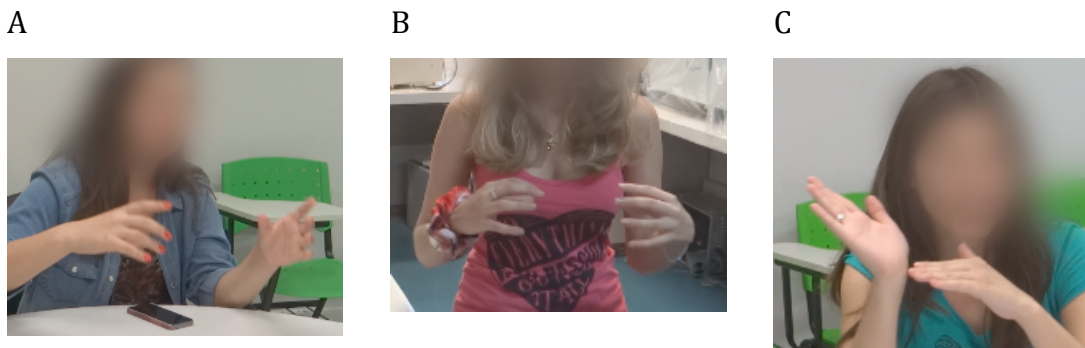
A estudante afirmou que nunca tinha desenhado nenhuma estrutura em 3D: “*eu não consegui associar muito bem, tanto que eu tive que desenhar várias vezes até algo que eu achava satisfatório, como estava na minha cabeça*” (sic) (Estudante P). A estrutura desenhada pela estudante não distinguiu as ligações simples das duplas, mostrou carbonos como bolas pequenas e os hidrogênios como estruturas parecidas com cabeças de alfinete. No teste pós-modelagem, o padrão de representação mudou pela aquisição de novas representações e *drivers* advindas da mediação hipercultural. A estudante fez um desenho de bolas e palitos, tentando, inclusive, diferenciar os carbonos dos hidrogênios, em que pese não ter representado todos os átomos da molécula, e afirmou: “*(...) deu pra ver no programa que a ligação dupla fica mais destacada, então aqui eu diferenciei das ligações simples. (...) o H não fica com as pontinhas soltas, ele fica em bolinhas*” (Estudante P).

Apresentaremos, a seguir, os principais gestos descritivos realizados pelos estudantes na categoria Representações 2D e 3D. Optamos por mostrar apenas os gestos mais significativos da categoria, não apresentando gestos em todas as subcategorias. Na subcategoria átomos, identificamos os mesmos gestos descritivos que no primeiro experimento definitivo. Por esse motivo, não vamos apresentar estes gestos novamente, pois já havíamos identificado que tais gestos são universais.

### A) MOLÉCULA INTEIRA E PARTE DA MOLÉCULA

As subcategorias molécula inteira e parte da molécula têm suas apresentações unidas e os principais gestos descritivos estão na figura 40, a seguir.

**Figura 40:** Gestos descritivos para molécula inteira e parte da molécula

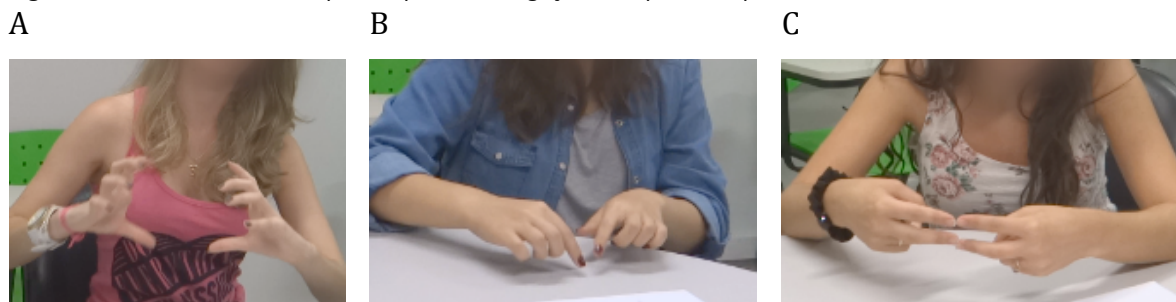


Em 40(A), a estudante C fez o gesto de mãos em formato de concha com rotações intermoleculares para representar o contorno de uma molécula. A estudante explicou que, durante uma atividade de aula em que estavam aprendendo a estrutura do hidrogenofosfato de amônio, imaginou a molécula girando e se mexendo em 3D no programa. Esse foi um claro exemplo de aquisição de novas representações e *drivers* de natureza hipercultural que permaneceram presentes na estrutura cognitiva da estudante, mesmo depois de finda a conexão do cérebro com o mecanismo externo de processamento de informações.

Em 40(B), a estudante In fez o gesto de contorno de uma molécula com ambas as mãos em forma de concha ao mesmo tempo em que afirmou que depois que começou a usar o programa, passou a ver as moléculas mais em 3D e as ligações como cilindros compridos. Da mesma forma, em 40(C), a estudante K fez o gesto de parte da molécula para explicar como resolveu o problema de desenhar a molécula em 3D no teste pós-modelagem: “*eu pensei no que a gente tinha visto no programa*”.

### C) LIGAÇÕES SIMPLES E DUPLAS

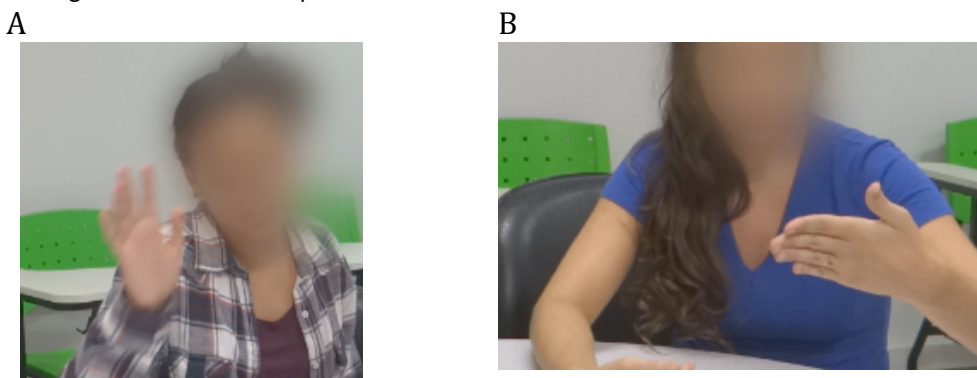
As subcategorias ligações duplas e simples foram fundidas para uma melhor apresentação e os principais gestos descritivos estão dispostos na figura 41 a seguir.

**Figura 41:** Gestos descritivos para representar ligações simples e duplas

Em 41(A), a estudante In colocou os dedos polegar e indicador de ambas as mãos de frente uns para os outros para explicar o foco na ligação dupla quando precisou desenhar as moléculas no papel. Em 41(B), a estudante C explicou que somente depois de ter feito o desenho da representação em 3D no teste pré-modelagem é que lembrou que poderia ter usado as representações de ligação fora do plano. Nesse momento, fez o gesto de contorno de uma ligação simples com a ponta dos dedos indicadores de ambas as mãos sobre a mesa. Em 41(C), a estudante Iv uniu a ponta dos dedos indicador e médio de ambas as mãos para representar uma ligação dupla.

#### D) PLANO

Na figura 42, a seguir, estão as principais representações em gestos acerca de planos existentes em moléculas.

**Figura 42:** gestos descritivos de planos em moléculas.

Em 42(A), a estudante P colocou a mão espalmada com a palma para frente e fez um movimento elíptico para representar o plano quando estava explicando como tinha desenhado a estrutura da molécula em 3D, esquecendo de desenhar os hidrogênios por entender que estavam atrás do plano. Em 42(B), a estudante Iv fez o gesto de uma mão espalmada para representar o plano da ligação dupla da molécula, pois foi a primeira lembrança sua quando precisou desenhar a molécula em 3D. De modo geral, percebemos que os estudantes acabaram produzindo mais gestos na entrevista pós-modelagem do que na pré. Este fato pode apresentar indícios de que houve a criação de novas representações e *drivers* de natureza hipercultural ou uma mescla destes com *drivers* de natureza sociocultural que podem ser identificados nos gestos descritivos dos estudantes.

#### 7.2.2.2. Categoria Análise Conformacional

Na categoria análise conformacional, constam todas as questões dos testes pré e pós-modelagem que abordavam diferentes aspectos relacionados às torções das ligações. O aspecto que mais chamou a atenção foi em relação à questão que relacionava quatro conformações distintas da molécula de n-butano com gráficos de energia em função do ângulo de torção da ligação C2-C-3. A maioria dos estudantes desenvolveram um raciocínio geométrico para dar conta da resposta a partir dos seus conhecimentos tácitos. Esse raciocínio ficou muito caracterizado quando os estudantes reportaram na entrevista o processo de pensamento para responder a questão. Nas respostas do teste pré-modelagem, o conteúdo químico propriamente dito não foi usado para sustentar as respostas, mas sim um conteúdo matemático e geométrico. Isso porque praticamente todos os estudantes nunca tinham visto algo similar no ensino médio.

A tendência geral dos estudantes para responder essa questão no teste pré-modelagem foi a de relacionar os ângulos da molécula, no sentido mais matemático, com os ângulos nos gráficos, ou mesmo com as posições mais centralizadas ou periféricas nos gráficos. Não relacionaram as diferentes conformações que a molécula pode assumir com diferentes valores de energia. Um exemplo claro disso está na fala

da estudante K, que explicou: “(...)é, eu pensei assim, por exemplo, nesse aqui do A eu olhei aqui o gráfico, ele está com o pontinho mais aqui, centrado no meio. E as moléculas estão assim, essas duas estão no meio. Daí eu pensei nisso, que está mais centrada no meio” (Estudante K).

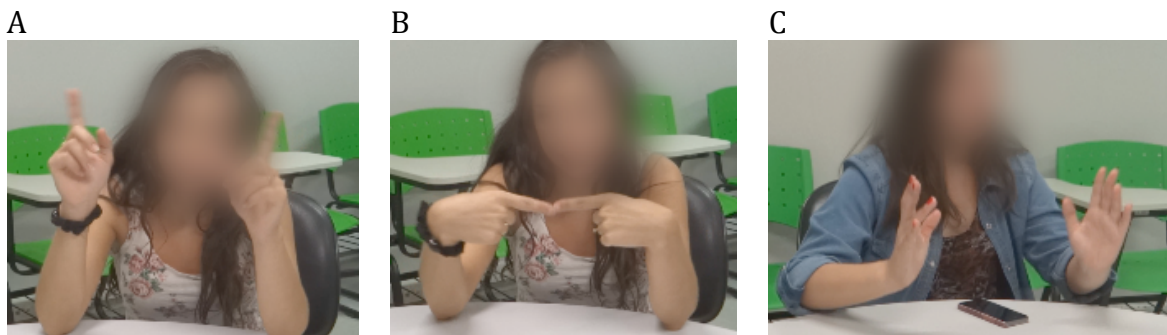
No teste pós-modelagem podemos perceber que o pensamento geométrico foi parcialmente substituído por um pensamento mais químico, de tentar relacionar diferentes conformações com energia, a partir da aquisição de novas representações e *drivers* advindos da mediação hipercultural. A estudante K teve uma modificação no padrão de resposta em relação à mesma questão no teste pós-modelagem. Ela afirmou: “eu me lembrei das simulações que a gente fez, quando... é... esse aqui é referente à energia. Aí, quando ela estava no pico mais alto ela estava gastando energia” (Estudante K). Então, analisando as respostas dos estudantes sobre o seu processo de raciocínio para responder a questão, podemos dizer que houve uma mudança em relação aos padrões de respostas e inferimos que essa mudança foi alavancada pela utilização do *software*.

A seguir, apresentaremos os gestos mais representativos de cada subcategoria de análise conformacional. Novamente optamos por fundir algumas subcategorias e omitir outras para melhor apresentação dos dados.

#### A) LIGAÇÕES DUPLAS E SIMPLES

A figura 43 a seguir emoldura os gestos descritivos para ligações duplas e simples nas moléculas e que foram identificadas pelos estudantes.

**Figura 43:** gestos descritivos para exemplificar a existência de ligações duplas e simples nas moléculas.

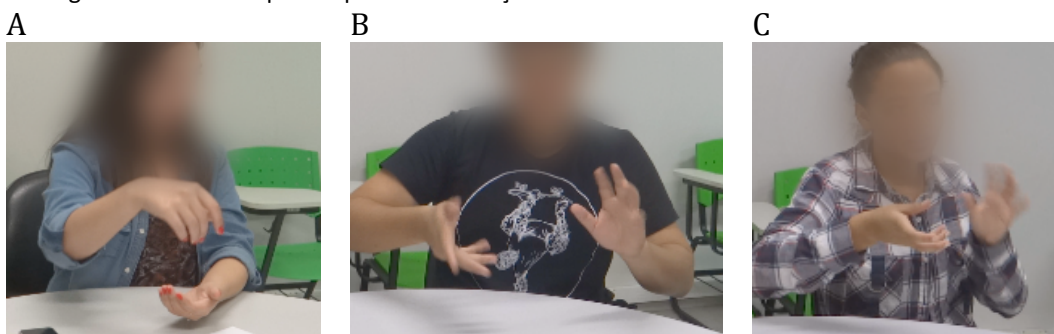


Em 43(A), a estudante Iv executou o gesto de colocar ambos os dedos indicadores em paralelo e para cima para demonstrar os orbitais  $p_y$  da ligação  $\pi$ . Em 43(B), a mesma estudante exemplificou a interação dos orbitais  $p_x$  para formar a ligação sigma. Essa estudante demonstrou ter bom domínio de conteúdo acerca das propriedades da ligação dupla do carbono, quando afirmou: “(...) se acontecer qualquer coisa ela vai se... tipo, não tem como, é mais difícil. Tu consegues mexer na sigma mas não consegue mexer na pi. Qualquer coisa que tu faças nela, vai romper” (Estudante Iv). Por sua vez, a estudante mostrou em 43(C) a ligação  $\pi$  do carbono com ambas as mãos espalmadas de frente uma para outra.

### C) ROTAÇÕES INTRA E INTERMOLECULARES

A seguir, na figura 44, mostraremos os gestos descritivos representativos para as rotações intra e intermoleculares.

**Figura 44:** gestos descritivos para representar rotações intra e intermoleculares.

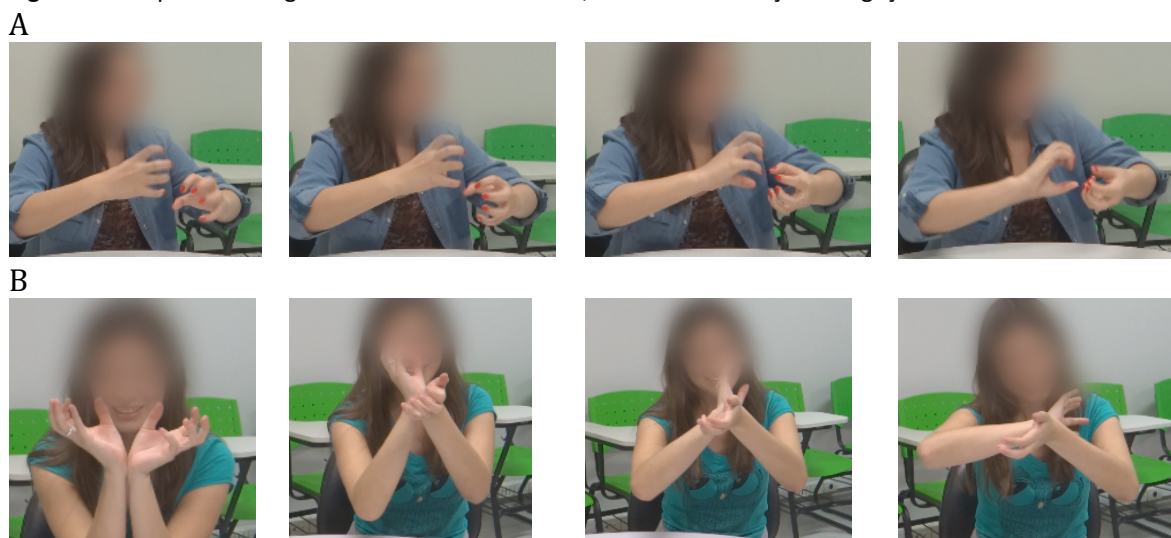


Em 43(A), a estudante C fez um gesto de rotação intermolecular para explicar como enxergou a molécula para resolver a questão que relacionava quatro conformações diferentes com gráficos de energia em função do ângulo de torção da ligação central. Por sua vez, o estudante B mostrou, em gesto com ambas as mãos girando alternadamente no sentido horário/anti-horário, ter aprendido que a molécula pode sofrer uma rotação intramolecular. O estudante afirmou: “eu acho que pode, mas acabaria afetando muito a energia da molécula” (Estudante B). Em 43(C), a estudante P colocou as mãos em forma de concha de frente uma para outra e fez gestos de giro alternado para explicar que as ligações simples têm liberdade de rotação enquanto as duplas e triplas não.



Nessa subcategoria também encontramos sequências de gestos de duas estudantes que relataram não mais esquecer o que viram no programa de modelagem sobre a simulação de análise conformacional do *cis*-2-buteno. A figura 45, a seguir, mostra duas sequências de gestos das estudantes C e K.

**Figura 45:** Sequências de gestos das estudantes C e K, mostrando a torção da ligação



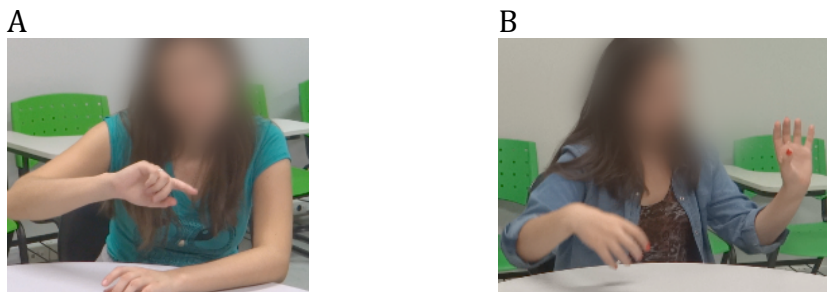
A estudante C, ao realizar o gesto em 45(A), falou que não teve muita modificação conceitual entre o teste pré e pós, mas afirmou: *“eu penso na imagem, assim, de ver a molécula no espaço. Eu nunca mais vou esquecer das nuvenzinhas se torcionando. Isso fica. E agora, quando tu falas cis e trans eu penso”* (estudante C). A estudante K fez a sequência de gestos emoldurada em 45(B) para descrever como era a sua imagem mental da molécula torcendo. Ela afirmou não ter noção de que era possível a torção na entrevista pré-modelagem. No entanto, na entrevista pós-modelagem, ela afirmou que conseguia ver: *“é, gira... Como é? Ela está assim, daí ela vai girando assim, e aí puf!”* (sic) (estudante K).

Quando perguntada o que significava o “puf”, a estudante respondeu que era quando a ligação quebrava. Esses dois exemplos mostram claramente a aquisição de novas representações e *drivers* advindos da mediação com o *software* de modelagem molecular, e essas representações e *drivers* permanecem e são utilizados mesmo sem a conexão com o computador. Isso evidencia ganho de competência representacional.

## D) MOLÉCULA INTEIRA E PARTE DA MOLÉCULA

Na categoria análise conformacional, os estudantes realizaram gestos quando falaram de moléculas inteiras e de partes das moléculas. Na figura 46, a seguir, temos os principais gestos dessa subcategoria.

**Figura 46:** gestos descritivos para representar a molécula inteira ou parte dela.



Em 46(A), a estudante K colocou o dedo indicador no ar e fez um gesto como se estivesse escrevendo no espaço uma molécula com a representação de traços em ziguezague. Ela afirmou: “*agora eu vejo as moléculas mais com bolinhas. Antes eu imaginava ela com risquinhos*” (Estudante K). Este exemplo mostra que a estudante adotou a representação de bolas e palitos que viu no *software* de modelagem molecular, adquirindo uma melhor capacidade de representar as moléculas. Antes do curso, a estudante costumava representar as moléculas com a representação de traços em ziguezague, algo não comum em estudantes do ensino médio.

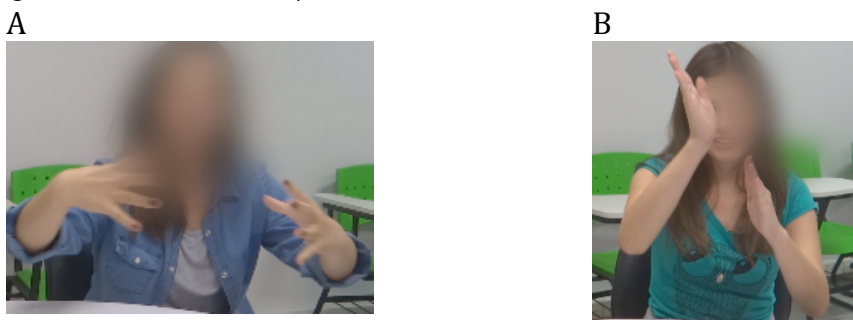
Em 46(B), a estudante C fez a conformação *trans* da molécula, após ter feito a forma *cis* e ter girado a mão esquerda pra baixo. No momento do gesto, a estudante estava explicando como via a molécula torcionando a partir da lembrança do uso do *software* de modelagem.

## E) POLARIDADE DA MOLÉCULA

Na categoria análise conformacional, foi tratada a questão da polaridade das moléculas, pois uma das questões dos testes pré e pós-modelagem solicitava aos estudantes que indicassem se as moléculas desenhadas eram polares ou apolares. Na figura 47, a seguir, trazemos os principais gestos dessa subcategoria.



**Figura 47:** gestos descritivos sobre a polaridade de moléculas.



Em 47(A), a estudante C fez o contorno circular com ambas as mãos para descrever o mapa de potencial de uma molécula. Em 47(B), a estudante K fez um gesto importante: com a mão esquerda, ela marcou a posição da ligação entre um dos carbonos centrais e a metila ligante e encaminhou a mão esquerda espalmada no sentido paralelo à mão direita, como se mostrasse a direção e o sentido do vetor que retrata a deslocalização dos elétrons na ligação. Essa estudante não tinha esse conceito antes do curso, o que evidencia, mais uma vez, a aquisição de competência representacional.

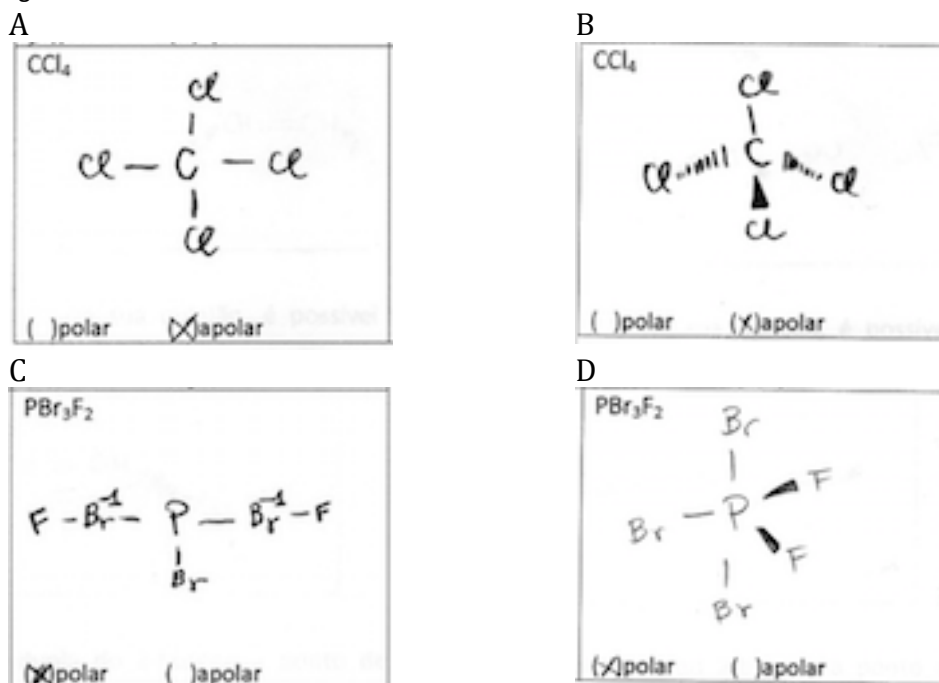
### 7.2.3.3. Categoria Geometria Molecular

Nessa categoria, percebemos que os estudantes, via de regra, buscam identificar o átomo central para depois dispor os demais substituintes quando precisam desenhar a geometria de uma molécula. Também vimos a dificuldade dos estudantes em visualizar as moléculas em 3D e, com isso, compor corretamente a geometria de cada molécula. O estudante B relatou essa dificuldade quando perguntado por que tinha desenhado o tetracloreto de carbono com uma forma quadrada planar e não tetraédrica: *“porque, sei lá, foi ensinado assim. Não foi explicado porque, ela (a professora) só passava as fórmulas, dava o nome e falava. Não explicava porque, devidamente, sabe? Tipo, porque que essa fórmula tinha que ser assim”*(estudante B).

A estudante Iv, mesmo cursando o terceiro semestre da graduação em Química, mostrou ter dificuldades em desenhar a geometria das moléculas como o

tetracloroeto de carbono e o  $\text{PBr}_3\text{F}_2$ . A figura 48, a seguir, mostra a evolução da estudante em comparação com os desenhos dos testes pré e pós-modelagem.

**Figura 48:** evolução conceitual da estudante Iv em relação à geometrias moleculares. (A) molécula do tetracloroeto de carbono no teste pré-modelagem; (B) molécula do tetracloroeto de carbono no teste pós-modelagem; (C) molécula do  $\text{PBr}_3\text{F}_2$  no teste pré-modelagem (D) molécula do  $\text{PBr}_3\text{F}_2$  no teste pós-modelagem.



Podemos perceber que a estudante desenhou o tetracloroeto de carbono como uma estrutura quadrada planar no teste pré-modelagem. Seu desenho muda conceitualmente no teste pós-modelagem, com uma estrutura tetraédrica e representações de ligação fora do plano. A estudante explicou os motivos da mudança:

Aqui (teste pós-modelagem) eu consigo imaginar a molécula em 3D de uma melhor forma, porque a gente viu elas no programa. Lá na faculdade era só teoria, né? Eu não conseguia enxergar a molécula de forma 3D. Aqui eu consigo enxergar melhor, tipo, essa aqui eu consigo enxergar bem mais tranquilo do que aquela lá. Porque aquela lá (teste pré-modelagem), pra mim, eu não sabia arranjar no espaço. (Estudante Iv).

Atribuímos esse ganho de competência à mediação com o mecanismo externo de processamento de informações, o programa de modelagem molecular. O mesmo ganho representacional foi visto no caso da molécula de  $\text{PBr}_3\text{F}_2$ .

Da mesma forma, identificamos dificuldades dos estudantes em definir se as moléculas eram polares ou apolares. Apenas duas estudantes tentaram relacionar a polaridade com a existência de um momento de dipolo. Os demais não souberam responder, responderam errado ou reportaram não ter estudado essa matéria no ensino médio. O exemplo mais representativo de aquisição de novas representações e *drivers* em relação aos critérios para definir se uma molécula é polar ou apolar é o da estudante In. Na entrevista pré-modelagem, ela explicou da seguinte forma como definiu acerca da polaridade das moléculas:

Primeiro eu pensei no carbono. Aí eu comecei a pensar num carbono como um grafite. Aí eu pensei que são coisas... eu não sei, que geram coisas maciças, por exemplo, grafite, diamante, pedra mesmo, sabe? E aí eu pensei, pra ter água tem que ter hidrogênio e oxigênio também, claro. Mas se tiver hidrogênio já pode fazer alguma molécula. Tanto é que tem um asteroide que ele tem uma molécula de só... acho que é só hidrogênio se não me engano e foi o que deu origem à molécula aqui da terra. Então eu penso sempre, ah, polar, hidrogênio. Ou oxigênio. E eu não sei se isso está certo. (estudante In)

Como podemos perceber, a estudante possuía um conceito equivocado e distorcido sobre o que torna uma molécula polar ou apolar. Para essa, a molécula será polar se possuir hidrogênios e não ter carbonos e será apolar se não tiver hidrogênios. Contudo, na entrevista pós-modelagem, a estudante demonstrou começar a pensar em soma de vetores para a definição de uma resultante, pois *“eu pensei na tua aula, em que tu estavas dizendo que se fosse assim e assim, e se a gente conseguisse somar aqui e aqui, o eixo ‘x’, ‘y’ e ‘z’ e zerar seria apolar. E quando dava diferente seria polar”* (Estudante In). A estudante fez diversos relatos de soma de vetores para definir se haveria ou não uma diferença na resultante e isso demonstrou um ganho significativo nas representações e *drivers*. Atribuímos esse ganho à uma mescla de interação sociocultural e hipercultural, na medida em que podemos identificar no padrão de resposta dessa estudante algumas representações advindas do *software* de modelagem e outras que fizemos no quadro para explicar o conceito de polaridade.

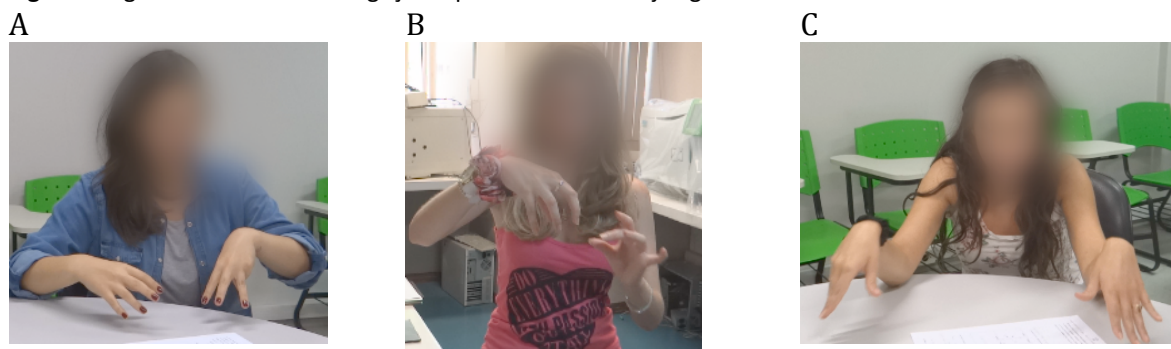
Com relação aos gestos descritivos produzidos nessa categoria, percebemos a repetição de muitos gestos já apresentados em momentos anteriores, tanto no primeiro experimento definitivo quanto no segundo. Diante disso, para que a

apresentação não fique cansativa, optamos por mostrar somente os gestos mais significativos das subcategorias ligações e polaridade/nuvem eletrônica.

### A) LIGAÇÕES

A figura 49, a seguir, mostra um conjunto de gestos realizados pelos estudantes para descrever como viam as ligações dos átomos nos arranjos geométricos moleculares das moléculas estudadas nos testes pré e pós-modelagem.

**Figura 49:** gestos descritivos de ligações químicas nos arranjos geométricos moleculares.



Em 49(A), a estudante C colocou os dedos da mão esquerda na forma de um triângulo para representar como pensou em montar a geometria do  $\text{PBr}_3\text{F}_2$  no teste pré-modelagem. Na sua explicação, a estudante falou que *“uma diferença de eletronegatividade entre os ligantes do átomo principal e tu vais ter uma configuração diferente. Tu não vais ter a mesma diferença de espaço pra cada um”* (Estudante C). Em função disso, a estudante optou por montar a geometria dessa molécula colocando o fósforo centralizado, os dois átomos de flúor na parte de cima – com ângulos de 120 graus – e os três átomos de bromo na parte de baixo – formando um triângulo. Todas as ligações foram desenhadas com traços simples.

No teste pós-modelagem, a estudante mudou a sua forma de pensamento e desenhou a estrutura correta: bipirâmide de base trigonal com representação de ligações fora do plano. A estudante identificou a diferença que a fez mudar a forma de pensar:

Veio na cabeça os desenhos delas também assim, na forma de bolinhas como no programa. Aí o que mudou mesmo foi essa última molécula que eu não conhecia. Aí eu consegui perceber a organização dela quando a gente fez ela no programa, porque antes eu não tinha a menor ideia de como seria a geometria. (Estudante C).

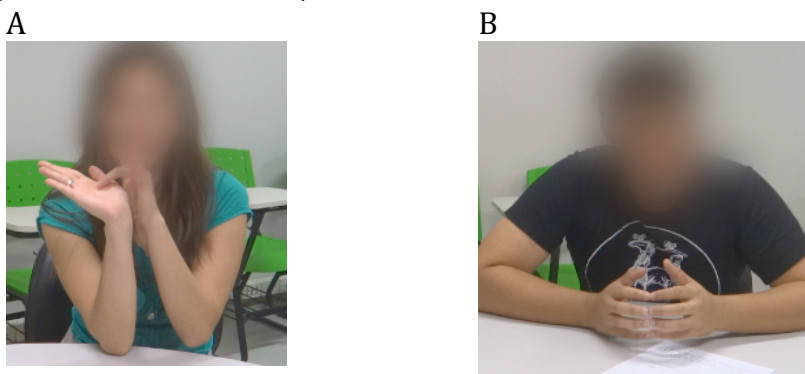
Em 49(B), a estudante In mostrou em gestos como percebe a geometria da molécula de tetracloreto de carbono. Ela colocou a mão direita em cima, indicando a posição de um dos cloros e fez a marcação das ligações do carbono com os demais cloros com os dedos polegar e médio da mão direita. Essa estudante desenhou a molécula, no teste pré-modelagem, com uma estrutura quadrada em que todas as ligações possuíam um ângulo de 90 graus entre si. Por sua vez, no teste pós-modelagem, a estudante acertou a estrutura, desenhando um tetraedro e utilizando as representações de ligações fora do plano. Ela colocou dois cloros no mesmo plano do carbono e os outros dois fora do plano: um para frente e outro para trás. Isso demonstra, no mínimo, uma melhora na habilidade de visualização e um ganho de competência representacional advinda da aquisição de novas representações e *drivers* de natureza hipercultural e sociocultural.

Em 49(C), a estudante Iv mostrou com ambas as mãos a posição dos ligantes na molécula da amônia. Essa estudante, em que pese estar no terceiro semestre do curso de Química em nível de graduação, representou a geometria das moléculas no teste pré-modelagem de forma bem “pobre”, com alguns erros e representações de todas as ligações com traços simples no plano. No teste pós-modelagem, a mesma estudante demonstrou um aprofundamento maior em termos de representação e de indicação dos arranjos moleculares corretos. Ela passou a usar a representação de ligações fora do plano e acertou todas as geometrias, inclusive a mais difícil ( $\text{PBr}_3\text{F}_2$ ), como mostramos na figura 48.

## B) POLARIDADE E NUVEM ELETRÔNICA

No contexto da geometria molecular, os estudantes tinham que definir se as moléculas desenhadas eram polares ou apolares. Os gestos descritivos dessa subcategoria estão emoldurados na figura 50, a seguir.

**Figura 50:** gestos descritivos acerca da polaridade e nuvem eletrônica de moléculas.



Em 50(A), a estudante K colocou a mão direita na posição da ligação de uma molécula e com o dedo indicador da mão esquerda mostrou onde visualizava o vetor que indicava a deslocalização dos elétrons daquela ligação. A estudante reconheceu a dificuldade que tinha em visualizar a molécula no plano 3D: *“tenho dificuldades porque eu nunca fui incentivada a ver, eu acho. Sempre foi uma coisa em 2D mesmo. Pelo menos na minha escola nunca teve nada assim”* (Estudante K). Ao final do curso, essa estudante já tinha desenvolvido uma visão em 3D das moléculas e, para definir a polaridade, já começou a pensar em termos de soma de vetores. Avaliamos aqui existir mais um exemplo de ganho de competência representacional para fins de resolução de problemas. Isso porque, em muitos casos, é praticamente impossível definir a polaridade de moléculas se não há uma habilidade visuoespacial desenvolvida.

Em 50(B), o estudante B colocou as pontas dos dedos em contato e fez breve gesto de afastar e aproximar para explicar que no teste pré-modelagem ele não sabia como resolver a questão que solicitava definir a polaridade das moléculas. Ele afirmou que não tinha visto esse tema no ensino médio e que após o curso passou a ter outra noção de como definir a polaridade de moléculas, pois começou a pensar em termos de soma de vetores. O estudante argumentou sobre o que mudou na forma de pensar: *“a distribuição melhor dos elementos. Relacionando com tudo que a gente aprendeu, né? A gente conseguiu sincronizar melhor isso e fazer aqui”* (Estudante B). Sobre a molécula de  $\text{PBr}_3\text{F}_2$  ele falou o que mudou: *“porque foi assim, a gente pegou e visualizou lá, pegou e fez... agente entrou no... foi só depois da visualização no software que a gente conseguiu visualizar ela direitinho. Daí a gente pegou e entendeu lá”* (Estudante B).

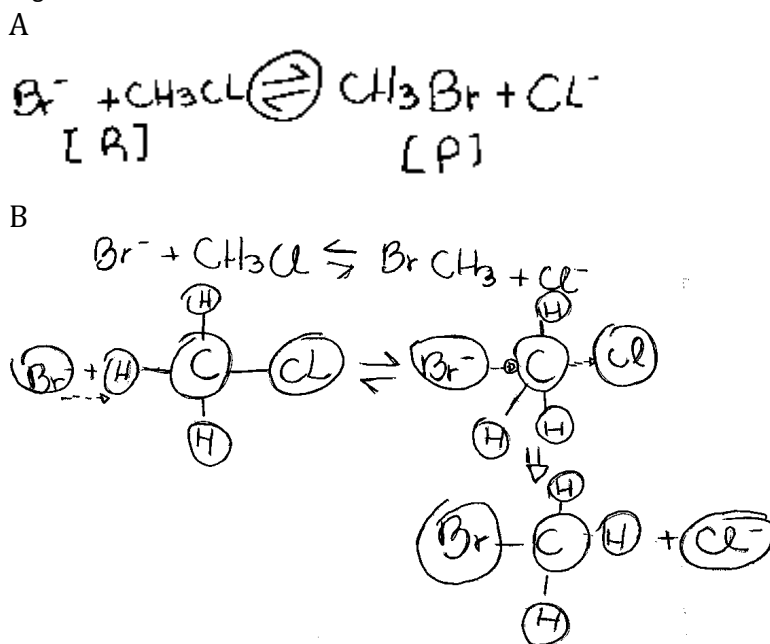
#### 7.2.2.4. Categoria Reações Químicas

Essa categoria teve como base a simulação do mecanismo de uma reação orgânica de substituição nucleofílica de segunda ordem envolvendo o cloreto de metila e o íon brometo. Nos testes pré e pós-modelagem, constou uma questão sobre o tema, cujo enunciado mostrava as espécies envolvidas (reagentes e produtos) e solicitava que os estudantes desenhasssem essas espécies e mostrassem a inversão de configuração dos hidrogênios – principal característica do mecanismo.

Dos seis estudantes, apenas uma deixou a questão em branco tanto no teste pré-modelagem quanto no teste pós. No teste pré-modelagem, a estudante P informou ter tentado fazer a questão, *“mas aí eu comecei a embaralhar muita coisa e aí deixei em branco. Mesmo porque eu não saberia colocar de um jeito que me parecesse agradável”* (estudante P). No teste pós-modelagem, a mesma estudante relatou outras dificuldades: *“eu disse que eu tinha dificuldade em desenhar a fase intermediária (...) eu acho que eu tenho dificuldade de imaginar essa transição e não consegui fazer. (...) o problema é imaginar, eu não consigo arranjar direito no espaço e não consigo passar pro papel”* (Estudante P). Aqui vemos mais um exemplo do quanto são importantes as habilidades visuoespaciais para a realização de simulação mental a fim de resolver problemas químicos dessa natureza.

Três estudantes mostraram leve evolução nos conceitos envolvidos, dos quais destacamos a estudante In. A figura 51, a seguir, mostra a resposta da estudante In nos testes pré e pós-modelagem.

**Figura 51:** respostas da estudante In à questão sobre substituição nucleofílica: (A) teste pré-modelagem; (B) teste pós-modelagem.

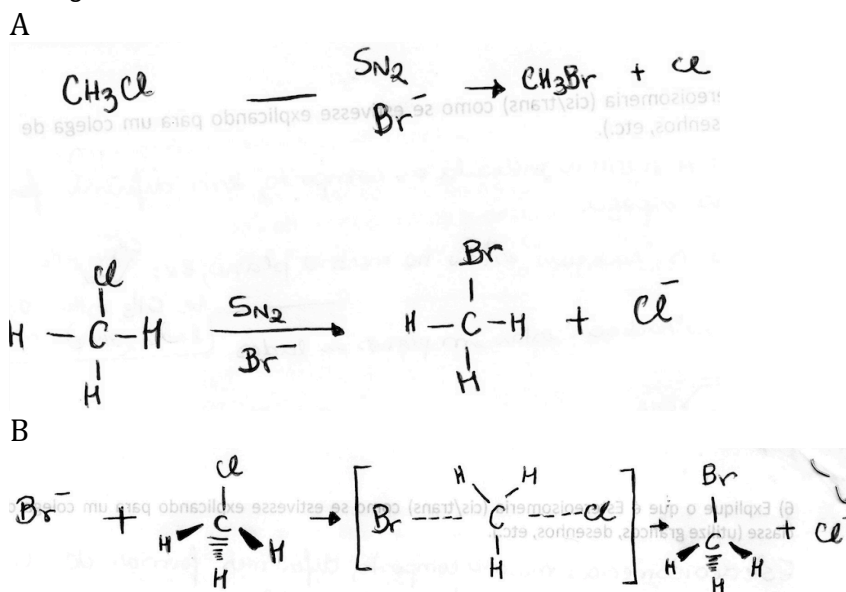


Podemos perceber que a estudante evoluiu de uma representação clássica e simplificada da reação química desenhada em 51(A) para uma representação mais completa em 51(B), mostrando a reação química simplificada, mas também avançando para um outro padrão de resposta em que houve a tentativa de representação do mecanismo da reação, incluindo o estado de transição. Podemos perceber que a estudante representou os átomos como bolas de bilhar com a marcação dos símbolos químicos em suas faces. A representação do estado de transição desenhada contou com um esboço de geometria trigonal plana para os hidrogênios e uma representação das ligações entre o íon brometo, o cloro e o carbono com sutil diferença em relação às demais. Além disso, podemos perceber que a estudante tentou mostrar também a inversão de configuração dos hidrogênios, se compararmos suas posições inicial e final. As novas representações e *drivers* adquiridos nesse caso são de natureza hipercultural, por mediação com a simulação computacional.

Por fim, duas estudantes mostraram uma evolução um pouco maior, por já possuírem um conjunto de conhecimentos tácitos, melhor que os demais. Desse último grupo, destacamos a estudante Iv. A figura 52, a seguir, mostra as respostas desta estudante à mesma questão.



**Figura 52:** respostas da estudante Iv à questão sobre substituição nucleofílica: (A) teste pré-modelagem; (B) teste pós-modelagem.



É possível perceber que a resposta do teste pré-modelagem em 52(A) contou com representações clássicas das moléculas, nenhuma menção ao estado de transição nem tampouco à inversão de configuração. No entanto, na resposta do teste pós-modelagem em 52(B), podemos encontrar: melhoras na representação das moléculas, com o uso de representações de ligações fora do plano; desenho do estado de transição, com a geometria trigonal plana para os hidrogênios e a seguinte explicação feita pela estudante:

Estado de transição: é aqui que ocorre a inversão de configuração dos hidrogênios! O bromo chega e acaba “puxando” o carbono, que faz com que os átomos de hidrogênio sejam puxados também, chegando a um ponto (de transição) em que a molécula fica com os hidrogênios alinhados (planar)!! (Estudante Iv).

Apesar de estar incompleta, a explicação da estudante mostrou que houve um ganho de novas representações e *drivers* que foram capazes de produzir uma explicação para o fenômeno.

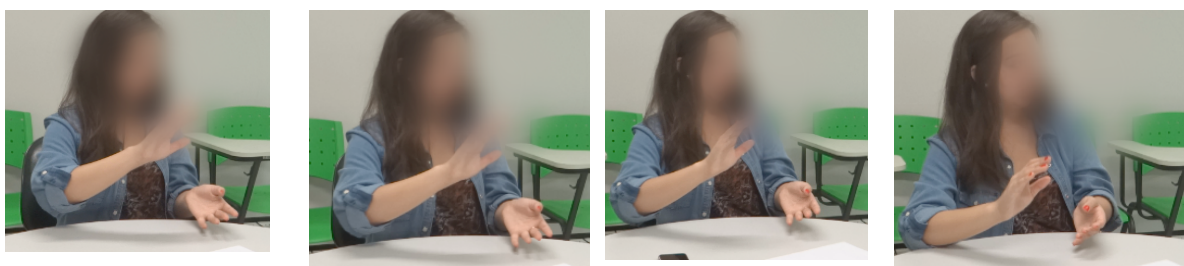
A seguir, apresentaremos os gestos mais significativos da categoria reações químicas. Sem qualquer dúvida, o conjunto de gestos mais importantes dessa categoria está na subcategoria ligações químicas. Nas categorias átomo e molécula inteira percebemos os mesmos gestos anteriormente apresentados. No entanto, na categoria ligações, encontramos gestos que mostram a compreensão dos estudantes

sobre um dos fenômenos mais interessantes do mecanismo  $S_N2$ : a inversão dos hidrogênios.

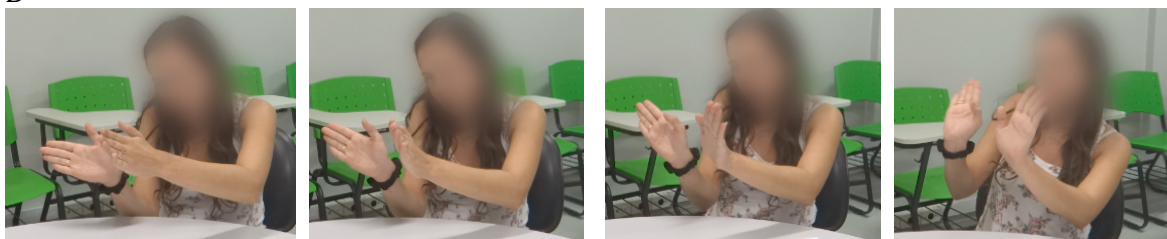
A figura 53, a seguir, mostra três sequências de gestos de estudantes que explicaram o fenômeno.

**Figura 53:** gestos descritivos relativos à inversão dos hidrogênios no mecanismo de reação  $S_N2$ .

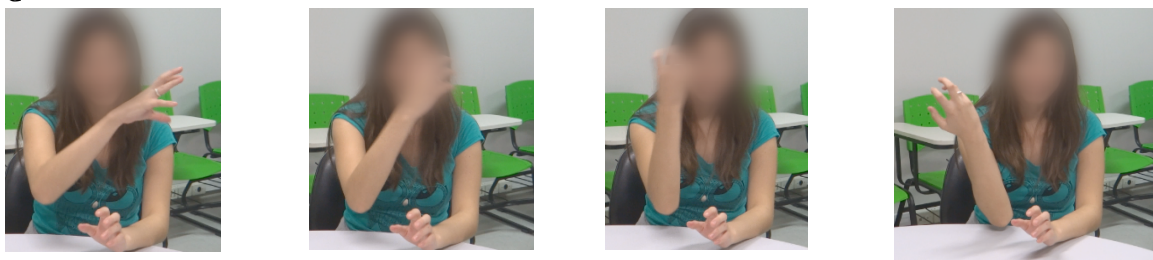
A



B



C



Em 53(A), a estudante C relatou em gestos o que viu na sua simulação mental sobre a inversão de configuração dos hidrogênios. A estudante afirmou: *“a imagem que construí é a mesma coisa que no programa. Eu imaginei o videozinho, assim, que aí vem a bolinha, a; i os átomos de hidrogênio vão mudando, vão invertendo o lado e depois tem o afastamento da outra”* (Estudante C).

Em 53(B), a estudante Iv fez o gesto de sua simulação mental em relação à inversão dos hidrogênios afirmando que foi o que mais marcou no curso, pois ela não tinha essa visão dinâmica antes. A estudante explicou:

É, vendo eles assim... aí depois eles vindo, ficando planar (...) Até quando eu fiz orgânica eu pensei, nossa como é que o professor não mostrava isso na aula!! Nossa, é muito bom tu veres o que acontece. Porque eu lembro desses negócios de estado de transição, que a gente tinha que desenhar e eu não sabia direito, eu meio que decorava, eu não entendia, sabe? E quando fizemos ali a reação eu pensei, nossa!! Que legal, tipo, eu não sabia, o professor nunca mostra de forma 3D, ah entendam o que está acontecendo. Não, é isso e ponto. Te vira, o problema é teu. Assim, é muito bom de ver. Agora, quando tiver outra molécula, se eu não souber, eu vou tentar botar no programa e tentar enxergar a interação, o que acontece. (Estudante IV)

O que a estudante indicou é explicado por princípios da TMC: como a capacidade cerebral é limitada, o cérebro utiliza naturalmente ferramentas externas que o tornam mais capaz para realizar tarefas. Daí a estudante indicar que irá *“botar no programa e tentar enxergar a interação”*. Isso mostra que a estudante reconheceu a modelagem molecular como uma ferramenta importante para a solução de certos problemas químicos.

Por fim, em 53(C), está a sequência de gestos da estudante K. Esta estudante explicou qual tinha sido a primeira coisa que veio em sua cabeça quando leu a questão do teste pós-modelagem: *“veio que a gente fez a simulação da molécula vindo e mudando o... conseguindo mudar os hidrogênios que estavam todos assim e vieram todos pra cá. Eu fiquei imaginando aquela imagem”* (Estudante K).

Esses são fartos exemplos de ganho representacional e de criação de novas representações e *drivers* de natureza hipercultural advindos da mediação com a ferramenta de modelagem molecular. Esse ganho representacional permitiu às estudantes resolverem um problema químico, mesmo que a conexão com o mecanismo externo de processamento de informações tenha se perdido. Também permitiu às estudantes adquirirem uma competência representacional que podemos chamar de aprendizagem.

#### 7.2.2.5. Categoria Modelagem Molecular

A categoria Modelagem Molecular foi somente criada na entrevista pós-modelagem. Nela, os estudantes foram perguntados sobre o que mudou em relação às suas concepções desde antes do curso e quais as principais contribuições do curso

para o aprendizado de cada um. Além disso, também perguntamos o que, na visão dos estudantes, é a modelagem molecular. A maioria dos estudantes relataram ter melhorado as habilidades visuoespaciais. Aqueles que tinham dificuldades de visualização de moléculas no plano 3D relataram ter melhorado bastante a sua capacidade de visualizar moléculas no espaço tridimensional. Por outro lado, as duas estudantes que tinham as habilidades visuoespaciais mais desenvolvidas melhoraram no aspecto conceitual.

A estudante C relatou o que mais marcou na experiência de ter feito o curso:

Mudaram algumas concepções, eu relatei o conceito de energia com moléculas espaciais, que na minha cabeça eu já tinha a noção das moléculas espaciais, só não tinha talvez elas desenhadas de uma forma mais compreensível como eu tenho agora. Foi o que mudou bastante. Agora eu imagino... porque a imagem das moléculas do programa ficou gravada na minha cabeça. Porque é assim que as minhas associações são feitas, com imagens. Então ficaram gravadas todas elas na minha cabeça, então aí hoje quando eu vou construir novas moléculas que a gente não usou, por exemplo, eu já faço esse arranjo novo. (Estudante C)

A estudante relatou que não sabia como muitos arranjos geométricos se davam e, por conta disso, tinha um conhecimento superficial. Após o curso, a estudante vinculou o conceito de energia também a todas as questões que envolveram os arranjos moleculares. Da mesma forma, a estudante Iv relatou que o que mais marcou foi a inversão de configuração dos hidrogênios na simulação de  $S_N2$ , pois *“as outras, como eu já tinha feito, eu tinha uma noção, mas a inversão dos hidrogênios, do estado de transição, foi o que eu não sabia e aí pra mim agora mudou porque eu consigo ver direitinho”*. (estudante Iv).

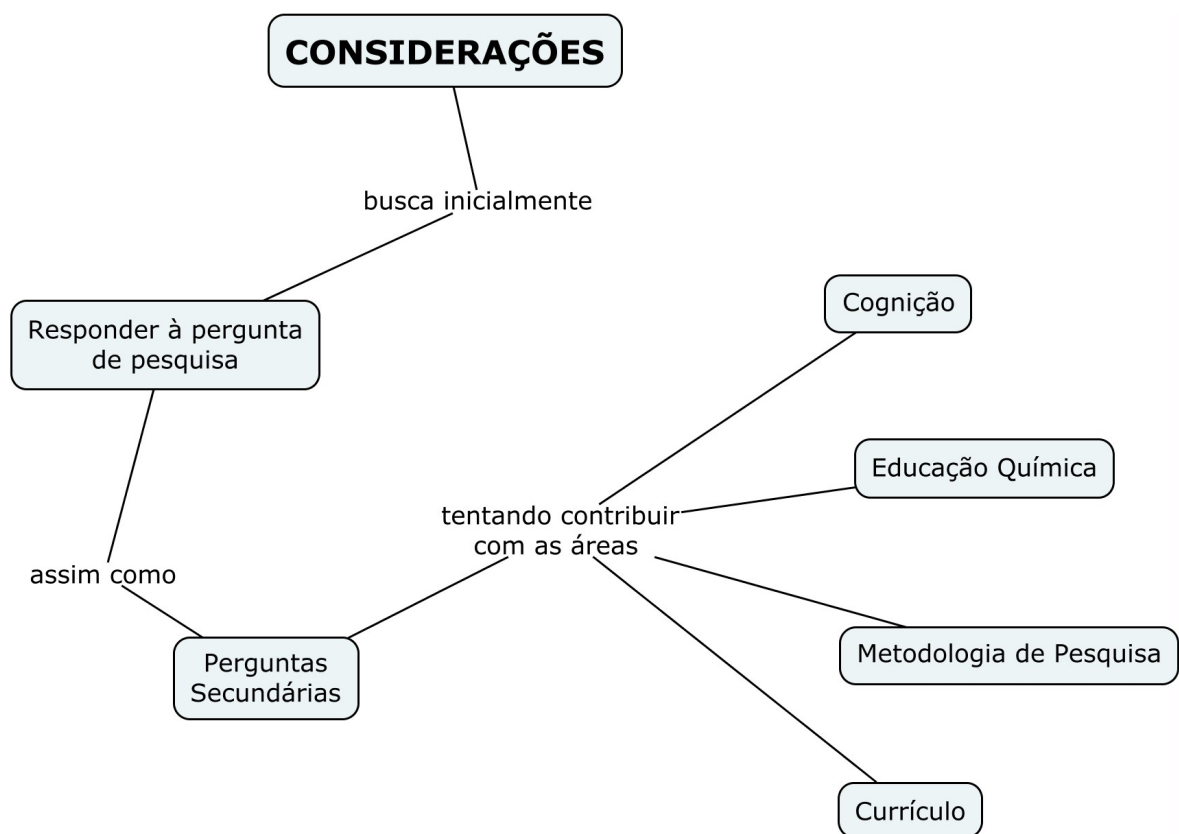
Com relação ao conceito de modelagem molecular, tivemos as seguintes respostas:

- ✓ trabalhar com essas moléculas de uma forma dinâmica. Como a gente viu em todo o curso, a modificação delas, o arranjo delas, a energia que vai envolver nisso. Isso pra mim é modelagem molecular. Trabalhar, assim, com o bruto da química, sabe? As ligações dos elementos se relacionando com os outros e os resultados disso (Estudante C);
- ✓ agora seria mesmo, a visão em 3d mesmo, que é uma coisa que eu não tinha (Estudante In);

- ✓ é tu conseguir imaginar uma... (tempo) um composto no... como se ele... é que assim olhando pra, sei lá, pra água tu não consegue ver ele disposto. E no programa a gente consegue, geometria molecular, consegue imaginar. Seria usado pra imaginar coisas que a gente não consegue ver, como funciona, ligado a tal e tal (Estudante K);
- ✓ antes era desenhar moléculas e agora é desenhar, mas com todas as influências que ela tem da natureza. É isso a modelagem molecular pra mim (Estudante P).

Por fim, quanto aos gestos descritivos produzidos nessa categoria, podemos afirmar que todos eles foram, em sua maioria, os mesmos produzidos em subcategorias anteriores. Portanto, para não nos tornarmos repetitivos na apresentação desses, optamos por não mostrar os gestos nesse momento.

## CONSIDERAÇÕES



*O principal objetivo da educação é criar pessoas capazes de fazer coisas novas e não simplesmente repetir o que outras gerações fizeram.*

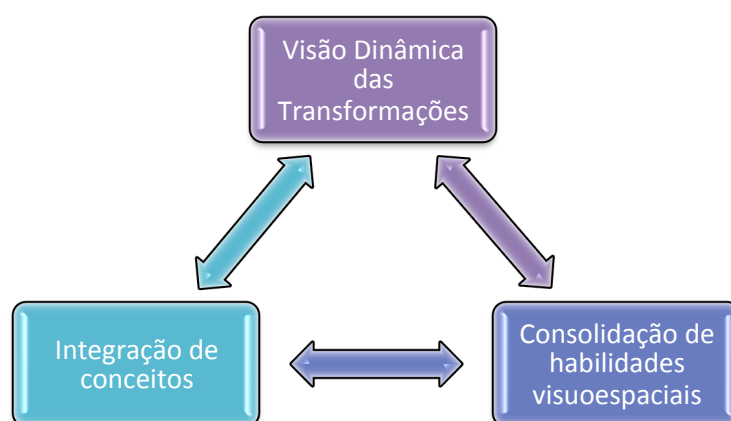
*(Jean Piaget)*

A análise dos dados obtidos nos dois experimentos definitivos nos permite tecer algumas considerações que serão organizadas por ordem de importância. Do primeiro experimento definitivo trazemos um resultado de pesquisa importante: de maneira geral, podemos dizer que o uso do *software* de modelagem molecular propiciou aos estudantes adquirirem uma visão mais dinâmica dos processos de transformação das moléculas.

Esta visão dinâmica dos processos de transformações moleculares parece residir, principalmente, na visualização da dinâmica das transformações; no preenchimento de “lacunas” imagísticas – principalmente no que toca estados de transição e sua relação com imagens já existentes – e no uso integrado do conceito de energia molecular. Estes fatores permitem que o estudante tenha simulações mentais de transformações químicas e consiga modelar essas transformações. Ademais, os estudantes reconhecem cognitivamente que a modelagem molecular é a ferramenta de escolha para investigação de processos químicos desconhecidos por eles.

Essa visão dinâmica das transformações a) auxiliou na consolidação das habilidades visuoespaciais dos estudantes e b) deu a oportunidade aos estudantes de construir uma visão mais integrada de conceitos que, via de regra, são tratados de forma distinta. O esquema da figura 54, a seguir, mostra nossa principal conclusão de pesquisa advinda do primeiro experimento definitivo.

**Figura 54:** Influência da aquisição de uma visão dinâmica das transformações nos processos cognitivos dos estudantes.



A importância da habilidade visuoespacial foi fartamente justificada nesta e em outras pesquisas. Ela é o ponto de partida do estudante, pois permite que ele

inicie a formação de imagens mentais, produzidas pela criação de *drivers* específicos que podem ser construídos pela mediação cultural, sociocultural, hipercultural ou mesmo por uma mescla destas. As imagens mentais são necessárias e, na nossa visão, fundamentais para a compreensão dos fenômenos estudados, visto que acreditamos não ser possível a resolução de problemas sem que o estudante consiga construir imagens mentais ou simulações mentais. Elas são o ponto de partida que permite ao estudante poder construir a visão dinâmica das transformações. Esta, por sua vez, dá a oportunidade ao estudante de ter um raciocínio integrador, ao associar diferentes configurações a distintas energias. Por fim, essa visão dinâmica das transformações pode levar os estudantes a construir uma integração de conceitos que se estabelece na medida em que as duas primeiras premissas se consolidam na estrutura cognitiva do estudante. A partir disso, o estudante pode começar a perceber que existe uma relação estrita entre estrutura da matéria, suas propriedades e energia. Com a orientação adequada, o estudante tem condições de começar a construir o conceito integralizador de energia e pensar em termos de modelagem molecular, desenvolvendo habilidades de pensamento de alta ordem.

Do segundo experimento definitivo, trazemos a ideia de ganho de competência representacional. Esse conceito foi construído após a qualificação e, junto com ele, a definição de aprendizagem à luz do referencial teórico adotado. Para nós, aprendizagem caracteriza-se como o ganho de competência, por meio da aquisição de novas representações e *drivers*, em prol de uma capacidade maior de resolução de problemas.

O ganho de competência representacional é mais marcante nesse segundo experimento definitivo. Mesmo os estudantes que saíram do ensino médio diretamente para o curso técnico adquirem essa competência. Os dados que foram mostrados no capítulo anterior são fartos. Conceitos como *cis* e *trans*, momento de dipolo e outros eram desconhecidos da maior parte. Após o curso, esses estudantes passaram a usar um raciocínio diferente, mais próximo do conceito científico que está por trás de cada um desses temas. Entendemos que o domínio de um determinado conceito ou campo conceitual é algo que requer tempo. Um curso de 12 horas não é capaz de contribuir para que os estudantes possam adquirir domínio em relação aos conceitos abordados, mas pode fazer com que esses estudantes tomem conhecimento



de que existem formas diferentes de resolver problemas químicos, assim como, representações diferentes que podem ser usadas quando necessário.

São essas aquisições de novas representações e *drivers* que dotaram os estudantes de um ferramental teórico mais vasto, o que permitiu que esses estudantes pudessem começar a pensar de uma forma diferente para a resolução dos problemas. Muitos dos problemas apresentados aos estudantes nas aulas ou mesmo no teste pós-modelagem foram solucionados e deixaram de ser problemas não resolvidos para serem problemas resolvidos; ou mesmo problemas que já tinham sido resolvidos nas aulas ou no teste pré-modelagem foram melhor resolvidos após o ganho representacional promovido pelas mediações hipercultural e sociocultural que ocorreram ao longo do curso.

### 8.1 AQUISIÇÃO E MODIFICAÇÃO DE REPRESENTAÇÕES E DRIVERS

A possibilidade que os estudantes tiveram de observar o fenômeno de conformação em modo dinâmico, a partir da construção de simulações de modelagem molecular, envolvendo análise conformacional, foi o ponto de partida da construção da visão dinâmica das transformações. Essa possibilidade, além de ampliar as potencialidades das habilidades visuoespaciais, contribuiu para que os estudantes refletissem sobre seus conceitos acerca das ligações químicas e propiciou o raciocínio de integração de conceitos. Percebemos ao longo das entrevistas nos dois experimentos definitivos que alguns estudantes ainda possuíam a visão de rigidez das ligações duplas.

Além disso, os estudantes não possuíam o conceito integralizador de energia. Ao realizar as simulações de análise conformacional das moléculas de etano, butano e *cis*-2-buteno, os estudantes perceberam que há uma relação direta entre energia, conformação e demais propriedades moleculares, inclusive para ligações duplas. Estas últimas tiveram uma mudança de representação importante, na medida em que a maioria dos estudantes não acreditavam ser possível a torção dessa ligação, por terem construído erroneamente o conceito de rigidez da ligação dupla. A partir do

contato dos estudantes com a simulação computacional, eles perceberam que o conceito de rigidez nas ligações duplas não existe. O que existe é um maior ou menor favorecimento energético para a torção, uma vez que o custo energético da torção de uma ligação dupla é muito maior que o de romper as interações desta ligação, em especial a dos orbitais pi.

O segundo aspecto interessante que percebemos é a mudança de conceitos dos estudantes em relação à polaridade. Houve uma sensível mudança na forma como eles perceberam a polaridade das moléculas nos dois experimentos definitivos. No primeiro experimento definitivo, o estudante D afirmou que enxergava as distintas regiões com símbolos (+) e (-), numa clara alusão a *drivers* culturais. Após o curso, esse mesmo estudante passou a perceber a polaridade das moléculas como mapas de potencial com cores azul e vermelha para as regiões mais eletropositivas e eletronegativas, respectivamente, o que demonstra a aquisição de *drivers* hiperculturais.

O fato do estudante usar uma representação da polaridade com símbolos (+) e (-) dá conta de resolver a maioria dos problemas químicos que envolvem esse conceito. Certamente, o estudante D vai utilizar essa representação toda vez que for possível, por ser mais simples. No entanto, em alguns casos, a representação mais simples pode não dar conta da resolução de alguns problemas químicos. Nesse caso, o estudante estará dotado de competência representacional e utilizará a representação de mapa de potencial eletrostático quando necessário. Por sua vez, a estudante N afirmou que, antes do curso, conseguia representar a polaridade como uma nuvem monocromática, uma densidade maior. Após o curso, a estudante informa que passou a representar a polaridade das moléculas como nuvens coloridas em vermelho e azul. Da mesma forma, a representação monocromática dá conta de resolver muitos problemas e, certamente, será usada pela estudante.

Mesmo o estudante considerado por nós no primeiro experimento como *expert* teve um ganho cognitivo nesse aspecto, incorporando *drivers* hiperculturais aos *drivers* culturais pré-existentes. Antes do curso, a imagem mental de polaridade do *expert*, apesar de ter o formato de uma nuvem eletrônica, era monocromática. Após o curso, o *expert* passou a representar a polaridade como um mapa de potencial com

cores azuis e vermelhas. Essa representação também tem uma variação interessante: na resolução de problemas de reações químicas, o *expert* passou a visualizar as moléculas como símbolos químicos coloridos e não mais monocromáticos como anteriormente. Depois do curso, a representação de símbolos químicos seguiu sendo a preferencial nas imagens mentais, no entanto, os símbolos passaram a ter as cores azuis e vermelhas, conforme a distribuição de cargas da molécula.

A identificação de regiões moleculares com maior ou menor densidade de carga eletrônica é importante para a compreensão de certas propriedades e para a definição do caminho de reações químicas. Neste aspecto, a contribuição do *software* de modelagem molecular é importante, pois torna mais robustas as representações e *drivers* acerca desse aspecto, facilitando a compreensão de muitos fenômenos por parte dos estudantes.

## 8.2 AS CONTRIBUIÇÕES DA MODELAGEM MOLECULAR PARA O ENSINO DE REAÇÕES QUÍMICAS

No campo das reações químicas, é fácil perceber que o uso de simulações computacionais dá a oportunidade ao estudante de visualizar de forma dinâmica e no espaço tridimensional como as interações entre átomos e moléculas ocorrem e quais as preferências energéticas que moldam o caminho das reações. A simulação que fizemos para as reações de substituição nucleofílica de segunda ordem foi importante nesse aspecto, visto que permitiu exatamente essa visão de como o mecanismo dessa importante reação ocorre.

De maneira geral, os estudantes de ambos os experimentos definitivos passaram a perceber melhor a polaridade de íons e moléculas e o quanto esse aspecto define a posição em que o ataque do nucleófilo ocorre. Também percebemos nas entrevistas realizadas a importância de mais dois aspectos relacionados a essa simulação em particular: a percepção dinâmica da reversibilidade da reação entre o íon brometo e o cloreto de metila e a possibilidade de visualização em tempo real da deformação da nuvem eletrônica das espécies envolvidas (polarizabilidade).

Alguns estudantes manifestaram, dentre outras, a capacidade de representar o movimento eletrônico e esse aspecto, por si só, já oferece possibilidades importantes de raciocínio acerca dos mecanismos de reações. O mecanismo da reação, com a etapa de formação do estado de transição e a inversão dos hidrogênios também foi um aspecto importante no aprendizado de conceitos. Em especial, os estudantes do segundo experimento definitivo tiveram grandes ganhos nesse aspecto. Mesmo os estudantes que nunca tinham estudado mecanismos de reações orgânicas indicaram ter compreendido tal mecanismo e a inversão dos hidrogênios. Esse ganho de competência representacional permitiu a muitos deles resolver um problema anômalo para alguns e não resolvido para outros.

### 8.3 IMPLICAÇÕES PARA A ÁREA DA COGNIÇÃO

Para respondermos a pergunta secundária que construímos para a área de cognição, acerca do papel das habilidades visuoespaciais no processo de criação de novas representações e modelos mentais precisamos reforçar nossos resultados de pesquisa. Mostramos, em ambos os experimentos definitivos, que houve ganho de competência representacional a partir da mediação por computador, através de um *software* de modelagem molecular. Utilizamos a teoria da mediação cognitiva para explicar de que forma ocorre a aquisição de conhecimentos a partir dessa mediação.

Novos *drivers* de natureza hipercultural foram desenvolvidos para permitir esse processo de mediação e, com isso, a estrutura cognitiva dos estudantes foi se modificando. Para a TMC, a aquisição de conhecimentos ocorre quando novos *drivers* são criados, a partir de um processo piagetiano de equilibração. Para nós, a aprendizagem se dá pelo ganho de competência representacional que permite a resolução de problemas; portanto, os estudantes partiram dos seus conhecimentos tácitos e construíram um ganho de competência por meio da aquisição de novas representações e *drivers*. Essa obtenção ocorreu por sucessivos processos de aquisição e assimilação.

A simples existência desses novos *drivers* proveu os estudantes de ferramentas cognitivas que aumentaram certas competências e raciocínio. Neste conhecimento implícito, houve a produção de imagens mentais que, na nossa opinião, é fundamental para o processo de resolução de problemas. Essas imagens mentais foram fartamente mostradas nos gestos descritivos dos estudantes. Neste sentido, consideramos que as habilidades visuoespaciais são, num primeiro momento, um condicionante e, posteriormente, um facilitador do processo de criação de novas representações e imagens mentais.

São um condicionante porque a sua ausência inicial praticamente impede a formação das imagens mentais na estrutura cognitiva dos estudantes. Consequentemente, dificulta muito esse processo de construção. Por tudo que vimos dos nossos resultados, podemos afirmar que os estudantes não conseguem resolver problemas químicos dos conteúdos que abordamos sem que tenham desenvolvidas as habilidades de visualização. Tais habilidades também podem ser consideradas como facilitador.

Nossos resultados de pesquisa apontaram que quanto mais desenvolvida essa habilidade, mais facilmente as imagens mentais são construídas e transformadas em modelos mentais. Por consequência, a capacidade dos estudantes de construir novas representações e *drivers* é melhorada. Nesse sentido, a utilização de ferramentas de modelagem molecular – e mesmo de visualização – são fundamentais para o desenvolvimento dessa tão importante habilidade de pensamento.

#### 8.4 IMPLICAÇÕES PARA A METODOLOGIA DE PESQUISA

Para a área de metodologia de pesquisa, temos o desafio de responder se o protocolo *Report Aloud* em conjunto com a análise gestual é capaz de identificar os conhecimentos tácitos dos estudantes, assim como os adquiridos na mediação computacional. O ganho cognitivo dos estudantes propiciado pela mediação com o computador através do *software* de modelagem molecular foi evidenciado em ambos os experimentos na medida em que percebemos que os estudantes externalizaram –

por gestos descritivos combinados com explicações na fala – um conjunto de conhecimentos que foram adquiridos com o manuseio do programa.

Ao analisar as respostas dos estudantes pelos gestos produzidos, podemos perceber que há um conhecimento implícito inerente à manipulação computacional das moléculas quando esses utilizaram o *software*. Novas representações e *drivers* foram percebidos por nós a partir dos gestos descritivos produzidos pelos estudantes nas entrevistas, quando esses tentaram explicar como resolveram as questões dos testes pré e pós-modelagem.

A metodologia, composta pela técnica *report aloud* em conjunto com a análise gestual, inédita para a área de educação Química, foi capaz de nos conduzir para a identificação dos conhecimentos tácitos e novos, adquiridos com o manuseio do *software*. Ao longo de toda a apresentação dos resultados, vimos gestos produzidos e declarações transcritas que mostram tais conhecimentos. Também os indícios de mudanças na forma de pensar dos estudantes em relação aos conceitos abordados nas simulações computacionais foram relatados.

Em alguns momentos, percebemos que os estudantes reportaram que estavam vendo a molécula torcionando e, junto com ela, o gráfico mostrando o comportamento da energia. Este *report* representou a descrição de uma imagem mental dinâmica, ou seja, de uma simulação mental que muito provavelmente foi criada na mente dos estudantes a partir da mediação com o computador. Pelo conjunto de resultados que mostramos nos experimentos, temos clareza de que foi possível ter acesso às imagens mentais e simulações mentais dos estudantes quando estes resolveram problemas químicos, mesmo que não estivessemos presentes no ato da resolução dos problemas. Isso porque a técnica *report aloud* nos permitiu ter acesso às imagens mentais reportadas pelos estudantes a partir da análise conjunta do discurso verbal e não verbal dos estudantes.

## 8.5 IMPLICAÇÕES PARA A ÁREA DE EDUCAÇÃO QUÍMICA

Um dos resultados de pesquisa que nos chamou atenção diz respeito às representações de átomos, moléculas e ligações químicas que os estudantes mais utilizaram. Acreditamos que a tarefa simples de montar a geometria de uma molécula necessita da criação de uma imagem mental dessa molécula na nossa mente. Para tanto, precisamos criar uma representação dos átomos envolvidos, das ligações, assim como definir uma série de regras, tais como: a respeito da distribuição eletrônica de cada átomo; de quantas ligações esses átomos podem fazer (em quantidade e qualidade); de quais outros átomos há preferência de ligação; de quais arranjos moleculares são energeticamente viáveis, etc. Conforme aumenta o grau de complexidade da tarefa, outras representações e regras precisam ser utilizadas pelo estudante.

O autor da TMC explicou que os *drivers* são construídos pelos estudantes no processo de aquisição de conhecimentos. Eles podem ser construídos a partir de um ou mais *drivers* de distintas naturezas: de natureza psicofísica, utilizando seus conhecimentos do ambiente; de natureza social, adquiridos no convívio social com outros estudantes e professores; cultural, adquiridos a partir do acesso a livros e outras mídias que trazem um conjunto de conhecimentos e culturas da área; ou hipercultural, construídos por mediação com a hipercultura. O autor da TMC reconheceu como uma habilidade construída importante a utilização de múltiplas representações e *drivers*: *“A observação de sujeitos de pesquisa transitando entre múltiplas representações mentais acerca de um mesmo objeto ou fenômeno conforme a necessidade ou conveniência seria um claro sinal do desenvolvimento de uma Competência”* (SOUZA, 2013).

De modo geral, observamos que os estudantes preferem utilizar representações mais simples para átomos, ou seja, os símbolos químicos. A representação de bolas e palitos, de fato, caracteriza-se como mais complexa de ser utilizada, pois esta representação requer a utilização de cores e tamanhos para diferenciar as espécies atômicas. Nesse sentido, a imagem mental de átomos representados como letras é mais simples e dá conta de muitas tarefas menos

complexas. Esta explicação parece fazer sentido e permeou muitos dos porquês apresentados pelos estudantes que afirmaram preferir utilizar as representações de átomos com símbolos químicos em suas imagens mentais. De nossa parte, achamos plausível a explicação de que a representação mais simples será a preferida e a primeira a ser utilizada até que não seja suficiente para dar conta da tarefa, quando é necessário lançar mão de representações mais complexas. Essa competência de saber utilizar múltiplas representações e *drivers*, de acordo com o contexto e a necessidade, é um dos ganhos cognitivos que apontamos quando os estudantes utilizam ferramentas de modelagem molecular, além dos já elencados no início deste capítulo.

Passados quatro anos imersos nessa pesquisa, é chegada a hora de tentarmos contribuir com o debate da área de Educação Química sob o ponto de vista de saber, afinal, quais os benefícios e problemas que identificamos na utilização das ferramentas de modelagem molecular no ensino de Química. A partir dos nossos resultados de pesquisa, podemos apontar como principais benefícios os que seguem: a possibilidade do uso de múltiplas representações; a consolidação das habilidades visuoespaciais; a perspectiva de integração de conceitos químicos em torno do conceito de energia e, por fim, a possibilidade de desenvolvimento de processos de pensamento de alta ordem. No entanto, existem alguns problemas que igualmente apontamos: questões relativas às dificuldades de transposição didática por parte dos docentes; o desenvolvimento de objetos de aprendizagem que deem conta dos objetivos didáticos; o aparente conflito de teorias, visto que os *software* de modelagem molecular foram construídos com base na Teoria do Orbital Molecular e, por fim, questões técnicas, tais como, aquisição de licenças, infraestrutura de informática e manutenção dos espaços.

Com base nos experimentos que realizamos tanto com estudantes do ensino médio quanto com estudantes de graduação, defendemos que esta ferramenta pode ser utilizada em ambos os níveis. Os experimentos que fizemos com estudantes do nível da educação básica mostraram que esses estudantes conseguiram interagir com as informações que são apresentadas na interface gráfica do programa a ponto de terem conseguido produzir conhecimento por mediação com a simulação computacional, mesmo que esta última tenha como base teórica uma teoria que é restrita à estudantes de graduação de Química.



Um dos pontos mais importantes que percebemos nos resultados dos experimentos foi o indício de uma integração de conceitos que alguns estudantes mostraram em suas falas. Essa integração é importante e pode sinalizar para um ganho cognitivo mais efetivo, na medida em que o estudante agrega a visão dinâmica à habilidade visuoespacial para começar a perceber que vários conceitos que foram abordados podem ser integralizados em torno da energia. Esse mecanismo nos parece uma contribuição de suma importância para a área de Educação Química. A importância da integração dos conceitos é apontada pelo estudante D, no primeiro experimento. Quando perguntado quais foram as mudanças que ocorreram “dentro da cabeça” depois do curso, o estudante respondeu:

Eu acho que me facilitou muito é nos conceitos. De “linkar”(sic) conceitos, provavelmente... eu tinha o conhecimento, conhecimento A, B, C e D, mas onde é que eles se cruzam? Isso melhorou. (...)eu acho que isso me abriu os olhos nesse sentido, de poder ver mais holístico assim. de uma maneira mais global, vamos dizer assim... e nesse sentido, eu não vejo que eu não tinha os conceitos. Eu considero que eu tinha os conceitos, mas muito dispersos. Né, então é que nem tu comentaste, no individual ali vai ser muito básico. Daí a gente conseguiu integrar bastante e isso foi um grande ganho. (Estudante D, primeiro experimento).

Esse depoimento demonstrou uma potencialidade desse mecanismo de processamento extracerebral: dar as condições para que os estudantes possam utilizar as capacidades cerebrais com o objetivo de refletir acerca das informações que são apresentadas.

A TMC, em sua essência, definiu que usamos a mediação como forma de lidar com a sobrecarga cognitiva. No caso específico, o programa de modelagem molecular executa as tarefas – rompendo com as dificuldades matemáticas encontradas na solução das equações da mecânica quântica – e mostra os resultados de forma com que os estudantes possam fazer as conexões. O processamento extracerebral representa, assim, uma estratégia de evolução para superar limitações cerebrais. Desse modo, há um imperativo de maximização dessa "terceirização cognitiva" de modo a liberar mais recursos cerebrais para funções superiores e atividades de pensamento de alta ordem.

Conforme aponta Hessley (2004):

(...) A Formulação de imagens visuais para conceitos abstratos em química tem sido feita para tornar mais fácil aos alunos a compreensão e retenção dos significados e importâncias, para compreender mais plenamente o significado dos termos, e para mais facilmente fazer conexões entre os conceitos relacionados. (HESSLEY, 2004, pg. 1, tradução nossa).

Como resultado desse processo, ocorre a liberação de capacidade de processamento do cérebro para tarefas mais complexas, sejam estas reflexões mais aprofundadas, que levam a uma integração entre conceitos, ou simplesmente um processamento mais rápido.

### *8.6 IMPLICAÇÕES PARA A ÁREA DE CURRÍCULO*

Os resultados obtidos nos experimentos com estudantes de ensino médio e superior, apontaram para a possibilidade concreta do uso da modelagem molecular nos dois níveis de ensino. Obviamente que as estratégias e objetivos devem ser distintos, visto que, para o ensino médio, não fazem sentido as abordagens mais aprofundadas que defendemos serem importantes no ensino superior. Mesmo assim, chegamos num ponto da pesquisa em que podemos sim defender, para o bem da química teórica, que as ferramentas de modelagem molecular possam ser utilizadas com estudantes do ensino médio.

Dessa forma, chegamos no ponto de tentar responder a pergunta secundária dessa área, visando saber de que forma podem ser introduzidas as ferramentas de modelagem molecular nos currículos do ensino médio e superior. No item anterior, abordamos a importância da integração de conceitos em torno do conceito de energia para o ensino de Química. O conceito de energia, via de regra, não é abordado de forma integralizadora nas aulas de Química.

Cooper e Klymkowsky (2013), em um artigo publicado em setembro de 2013 no periódico *Journal of Chemistry Education*, defenderam uma reforma curricular juntamente com uma modificação na forma como os conteúdos de Química Geral são abordados, a fim de criar oportunidades de um desenvolvimento cognitivo mais efetivo: “*Nós nos focamos em três conceitos fundamentais - estrutura, propriedades e*

*energia - porque podemos usá-los para desenvolver progressões de ideias que se conectam e se interligam em todo o currículo”* (COOPER; KLYMKOWSKY, 2013, p. 1118). Esta estratégia de integração de conceitos fundamentais para desenvolver de forma progressiva um conjunto de conceitos subjacentes é um bom indício do que defendemos em relação à integração das ferramentas de modelagem molecular aos currículos de Química tanto para o ensino médio quanto para o superior.

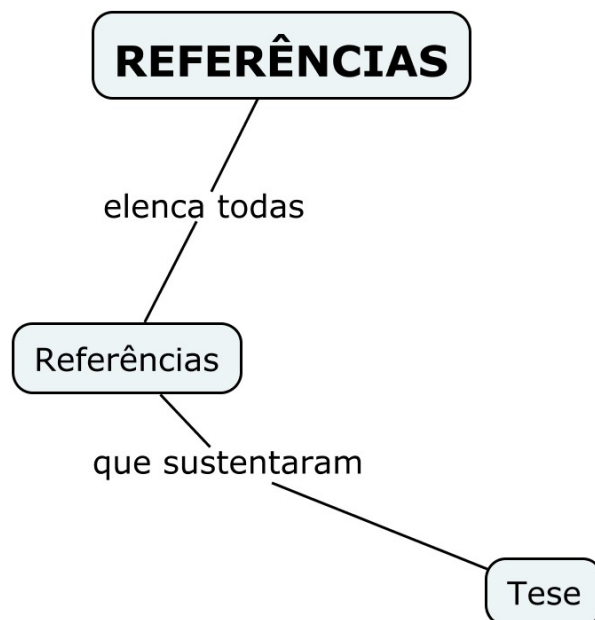
Para o ensino médio, temos plena consciência de que o caminho é mais tortuoso e espinhoso. A maioria das escolas possui pequena carga horária e professores com alta carga horária de aulas em uma ou mais escolas. A mudança na abordagem dos conteúdos de forma a trazer para o cotidiano dos estudantes do ensino médio essa noção integradora de conceitos fundamentais baseados no pilar estruturas/propriedades/energia depende de muitos fatores, que vão desde fatores institucionais até motivacionais e culturais.

No ensino superior identificamos potencialidades. No entanto, sabemos que o uso das ferramentas de modelagem molecular precisa ser contínuo e permear toda a formação dos estudantes, pois acreditamos que essa ferramenta tem condições de ser utilizada em praticamente todas as grandes áreas da Química.

Finalizamos esta conclusão com uma discussão que é importante para uma epistemologia da Química em contato com o uso de ferramentas de modelagem molecular. Não estamos aqui adotando uma interpretação *naïve* do que é representado em *software* de modelagem molecular como a representação do fenômeno molecular. Decerto, no nível de ensino que tratamos, uma boa parte, senão a totalidade dos estudantes considera que o *software* representa o que ocorre em nível molecular. Aos que podem tecer objeção ao fato de que os estudantes adquiram representações, *drivers*, simulações mentais que, os mesmos, considerem se tratar da realidade química, respondemos com duas considerações: uma de ordem epistemológica; afinal, o que ocorre em nível atômico e molecular? Existem dezenas de interpretações possíveis do fenômeno quântico (PESSOA JR, 2006) e, outras que estão surgindo atualmente frente ao que investigamos sobre o mundo microscópico. Dessa forma, muitos propõem que trabalhem com múltiplas interpretações e representações desse fenômeno, que sejam norteadas pela crescente capacidade de

resolver problemas. A outra consideração que tecemos é de ordem metodológica, e fundamentada na nossa visão de Laudan e da TMC: dado que estas representações do fenômeno químico auxiliam os estudantes a considerarem problemas químicos como não mais problemas em aberto, mas problemas resolvidos, esses estudantes estão ampliando sua capacidade de resolver problemas científicos. Se, ao interagir com essa poderosa ferramenta, esses estudantes criam representações e simulações mentais que os comunicam melhor com essas ferramentas, eles estão crescendo tanto em competência representacional quanto na competência do uso desse ferramental. Isso por si só já se caracteriza como um ganho, visto que o uso desses *software* tem crescido tanto na área de investigação científica quanto em uso industrial.

## REFERÊNCIAS



*Brincar com crianças não é perder tempo, é ganhá-lo; se é triste ver meninos sem escola, mais triste ainda é vê-los sentados enfileirados em salas sem ar, com exercícios estéreis, sem valor para a formação do homem.*

*(Carlos Drummond de Andrade)*

ACD LABS, I. ACD Chemskech. , 2013. Toronto.

AKSELA, M.; LUNDELL, J. Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 9, n. 4, p. 301, 2008.

APPELT, H. R.; OLIVEIRA, J. S.; MARTINS, M. M. Modelos Moleculares: passado e presente. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 4, n. 3, p. 7–16, 2009.

ARAUJO, I. S.; VEIT, E. A.; MOREIRA, M. A. Modelos Computacionais no Ensino-aprendizagem de Física: um referencial de trabalho. **Ivestigações em Ensino de Ciências**, v. 17, n. 2, p. 341–366, 2012.

ARRUDA, P. M. **Algumas considerações sobre conjuntos de bases para cálculos de propriedades elétricas**, 2009. 110p, Dissertação (Mestrado em Física) - Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2009.

BARNEA, N.; DORI, Y. J. Computerized molecular modeling-the new technology for enhancing model perception among chemistry educators and learners. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 1, n. 1, p. 109–120, 2000.

BARREIRO, E. J.; FRAGA, C. A. M.; MIRANDA, A. L. P.; RODRIGUES, C. R. A Química Medicinal de N-acilidrazonas: novos compostos-protótipos de fármacos analgésicos, anti-inflamatórios e anti-trombóticos. **Química Nova**, v. 25, n. 1, p. 129–148, 2002.

BENNETT, S. Digital Natives. In: I. Global (Ed.); Yan, Z (Eds.). **Encyclopedia of Cyber Behavior: Vol. 1**. p.212–219, 2012. United States.

BLOOM, B. S. **Taxonomy of Educational Objectives: Handbook 1 the cognitive domain**. New York, 1956.

BODGAN, R.; BIKLEN, S. K.; BOGDAN, R. **Investigação Qualitativa em Educação**. 1994.

BOX, V. G. S. Computer Assisted Molecular Modeling Exercises for Undergraduates. **Journal of Chemical Education**, v. 70, n. 10, p. 236–237, 1993.

BRASIL. **Pesquisa Nacional por Amostra de Domicílios**. Brasília: IBGE, 2011.

BRUNER, J. S. **In Search of Mind**. New York: Harper & Row, 1983.

CASANOVA, J. Computer-based Molecular Modeling in the Curriculum. **Journal of Chemical Education**, v. 70, n. 11, p. 904–909, 1993.

CASTILHO, D. L.; SILVEIRA, K. P.; MACHADO, A. H. As Aulas de Química como Espaço de Investigação e Reflexão. **Química Nova na Escola**, , n. 9, 1999.

CATTANI, M.; BASSALO, J. Atividade óptica de um meio dielétrico diluído: Pasteur e as simetrias moleculares. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 31, n. 3, p. 1–16, 2009.

CHASSOT, Á. **Para que(m) é útil o ensino?** 2ª ed. Canoas: Editora da Ulbra, 2004.

CLAUSS, A. D.; NELSEN, S. F. Integrating Computational Molecular Modeling into the Undergraduate Organic Chemistry Curriculum. **Journal of Chemical Education**, v. 86, n. 8, p. 955–957, 2009.

CLEMENT, J. J.; STEINBERG, M. S. step-wise Evolution of Mental Models of Eletric Circuits - A learning-aloud case study.pdf. **The Journal of the Learning Sciences**, v. 11, n. 4, p. 389–452, 2002.

CLEMENT, J. J.; STEPHENS, A. L. Documenting the use of expert scientific reasoning process by high school physics students. **Physics Education Research**, v. 6, n. 2, p. 20122–1 – 20122–15, 2010.

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

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

COOPER, M.; KLYMKOWSKY, M. Chemistry, Life, the Universe, and Everything: A New Approach to General Chemistry, and a Model for Curriculum Reform. **Journal of Chemical Education**, v. 90, p. 1116–1122, 2013.

CRESWELL, J. W. **Projeto de Pesquisa: métodos qualitativo, quantitativo e misto.** 3ª ed. Porto Alegre: Artmed, 2010.

DIAS, J. J. C. T. **Química Quântica: fundamentos e métodos.** Porto: Gulbenkian, Fundação Calouste, 1982.

DINES, T. J.; BELL, S.; HOWDHRY, B. Z.; WITHNALL, R. Computational Chemistry Using Modern Electronic Structure Methods. **Journal of Chemical Education**, v. 84, n. 8, p. 1364–1370, 2007.

DUNN, J. L. A Pictoral Visualization of Normal Mode Vibrations of Fullerene (C60) Molecule in Terms of Vibrations of a Hollow Sphere. **Journal of Chemical Education**, v. 87, n. 8, p. 819–822, 2010.

EZPELETA, J.; ROCKWELL, E. **Pesquisa Participante.** São Paulo: Cortez: Autores Associados, 1989.

FERREIRA, P. F. M.; JUSTI, R. DA S. Modelagem e o “Fazer Ciência.” **Química Nova**, v. 1, n. 28, p. 32–36, 2008.

FRANÇA, T. C. C.; ROCHA, M. DO R. M.; REBOREDO, B. M.; et al. Desing of Inhibitors for Nucleoside Hydrolase from *Leishmania donovani* using Molecular Dynamics Studies. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 19, n. 1, p. 64–73, 2008.

FRANCO, C. P. Conhecendo os nativos digitais a partir da perspectiva da complexidade. (Comunicação em Sessão Coordenada). Caderno de Resumos do IX Congresso Brasileiro de Linguística Aplicada: “Linguística Aplicada & Sociedade.” **Anais...** . p.86, 2011. Rio de Janeiro.

FREITAS FILHO, P. J. DE. **Introdução à Modelagem e Simulação de Sistemas: com Aplicações em Arena**. 2a ed. Florianópolis: Visual Books Ltda, 2008.

FREITAS, L. C. G. Prêmio Nobel de Química 1998. **Química Nova na Escola**, v. 1, n. 8, p. 3–6, 1998.

GALIAZZI, M. C.; MORAES, R. **Análise Textual Discursiva**. Ijuí: Editora Unijuí, 2011.

GATTI, B. A. Estudos quantitativos em educação. **Educação e Pesquisa**, v. 30, n. 1, p. 11–30, 2004.

GONÇALVES, A. D. S.; FRANÇA, T. C. C.; FIGUEROA-VILLAR, J. D.; PASCUTTI, P. G. Conformational Analysis of Toxogonine, TMB-4 and HI-6 using PM6 and RM1 methods. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 21, n. 1, p. 179–184, 2010.

GRECA, I. M.; MOREIRA, M. A. Além da detecção de Modelos Mentais dos estudantes: uma proposta representacional integradora. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 7, n. 1, p. 31–53, 2002.

HABATA, Y.; AKABORI, S. Teaching <sup>1</sup>H NMR Spectrometry Using Computer Modeling. **Journal of Chemical Education**, v. 78, n. 1, p. 121–123, 2001.

HEGARTY, M. Mechanical reasoning by mental simulation. **Trends in cognitive sciences**, v. 8, n. 6, p. 280–5, 2004.

HESSLEY, R. K. A Computational-Modeling Course for Undergraduate Students in Chemical Technology. **Journal of Chemical Education**, v. 81, n. 8, p. 1140, 2004.

HINCHLIFFE, A. **Molecular Modelling for Beginners**. 2nd ed. West Sussex-UK, 2008.

HOLMES, J. L. Molecular Modeling. **Journal of Chemical Education**, v. 76, n. 6, p. 871–872, 1999.

HÖLTJE, H.-D.; WOLFGANG, S.; DIETER, R.; FOLKES, G. **Molecular Modeling. Basic Principles and Applications**. 3a ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2008.

IUPAC. Glossary of Terms Used in Computational Drug Design. **Pure & Appl. Chem.**, v. 69, n. 5, p. 1137–1152, 1997.



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

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

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

JUSTI, R. DA S. Learning how to model in science classroom : key teacher ' s role in supporting the development of students ' modelling skills. **Educación Química**, p. 32–40, 2009.

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

KELLY, A. E.; LESH, R. Trends and Shifts in Research Methods. **Handbook of Research Design in Mathematics and Science Education**. p.35–44, 2000. New Jersey: LEA.

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

LAUDAN, L. **O Progresso e Seus Problemas: rumo a uma teoria do crescimento científico**. Tradução Roberto Leal Ferreira. São Paulo: UNESP, Editora, 2011.

LENZI, M. K.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Modelagem da polimerização simultânea de estireno em suspensão e emulsão. **Polímeros**, v. 14, n. 2, p. 112–121, 2004.

LIRA, T. O. DE; BERLINCK, R. G. S.; NASCIMENTO, G. G. F.; HAJDU, E. Further dibromotyrosine-derived metabolites from the marine sponge *Aplysina caissara*. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 17, n. 7, p. 1233–1240, 2006.

LOCATELLI, S. W. **Análise da manifestação de elementos de metavisualização na aprendizagem de Química**, 2011. 155p, Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências) - Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

LUIZ, J. B.; ANDRADE, F. M. DE; SÁ, E. L. DE; et al. 2-Mercaptobenzoxazole pentacyanoferrate(II/III) complexes: UV-Visible, Mössbauer, electron paramagnetic resonance, electrochemistry and molecular modeling. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 15, n. 1, p. 10–15, 2004.

MEINEL, C. Molecules and Croquet Balls. In: **Chadarevian, S.; Hopwood, N. Models: The Third Dimension of Science**, 2004. Stanford University Press.

MEJÍA, S. M.; ORREGO, J. F.; ESPINAL, J. F.; MONDRAGÓN, F. Heteropentámeros (Etanol)<sub>4</sub>-Água: estudo Estrutural y Termodinámico. **Química Nova**, v. 33, n. 4, p. 860–866, 2010.

MONAGHAN, J. M.; CLEMENT, J. 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.

MONTGOMERY, C. D. Mechanisms of Pentacoordinate Pseudorotation. A Molecular Modeling Study of PF<sub>5</sub>. **Journal of Chemical Education**, v. 78, n. 6, p. 844, 2001.

MOREIRA, M. A. Modelos Mentais. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 1, n. 3, p. 193–232, 1996.

MOREIRA, M. A. Pesquisa em Educação em Ciências: Métodos Qualitativos. Universidad de Burgos, Espanha; Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil. Texto de Apoio nº 14. Publicado em Actas del PIDECE. **Anais...** . p.4:25–55, 2002.

MORGON, N. H.; COUTINHO, C. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. São Paulo: Livraria da Física, 2007.

MORRISON, M.; MORGAN, M. S. Models as Mediating Instruments. In: **MORRISON, M.; MORGAN, M.S. Models as Mediators: perspectives on natural and social science**. p.10–37, 1999. Cambridge: Cambridge University Press.

MORTIMER, E. F.; MACHADO, A. H. Múltiplos olhares sobre um episódio de ensino: “Por que o gelo flutua na água?” In: Encontro sobre Teoria e Pesquisa em Ensino de Ciências: Linguagem, Cultura e Cognição. **Anais...** . p.139, 1997. Belo Horizonte, Brasil.

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

NETO, W. N. DE A. A noção clássica de valência e o limiar da representação estrutural. **Química Nova na Escola - Cadernos Temáticos**, , n. 7, p. 13–24, 2007.

NEUFELD, C. B.; BRUST, P. G.; STEIN, L. M. Bases epistemológicas da Psicologia Cognitiva experimental. **Psicologia: Teoria e Pesquisa**, v. 27, n. 1956, p. 103–112, 2011.

OLIVEIRA, R. S. DE; CARISSIMI, A. DA S.; TOSCANI, S. S. Sistemas Operacionais. **Revista de Informática Teórica e Aplicada**, v. VIII, p. 1–33, 2001.

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

PEÇANHA, E. P.; ANTUNES, O. A. C. Estratégias Farmacológicas para a Terapia Anti-AIDS. **Química Nova**, v. 25, n. 6B, p. 1108–1116, 2002.

PESSOA JR, O. **Conceitos de Física Quântica**. Vol. 2 ed.São Paulo: Livraria da Física, 2006.

POLANYI, M. **Personal Knowledge: towards a post-critical Philosophy**. Chicago: The University of Chicago Press, 1958.

PRENSKY, M. Digital Natives, Digital Immigrants. **On The Horizon**, v. 9, n. 5, p. 1–6, 2001.

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

RAMOS, A. DE F. **Um estudo das concepções dos docentes sobre a estruturação do curso de licenciatura em química da REGESD, na modalidade a distância**, 2009. Dissertação (Mestrado) Programa de Pós-Graduação em Educação, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.

RAMOS, A. F.; SERRANO, A. Modelagem Molecular no Ensino de Química: resultados preliminares de uma análise gestual. Anais do 32º EDEQ: Encontro de Debates sobre o Ensino de Química e Saberes Docentes: memórias, narrativas e práticas. **Anais...** , 2012. Porto Alegre: ISBN: 978-85-66106-01-5.

RAMOS, A. F.; SERRANO, A. Modelagem Molecular no Ensino de Ciências : Uma revisão da literatura no Período 2001-2011 acerca da sua aplicabilidade em atividades de ensino. **Acta Scientiae**, v. 15, n. 2, p. 348–367, 2013a.

RAMOS, A. F.; SERRANO, A. Como são internalizadas as competências adquiridas quando um aluno utiliza computadores? Um exemplo de mediação cognitiva em rede durante a utilização de software de modelagem molecular. In: IX Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências. **Anais...** . p.1–10, 2013b.

RAMOS, A. F.; SERRANO, A. The Use of Computational Molecular Modeling as an External Cognitive Processing Tool: Preliminary Results of a Gestual Analysis. Science Education Research For Evidence-based Teaching and Coherence in Learning (Proceedings of the ESERA 2013 Conference). **Anais...** . p.1–10, 2014.

RAUPP, D.; MOREIRA, M. A.; SERRANO, A. A Evolução da História da Linguagem Representacional Química: uma interpretação baseada na teoria dos campos conceituais. In: VII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências. **Anais...** . p.1–12, 2009. Florianópolis, SC.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C.; SOUZA, B. C. DE. Uso de um software de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica : um estudo de caso baseado na teoria de mediação cognitiva. **Enseñanza de las Ciencias**, v. 9, n. 1, p. 18–34, 2010.

REBELLO, A. P.; RAMOS, M. G. Simulação Computacional e Maquetes na Aprendizagem de Circuitos Elétricos: um olhar sobre a sala de aula. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 4, n. 1, p. 23–33, 2009.

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

ROCHA, J. R.; SERRANO, A. Um Estudo de Caso Exploratório sobre a Internalização de Conceitos sobre Eletrostática: A influência da Hiper cultura e Mediação Digital. **Revista Novas Tecnologias na Educação**, v. 11, n. 3, p. 1–10, 2013.

RODRIGUES, C. R. Modelagem Molecular. **Química Nova - Cadernos Temáticos**, , n. Nº 3, maio, 2001.

RODRIGUES, R. F. O Uso de Modelagens Representativas como Estratégia Didática no Ensino da Genética: um estudo de caso. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 7, n. 2, p. 53–66, 2012.

ROGADO, J. A Grandeza Quantidade de Matéria e sua Unidade, o Mol: algumas considerações sobre dificuldades de ensino e aprendizagem. **Ciência & Educação**, v. 10, n. 1, p. 63–73, 2004.

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

SANGER, M. J.; BADGER II, S. M. Using Computer-Based Visualization Strategies to Improve Students' Understanding of Molecular Polarity and Miscibility. **Journal of Chemical Education**, v. 78, n. 10, p. 1412, 2001.

SANTOS, F. M. T.; GOI, M. E. J. Resolução de Problemas no Ensino de Química fundamentos epistemológicos para o emprego da metodologia na Educação Básica. In: XVI ENCONTRO NACIONAL DE ENSINO DE QUÍMICA / X ENCONTRO DE EDUCAÇÃO QUÍMICA DA BAHIA. **Anais...** . p.1–11, 2012. Salvador: Editora UFBA.

SANTOS, F. M. T.; GRECA, I. M. Promovendo aprendizagem de conceitos e de representações pictóricas em Química com uma ferramenta de simulação computacional. **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 4, n. 1, 2005.

SANTOS, H. F. O Conceito da Modelagem Molecular. **Química Nova**, , n. 4, p. 4–5, 2001.

SCOTTI, L.; SCOTTI, M. T.; CARDOSO, C.; et al. Modelagem molecular aplicada ao desenvolvimento de moléculas com atividade antioxidante visando ao uso cosmético. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 43, n. 2, p. 1–19, 2007.

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

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

SILVA, J. B. P. DA; RAMOS, M. N.; NETO, B. DE B.; et al. Quantitative structure-activity relationships (QSAR) of 4-amino-2,6-diarylpyrimidine-5-carbonitriles with anti-inflammatory activity. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 19, n. 2, p. 337–343, 2008.

SILVA, S. M. DA; EICHLER, M. L.; DELPINO, J. C. As Percepções dos Professores de Química Geral sobre a Seleção e a Organização Conceitual em sua Disciplina. **Química Nova**, v. Vol. 26, n. n° 4, p. pg. 585–594, 2003.

SMITH, S. J.; SUTCLIFFE, B. T. The Development of Computational Chemistry in the United Kingdom. **Reviews in Computational Chemistry**, v. 10, p. 217–316, 1997.

SOLOMONS, T. W. G. **Organic Chemistry**. 6a ed. New York: Wiley, 1996.

SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Organic Chemistry**. 10a ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc, 2011.

SOUZA, B. C. DE. Capítulo de Livro e algo a mais [mensagem pessoal]. . Mensagem recebida por <asdraden@gmail.com>; <adrfram@gmail.com>; <jefersonwolff@terra.com.br> em 5 de outubro de 2013.

SOUZA, B. C. DE. **A Teoria da Mediação Cognitiva: Os impactos cognitivos da Hipercultura e da Mediação Digital**, 2004. 282p, Tese (Doutorado em Psicologia) - Centro de Filosofia e Ciências Humanas, Universidade Federal de Pernambuco, Recife. Disponível em: <<http://www.liber.ufpe.br/teses/arquivo/20040617095205.pdf>>..

SOUZA, B. C. DE. A Teoria da Mediação cognitiva. In: **MEIRA, L; SPINILLO, A. (Org.) Psicologia Cognitiva: cultura, Desenvolvimento e Aprendizagem**, 2006. Recife: Editora da UFPE.

SOUZA, B. C. DE; LIMA E SILVA, L. X.; ROAZZI, A. MMORPGS and cognitive performance: A study with 1280 Brazilian high school students. **Computers in Human Behavior**, v. 26, n. 6, p. 1564–1573, 2010. Elsevier Ltd.

SOUZA, B. C.; SILVA, A. S.; SILVA, A. M.; ROAZZI, A.; SILVA, S. L. C. Putting the Cognitive Mediation Networks Theory to the test: Evaluation of a framework for understanding the digital age. **Computers in Human Behavior**, v. 28, n. 6, p. 2320–2330, 2012. Elsevier Ltd.

STRIJDONCK, G. P. F. VAN; KAMER, P. C. J.; LEEUWEN, P. W. N. M. VAN; et al. Teaching Bonding in Organometallic Chemistry Using Computational Chemistry. **Journal of Chemical Education**, v. 79, n. 5, p. 588, 2002.

VAN-SOMEREN, M. W.; BARNARD, Y. F.; SANDBERG, J. A. C. **The Think Aloud Method: a practical guide to modeling cognitive processes**. London: Academic Press, 1994.

VASCONCELOS, J. L. C.; OLIVEIRA, R. V. Representações Mentais: Uma abordagem Cognitivista. **Revista de Saúde Mental em Foco**, v. 1, n. 1, 2012.

VEENMAN, M. V. J.; WILHELM, P.; BEISHUIZEN, J. J. The relation between intellectual and metacognitive skills from a developmental perspective. **Learning and Instruction**, v. 14, p. 89–109, 2004.

WAGNER, S. M.; NUSBAUM, H.; GOLDIN-MEADOW, S. Probing the mental representation of gesture: Is handwaving spatial? **Journal of Memory and Language**, v. 50, n. 4, p. 395–407, 2004.

WAVEFUNCTION, I. Spartan 10 - Tutorial and User's Guide. , 2011. Irvine/CA.

WAVEFUNCTION, I. Spartan, V.10. , 2014. Irvine, CA.

WOLFF, J. F. S.; ANDRADE NETO, A. S. O Significado da Modelagem utilizada no Ensino de Física e Química conforme lido a partir de Referências da Educação Matemática. In: VIII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências. **Anais...** . p.p. 1–12, 2011. Campinas.

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

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

## **APÊNDICE A – TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO**

**TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO:** para os estudantes

(sujeitos da pesquisa)

Prezado(a) Estudante

Meu nome é Adriana de Farias Ramos, sou estudante do Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, na Universidade Luterana do Brasil – ULBRA, tendo como orientador o Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto.

O projeto de pesquisa intitulado Estudo da Influência da Utilização de Software de Modelagem Molecular no Processo de Aprendizagem de Conceitos Químicos por Estudantes de Ensino Médio e Superior tem como objetivo investigar de que forma ocorre o aprendizado de conceitos químicos por parte de estudantes de ensino médio e superior quando estes utilizam ferramentas de modelagem molecular.

Nesse sentido, inicialmente, você participará como estudante do Curso de Introdução à Química Computacional e Modelagem Molecular, previamente convidado(a), de entrevistas semiestruturadas a fim de identificar os conhecimentos prévios e adquiridos depois de sua participação no referido curso.

As suas ações ao longo da entrevista serão filmadas. As imagens serão, posteriormente, analisadas pela pesquisadora e o áudio transcrito e igualmente analisado. As imagens e as cópias ficarão sob minha responsabilidade e serão utilizadas por mim e meu orientador.

Esse estudo resultará na Tese de Doutorado no Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, na Universidade Luterana do Brasil – ULBRA, e os resultados serão divulgados em eventos e publicações científicas.

As informações fornecidas serão mantidas em sigilo e sua identidade não será revelada em nenhuma circunstância. Você tem a liberdade de retirar o seu consentimento de participar do estudo em qualquer momento que achar oportuno, sem prejuízo, mesmo depois de ter assinado esse documento. No caso de haver desistência de sua parte, poderá entrar em contato.



Destacamos que sua participação não acarretará nenhum prejuízo ou dano pelo fato de colaborar, assim como não terá nenhum ganho ou benefício direto. Sendo que as informações serão utilizadas para fins acadêmicos, mantendo o sigilo e a identidade dos colaboradores voluntários dessa pesquisa.

Diante do exposto, eu \_\_\_\_\_, declaro que fui esclarecido(a) o suficiente sobre o estudo a ser realizado por Adriana de Farias Ramos e concordo em participar.

Esse documento possui duas vias, ficando uma com o colaborador voluntário e outra com o pesquisador.

Canoas, \_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 20\_\_\_\_.

\_\_\_\_\_  
Assinatura do(a) Colaborador(a)  
Voluntário(a) da Pesquisa

\_\_\_\_\_  
Assinatura da pesquisadora

\_\_\_\_\_  
Assinatura do Prof. Orientador

Contato:  
Pesquisador: Adriana de Farias Ramos  
E-mail: adrfram@gmail.com  
Telefone: (51) 9979-5614

## **APÊNDICE B – CD DE REGISTROS**

