

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

**USO DE MODELAGEM MOLECULAR NA EDUCAÇÃO QUÍMICA:
REGIOQUÍMICA DA REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO
AROMÁTICA ELETROFÍLICA**

CLEITOR JACOB KONRAD



Canoas, 2023

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



CLEITOR JACOB KONRAD

**USO DE MODELAGEM MOLECULAR NA EDUCAÇÃO QUÍMICA:
REGIOQUÍMICA DA REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO
AROMÁTICA ELETROFÍLICA**

Dissertação apresentada no Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil para obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Área de concentração: Tecnologias de Informação e Comunicação para Ensino de Ciências e Matemática (TIC).

Orientador: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto

Canoas, 2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação – CIP

K82u Konrad, Cleitor Jacob.

Uso de modelagem molecular na educação química : Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica / Cleitor Jacob Konrad. – 2023.
289 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Luterana do Brasil, Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, Canoas, 2023.

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

1. Reação de Substituição Aromática Eletrofílica. 2. Modelagem molecular. 3. *Software* Arguslab. 4. Teoria da Mediação Cognitiva. 5. Tecnologias digitais. 6. Ensino de química. I. Andrade Neto, Agostinho Serrano de. II. Título.

CDU 547

Bibliotecária responsável – Heloisa Helena Nagel – 10/981

FOLHA DE APROVAÇÃO

CLEITOR JACOB KONRAD

Linha de Pesquisa:

Dissertação apresentada no Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Luterana do Brasil para obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Data da Aprovação: ____ / ____ / _____

BANCA EXAMINADORA

Prof(a). Dr(a). Arlete Beatriz Becker Ritt
Universidade ULBRA

Prof(a). Dr(a). Adriana Ramos de Farias
Universidade IFRS

Prof. Dr. Paulo Augusto Netz
Universidade UFRGS

Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto
Universidade Luterana do Brasil

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Espírito Santo de Deus por todo discernimento e sabedoria na realização deste estudo.

Meu agradecimento especial, aos estudantes que participaram voluntariamente dos experimentos e a Coordenadora Danieli Forgiarini do Curso Técnico em Química da Escola Estadual Técnica Affonso Wolf.

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

Aos meus familiares, em especial a minha esposa Márcia Maria Sardinha Lisboa Konrad pela companhia e incentivo.

Aos colegas do grupo de pesquisa sob a responsabilidade do professor Agostinho Serrano de Andrade Neto.

Registro meu muito obrigado à Escola Estadual Técnica Affonso Wolf e todos os meus colegas, e ao Diretor Paulo Renato Dapper, por possibilitar a flexibilização dos meus horários para que eu pudesse cumprir as atividades de mestrado.

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

“[...] o conhecimento é uma aventura em aberto. O que significa que aquilo que saberemos amanhã é algo que desconhecemos hoje; e esse algo pode mudar as verdades de ontem.

A ciência será sempre uma busca, jamais uma descoberta.

É uma viagem, nunca uma chegada.” Karl Raimund Popper.

Karl Raimund Popper

RESUMO

A presente pesquisa buscou investigar se a utilização de *software* de modelagem molecular, por meio de um experimento didático, foi capaz de promover a aprendizagem de representações e drivers pertinentes à resolução de problemas de Regioquímica de Reação de Substituição Aromática Eletrofílica, além de investigar o aprendizado de conceitos químicos após o uso do *software* de modelagem molecular na modelagem das reações de SAE, identificar as mediações predominantes nas categorias analisadas, interpretar a produção de gestos descritivos combinados ao discurso verbal dos estudantes de modo a obter as imagens mentais oriundas de diferentes mediações, e investigar de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem. A pesquisa foi desenvolvida com estudantes do Ensino Médio da rede estadual de ensino e foi conduzida de forma remota. O referencial teórico adotado para nortear a pesquisa é a Teoria da Mediação Cognitiva (TMC), em razão de sua perspectiva relacionada aos diferentes níveis de mediações e ao papel central dado ao uso de tecnologia de informação no desenvolvimento cognitivo. O referencial metodológico utilizado foi a Análise de Conteúdo de Bardin, a metodologia Report Aloud e a Análise Gestual Descritiva por Stephens e Clement. Segundo os resultados obtidos após as análises realizadas sobre os pré-testes, pós-testes, e entrevistas apontam que, a utilização do *software* Arguslab por meio de um experimento didático promoveu a aprendizagem relacionada a reação de Substituição Aromática Eletrofílica, promoveu o aprendizado de conceitos químicos, foi possível identificar a produção de gestos descritivos e obter as imagens mentais oriundas das diferentes mediações. De maneira geral, foi possível observar que o raciocínio visuoespacial de alguns dos alunos foi modificado com o uso da modelagem. Concluímos que a proposta envolvendo a utilização do *software* Arguslab por meio de um experimento didático proporcionou aos alunos o desenvolvimento de habilidades visuoespaciais. De maneira que, sua inserção em um ambiente de aprendizagem possui grandes potencialidades para o ensino na área de Ciência da Natureza.

Palavras-chave: Reação de Substituição Aromática Eletrofílica. Modelagem Molecular. *Software* Arguslab. Teoria da Mediação Cognitiva.

ABSTRACT

The present research sought to investigate whether the use of molecular modeling *software*, through a didactic experiment, was able to promote the learning of representations and drivers relevant to the resolution of Regiochemistry problems of Electrophilic Aromatic Substitution Reaction, in addition to investigating the learning of chemical concepts after using the molecular modeling *software* in the modeling of SAE reactions, identifying the predominant mediations in the analyzed categories, interpreting the production of descriptive gestures combined with the verbal speech of the students in order to obtain the mental images arising from different mediations, and to investigate how students' visuospatial reasoning was modified with the use of modeling. The research was developed with high school students from the state education network and was conducted remotely. The theoretical framework adopted to guide the research is the Theory of Cognitive Mediation (CMT), due to its perspective related to the different levels of mediations and the central role given to the use of information technology in cognitive development. The methodological framework used was Content Analysis by Bardin, the Report Aloud methodology and Descriptive Gesture Analysis by Stephens and Clement. According to the results obtained after the analyzes carried out on the pre-tests, post-tests, and interviews, they point out that the use of the Arguslab *software* through a didactic experiment promoted learning related to the reaction of Electrophilic Aromatic Substitution, promoted learning chemical concepts, it was possible to identify the production of descriptive gestures and obtain the mental images arising from the different mediations. In general, it was possible to observe that the visuospatial reasoning of some of the students was modified with the use of modeling. We conclude that the proposal involving the use of Arguslab *software* through a didactic experiment provided students with the development of visuospatial skills. Therefore, its insertion in a learning environment has great potential for teaching in the field of Natural Science.

Keywords: Electrophilic Aromatic Substitution Reaction. Molecular Modeling. Arguslab *software*. Cognitive Mediation Theory.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Processamento cognitivo por mediação externa.	50
Figura 2 - Possibilidade de orientação do grupo orientador X no anel aromático, <i>orto</i> e <i>para</i>	59
Figura 3 - Grupo orientador X ilustrando a posição <i>meta</i>	60
Figura 4 - Moléculas do fenol e do nitrobenzeno.	61
Figura 5 - Reação de mononitração do fenol.	62
Figura 6 - Resultados do Aluno APL no pré-teste e no pós-teste no experimento piloto.	77
Figura 7 - Sequências para a modelagem da reação de SAE no <i>software</i> Arguslab.	95
Figura 8 - Adendo do Apêndice de modelagem da molécula da amônia	96
Figura 9 – Representação da molécula da amônia pelo estudante W durante o pré-teste.	98
Figura 10 – Representação da molécula da amônia pelo estudante W durante o pós-teste.	98
Figura 11 – Sequência de gestos do aluno W, representando o tamanho dos átomos de nitrogênio e hidrogênio na molécula da amônia	99
Figura 12 – Sequência de gestos do aluno W, representando a molécula da amônia com uma borracha e um lápis.	101
Figura 13 - Sequência de gestos do aluno W, representando o par de elétrons livres sobre o átomo de nitrogênio distorcendo as ligações de hidrogênio.	102
Figura 14 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pós-teste pela aluna V.	105
Figura 15 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pela aluna MT.	106
Figura 16: Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pelo aluno GH.	108
Figura 17 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pela aluna CB.	109

Figura 18 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pelo <i>expert</i>	110
Figura 19 - Representações da molécula da água e da amônia no pré-teste e no pós-teste pelo aluno W.....	112
Figura 20 - Sequência de gestos do estudante W, representando a molécula da água com os pares de elétrons livres sobre o átomo de oxigênio.....	113
Figura 21 - Representação da molécula da água e da amônia no pré-teste e pós-teste da aluna MT.	117
Figura 22 - Sequência de gestos da aluna MT, representando parte da molécula da água.	118
Figura 23 - Sequência de gestos da aluna MT, representando a geometria da molécula da amônia.....	119
Figura 24 - Representação da molécula da água e da amônia no pré-teste e pós-teste pela aluna JR.	120
Figura 25 - Sequência de gestos da aluna JR, representando a molécula da água mencionando o ângulo de ligação e os pares de elétrons não ligantes sobre o átomo de oxigênio.....	121
Figura 26 - Sequência de gestos do aluno GH, representando a molécula da água.	123
Figura 27 - Representação da molécula da água e da amônia no pré-teste e pós-teste pelo aluno GH.	123
Figura 28 - Sequência de gestos do <i>expert</i> M, representando a eletronegatividade na molécula da água.	125
Figura 29 - Sequência de gestos do <i>expert</i> M, representando a molécula da água mencionando o ângulo entre os átomos.	126
Figura 30 - Representação da molécula da água pelo aluno W no pré-teste e pós-teste	128
Figura 31 - Sequência de gestos do aluno W, representando a molécula da água com a indicação do polo positivo e negativo.....	130
Figura 32 - Sequência de gestos do aluno W, representando a molécula do benzeno	131
Figura 33 - Representação do mapa de potencial eletrostático da molécula da água pela estudante V.	133

Figura 34 - Sequência de gestos da aluna V, representando a molécula da água e a nuvem eletrônica.	134
Figura 35 - Representação do mapa de potencial eletrostático da molécula da água pelo estudante GH.	135
Figura 36 - Representação do mapa de potencial eletrostático da molécula da água no pré-teste e no pós-teste pelo <i>expert M.</i>	136
Figura 37 - Representação da molécula do benzeno no pré-teste e no pós-teste pelo aluno GH.	138
Figura 38 - Sequência de gestos do aluno GH, representando parte da molécula do benzeno com as ligações duplas e citando o formato de um losango.	140
Figura 39 - Representação da molécula do benzeno no pré-teste e no pós-teste pelo <i>expert M.</i>	142
Figura 40 - Representação da molécula do eletrófilo NO_2^+ pelo aluno W.	143
Figura 41 - Sequência de gestos do aluno W, representando a entrada do eletrófilo no anel aromático com a indicação das posições <i>orto</i> , <i>meta</i> e <i>para</i>	146
Figura 42 - Representação do mapa de potencial eletrostático do fenol pelo aluno W.....	148
Figura 43 - Resposta da questão sete no pós-teste pelo <i>expert M.</i>	150
Figura 44 - Resposta da questão oito no pré-teste pelo <i>expert M.</i>	151
Figura 45 - Resposta da questão oito no pós-teste pelo <i>expert M.</i>	151
Figura 46 - Resposta da questão nove no pré-teste pelo <i>expert M.</i>	152
Figura 47 - Resposta da questão nove no pós-teste pelo <i>expert M.</i>	152
Figura 48 - Molécula do fenol e o mapa de potencial eletrostático modelados no <i>software</i> Arguslab pelo <i>expert M.</i>	154
Figura 49 - Molécula do nitrobenzeno e o mapa de potencial eletrostático modelados no <i>software</i> Arguslab pelo <i>expert M.</i>	155
Figura 50 - Molécula do clorobenzeno e o mapa de potencial eletrostático modelados no <i>software</i> Arguslab pelo <i>expert M.</i>	156
Fonte A pesquisa.	156
Figura 51 - Molécula do clorobenzeno com o mapa de potencial eletrostático e as cargas de Muliken modelados no <i>software</i> Arguslab pelo <i>expert M.</i>	157
Figura 52 - Gesto produzido por todos os estudantes para representar átomos.....	164

Figura 53 - Gestos produzido pelos os estudantes para representar átomos.	165
Figura 54 - Gestos produzido por todos os estudantes para representar as ligações químicas.....	166
Figura 55 - Gestos produzidos pelo estudante GH para representar as ligações químicas na molécula do benzeno.	166
Figura 56 - Gestos produzidos pelo estudante W para representar o átomo e a ligação química, utilizando uma borracha e um lápis.	167
Figura 57 - Gestos produzidos pelos estudantes para representar planos e partes da molécula.....	168
Figura 58 - Sequência de gestos produzidos pelo aluno GH, representando a molécula do benzeno com as ligações duplas e citando o formato de um losango.....	168
Figura 59 – Gestos produzidos pelos estudantes para representar polaridade e nuvem eletrônica.....	169
Figura 60 - Gestos produzidos pelo estudante L para representar polaridade e nuvem eletrônica.....	170
Figura 61 - Gestos produzidos pelos alunos para representar polaridade e nuvem eletrônica.....	171

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - As mediações da Teoria da Mediação Cognitiva	51
Quadro 2 - Substituintes <i>orto e para</i> dirigentes.	59
Quadro 3 - Substituintes <i>meta</i> dirigentes.	59
Quadro 4 - Atividades desenvolvidas no experimento piloto.	75
Quadro 5 - Atividades desenvolvidas no experimento definitivo.	87

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Escala de eletronegatividade de Linus Pauling.....	61
Tabela 2 - Dados sobre a categoria VSEPR	91
Tabela 3 - Dados sobre a categoria Aromaticidade	92
Tabela 4- Dados sobre a categoria Mapa de Potencial Eletrostático	92
Tabela 5 - Dados sobre a categoria Reação Química.....	92
Tabela 6 - Visão global da avaliação das respostas, em relação às categorias que emergiram durante a análise de confecção, com as respectivas frequências e percentuais.....	93
Tabela 7 - Resumos das mediações envolvendo o contexto em cada subcategoria.....	159

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EM – Ensino Médio

SAE – Substituição Aromática Eletrofílica

TIC – Tecnologias de informação e comunicação

TMC – Teoria da Mediação Cognitiva

VSEPR – Repulsão de pares de elétrons na camada de valência

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	16
1 USO DE MODELAGEM MOLECULAR NA EDUCAÇÃO QUÍMICA: REGIOQUÍMICA DA REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO AROMÁTICA ELETROFÍLICA	19
1.1 JUSTIFICATIVA	19
1.2 PROBLEMA DE PESQUISA	20
1.3 OBJETIVOS	21
1.3.1 Objetivo Geral	21
1.3.2 Objetivos Específicos	21
2 REVISÃO DE LITERATURA	22
2.1 METODOLOGIA DA REVISÃO	22
2.2 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA APLICAÇÃO DIDÁTICA	23
2.3 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA PESQUISA EM EDUCAÇÃO	36
2.4 CONSIDERAÇÕES	42
3 REFERENCIAL TEÓRICO	45
3.1 TEORIA DA MEDIAÇÃO COGNITIVA EM REDE (TMC) Por quê em REDE?	45
3.1.1 A Revolução Digital	45
3.1.2 Fundamentos da TMC	47
3.1.3 Mecanismos e Formas de Mediação	49
4 REFERENCIAL METODOLÓGICO	53
4.1 REPORT ALOUD	53
4.2 ANÁLISE GESTUAL POR STEPHENS E CLEMENT	54
4.3 ANÁLISE DE CONTEÚDO	55
5 REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO ELETROFÍLICA AROMÁTICA (SAE)	57
5.1 CONSIDERAÇÕES	57
5.2 METODOLOGIA DE ENSINO DA SAE EM UM LIVRO DIDÁTICO	58
6 A MODELAGEM MOLECULAR	63
6.1 O QUE É MODELAGEM MOLECULAR	63
6.2 SOFTWARES DE MODELAGEM MOLECULAR	65
6.2.1 ACD/ChemSketch	65
6.2.2 Avogadro	66
6.2.3 Arguslab	68
7 DELINEAMENTO METODOLÓGICO	70
7.1 TESTE PILOTO	70
7.1.1 Sujeitos da Pesquisa do Teste Piloto	70
7.1.2 Experimento Piloto	72
7.1.3 Resultados	76

7.1.4 Considerações e Ajustes Metodológicos.....	78
7.2 EXPERIMENTO DEFINITIVO	78
7.2.1 Sujeitos da Pesquisa do Experimento Definitivo	79
7.2.2 Contexto da Pesquisa.....	80
7.3 MATERIAIS DESENVOLVIDOS	80
7.3.1 Entrevistas	81
7.3.2 Pré-Teste e Pós-Teste.....	83
7.3.3 Roteiros de Modelagem Molecular	85
7.4 DESENVOLVIMENTO DO EXPERIMENTO PILOTO	86
7.4.1 Experimento Didático.....	86
8 ANÁLISE DE RESULTADOS	90
8.1 CATEGORIAS E SUBCATEGORIAS.....	90
8.2 INFERÊNCIA E INTERPRETAÇÃO DAS TABELAS COM AS CATEGORIAS E RESPECTIVAS SUBCATEGORIAS	91
8.3 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA VSEPR.....	94
8.3.1 Análise na Subcategoria Estrutura 2D e 3D.....	96
8.3.2 Análise na Subcategoria Geometria Molecular e Polaridade	112
8.4 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA MAPA DE POTENCIAL ELETROSTÁTICO	127
8.4.1 Análise na Subcategoria Densidade Eletrônica	127
8.5 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA AROMATICIDADE	138
8.5.1 Análise na Subcategoria Ressonância.....	138
8.6 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA REAÇÃO QUÍMICA.....	142
8.6.1 Análise na Subcategoria Eletrófilo	142
8.6.2 Análise na Subcategoria Reação em Anel Aromático.....	145
8.7 RESUMO DAS MEDIAÇÕES E CONCEITOS NO PRÉ-TESTE E NO PÓS-TESTE	
158	
9 RELAÇÕES ENTRE OS RESULTADOS DA DISSERTAÇÃO VERSUS RESULTADOS DA PESQUISADORA ADRIANA RAMOS.....	164
9.1 REPRESENTAÇÃO DE ÁTOMOS.....	164
9.2 REPRESENTAÇÃO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS	165
9.3 REPRESENTAÇÃO DE MOLÉCULAS	167
9.4 REPRESENTAÇÃO DA NUVEM ELETRÔNICA.....	168
CONSIDERAÇÕES	172
REFERENCIAIS.....	178
APÊNDICES	185

INTRODUÇÃO

De acordo com Mantovani (2013), educadores e pesquisadores voltam cada vez mais sua atenção para os fatores que influenciam muito o trabalho em sala de aula e o processo de ensino/aprendizagem, como tecnologia.

O estudo sobre a visualização está crescendo cada vez mais, com pesquisas sendo feitas na área com diversos enfoques, em busca de novas ferramentas capazes de auxiliar a compreensão desse complexo processo. Com isso, procura-se facilitar o ensino, principalmente nas áreas que envolvem grande capacidade de abstração, como a Química (MANTOVANI, 2013). “A habilidade ou inteligência espacial envolve pensar em imagens, bem como a capacidade de perceber, transformar e recriar diferentes aspectos do mundo visual e espacial” (SEABRA; SANTOS, 2004, p.2). As habilidades espaciais compreendem três categorias distintas (CHOI, 2001 apud RAUPP, 2010): rotação mental, é a habilidade de manipular, rotacionar, torcer ou inverter objetos tridimensionais. Sendo assim, o sujeito deve ser capaz de visualizar e rotacionar mentalmente os objetos em posições diferentes. Já a percepção espacial, refere-se à habilidade de determinar relacionamentos espaciais a partir de informações visuais. E por fim, a visualização espacial, que consiste na manipulação de problemas visuais complexos imaginando os movimentos relativos das partes internas de uma imagem. De acordo com Mathewson (1998), do conceito de visualização espacial deriva o conceito de pensamento ou habilidade visuoespacial:

Pensamento visuoespacial inclui visão, é o processo de usar os olhos para identificar, localizar, e pensar em objetos e orientar-nos no mundo. Também inclui imagens, que é a formação, inspeção, transformação e manutenção de imagens no olho da mente, na ausência de um estímulo visual (MATHEWSON, p. 33, 1998 apud RAUPP, 2010).

A química como ciência tem uma linguagem formal, especial, ou seja, existe uma linguagem pictórica que, para essa ciência em particular, é extremamente importante. Dessa maneira, faz-se necessário que ocorra uma transição entre os três níveis de conhecimento: o submicroscópico, o macroscópico e o simbólico (JONHSTONE, 1991 apud MANTOVANI, 2013). Para que essa transição seja facilitada, o estudante precisa apoiar-se na visualização das estruturas envolvidas nos

processos e fenômenos observados e em modelos facilitadores para a compreensão destes (FERREIRA; ARROIO, 2009 apud MANTOVANI, 2013).

Para Souza et al. (2004), usar as tecnologias na escola auxilia no desenvolvimento pessoal e profissional do estudante, além de atuar como coadjuvante para a renovação da prática pedagógica. Neste contexto, o professor precisa estar sempre se atualizando para exercer a função de mediador.

Os Parâmetros Curriculares Nacionais do Ensino Médio (PCNEM), apontam o uso das tecnologias como ferramenta pedagógica que auxilia na aprendizagem dos estudantes, contribuindo de forma significativa para o processo de construção do conhecimento, nas diversas áreas (BRASIL, 2000).

O ensino de Química com foco em pesquisa e desenvolvimento de tecnologia tem sido uma *meta* perseguida no campo do ensino de Química, mesmo sendo designado como um dos objetivos dos Parâmetros Curriculares Nacionais. No entanto, como sabem os especialistas da área, o ensino baseado no modelo de transmissão ainda existe, com forte ênfase na memorização de símbolos, estruturas e fórmulas (CHASSOT, 2004).

Nesse contexto, a visualização articulada com a modelagem molecular, com valores calculados de probabilidade, de densidades e outros, são o grande diferencial didático das ferramentas de modelagem e abre um conjunto de possibilidades muito interessantes para o processo de ensino-aprendizagem (RAMOS, 2015).

Desse modo, torna-se evidente a relevância do desenvolvimento de recursos e mecanismos que facilitem a assimilação desses conteúdos pelos estudantes. Sendo assim, o desenvolvimento de simulações e imagens mentais de acordo com (MONAGHAN; CLEMENT, 1999) pelos alunos é de grande relevância. Através delas, a visualização dos fenômenos se torna mais possível, simplificando a sua compreensão.

Para esse propósito, foi elaborado um procedimento didático que envolvia modelagem molecular através da utilização de um *software* de modelagem molecular. As atividades foram desenvolvidas com estudantes do terceiro ano do Curso Técnico em Química Integrado ao Ensino Médio da Escola Estadual Técnica Affonso Wolf, localizada no município de Dois irmãos/RS, onde o pesquisador leciona a disciplina de Química e Química Orgânica no curso técnico. Optou-se pela turma de terceiro ano, pois além de ser a turma na qual o professor-pesquisador lecionava no momento

da pesquisa, é o ano para o qual o tópico de Química está designado conforme o plano de estudos da escola.

A dissertação está dividida em capítulos. O capítulo presente é o primeiro, traz a introdução, justificativa, o problema de pesquisa e os objetivos da pesquisa. No segundo capítulo é trazida a revisão bibliográfica, com os trabalhos que contribuíram para a presente pesquisa, classificados em duas categorias: publicações na categoria aplicação didática e publicações na categoria pesquisa em educação. O referencial teórico da pesquisa é abordado no terceiro capítulo, sendo este: a Teoria da Mediação Cognitiva (TMC) (SOUZA, 2004). No quarto capítulo é apresentado o referencial metodológico, sendo estes: a metodologia Report Aloud, de Trevisan e Serrano (2019), a Análise Gestual por Stephens e Clement (CLEMENT, 1994; CLEMENT; STEINBERG, 2002; MONAGHAN; CLEMENT, 1999; STEPHENS; CLEMENT, 2010; 2015), e a Análise de Conteúdo (BARDIN, 1977).

Na sequência, o quinto capítulo apresenta aos fundamentos da reação de Substituição Aromática Eletrofílica, e como a reação é ensinada na escola por meio de uma obra didática. No sexto capítulo é apresentada de forma resumida o que é a Modelagem Molecular, com uma breve descrição de três *softwares* gratuitos de modelagem, sendo estes: ACD/ChemSketch; o Avogadro e o Arguslab, utilizado na pesquisa. No sétimo capítulo apresenta a metodologia utilizada para o desenvolvimento da pesquisa, desde a elaboração dos materiais, as aulas de modelagem molecular na forma de um experimento didático. Já o oitavo capítulo é apresentado a análise de resultados na forma de categorias.

Por fim, é feita uma relação entre os resultados da pesquisa com os resultados da Tese de Doutorado da pesquisadora Adriana Ramos, onde são discutidas algumas relações entre representações encontradas na dissertação e na obra da pesquisadora.

Desse modo, espera-se que esse trabalho contribua no Ensino de Química com informações pertinentes para professores e pesquisadores da área, buscando compreender os processos de aprendizagem dos estudantes.

1 USO DE MODELAGEM MOLECULAR NA EDUCAÇÃO QUÍMICA: REGIOQUÍMICA DA REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO AROMÁTICA ELETROFÍLICA

1.1 JUSTIFICATIVA

Os avanços na computação permitem a construção de *softwares* de alto desempenho, nomeadamente no que diz respeito ao uso de imagens 3D (tridimensionais), devido a suas características, permitem uma melhor visualização dos modelos adotados pela comunidade científica para representar os arranjos atômicos e os processos envolvidos nos fenômenos químicos. O uso dessas ferramentas tem-se tornado muito útil na pesquisa e no ensino. Um requisito essencial para o aprendizado da Química é a habilidade para formar modelos mentais. Sem um modelo mental apropriado, os estudantes não conseguem apreciar as relações entre a escala molecular e o fenômeno macroscópico observado, além de terem dificuldade em perceber a relevância e o papel da Química em suas vidas (FERREIRA; ARROIO; REZENDE, p. 1661, 2011).

Pesquisadores como Allinger, Dewar, Kohn, Pople, Stewart e Zerner, entre outros, empenharam-se no desenvolvimento e implementação de teorias em *softwares*, tornando-as acessíveis à comunidade química de uma forma geral. Com isso, surgiu um novo campo de atuação dos químicos, caracterizado como química computacional e modelagem molecular. O reconhecimento desta nova área de pesquisa pelo mundo científico veio com o prêmio Nobel em Química de 1998, concedido a John Pople e Walter Kohn, pelas contribuições no desenvolvimento da química computacional e modelagem molecular (FREITAS, 1998 apud SANTOS, 2001).

Grande parte dos estudantes tem dificuldade em assimilar as representações em química. As compreensões microscópicas e simbólica são de difícil entendimento para os alunos porque são invisíveis e abstratas e o pensamento dos estudantes é construído com base na informação sensorial (RAMOS, 2015).

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 apud RAMOS, 2015). Portanto, podemos afirmar que a habilidade visuoespacial é uma poderosa ferramenta, que pode ser usada para a resolução de problemas e compreensão de conceitos em diversas áreas da ciência e em diferentes contextos, auxiliando na criação e compreensão de modelos (RAMOS, 2015).

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 conteúdo específicos que envolvem cálculos mais complexos (RAUPP et al., 2010). O uso de *softwares* de modelagem molecular é didaticamente interessante porque permite melhorar a capacidade de representação dos estudantes.

Desse modo, acreditamos que o professor pode obter em instantes várias informações a respeito de entidades químicas, como, densidade eletrônica dos átomos constituintes da molécula, o mapa de potencial eletrostático, ferramenta importantíssima para a visualização das regiões reativas da molécula. A partir destas informações é possível trabalhar esses conteúdos de difícil entendimento por parte dos alunos. Sem a utilização dessa ferramenta computacional, é praticamente impossível exibir através da visualização estas informações, porque os cálculos matemáticos envolvidos são extremamente complexos.

1.2 PROBLEMA DE PESQUISA

A utilização de *software* de modelagem molecular, por meio de um experimento didático, é capaz de promover a aprendizagem de representações e *drivers* pertinentes à resolução de problemas de Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica?

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo Geral

Investigar o aprendizado de conceitos químicos após uso de *software* de modelagem molecular na modelagem de reações de Substituição Aromática Eletrofílica.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Criar roteiros para aplicação do experimento didático e para modelagem específica da reação a ser empregada;
- Interpretar a produção de gestos descritivos combinados ao discurso verbal dos estudantes para obter as imagens mentais oriundas de diferentes mediações durante a resolução de problemas propostos;
- Identificar as mediações predominantes nas categorias analisadas;
- Investigar de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem.

2 REVISÃO DE LITERATURA

O presente capítulo apresenta a revisão bibliográfica desenvolvida antes do estudo. A metodologia de revisão utilizada é descrita, bem como as categorias em que os resultados foram divididos. Por fim, discorre-se sobre os trabalhos que foram selecionados e suas contribuições à pesquisa.

2.1 METODOLOGIA DA REVISÃO

Através da revisão buscamos trabalhos publicados entre janeiro de 2012 até dezembro de 2019 sobre os temas que formam a base dessa pesquisa: Reação de Substituição Aromática Eletrofílica, Modelagem Molecular, *Software* de Modelagem Molecular, Simulações Computacionais de Modelagem Molecular, Reações Orgânicas.

A pesquisa por obras foi realizada através de buscas nas principais revistas da área do ensino de Ciências, tanto do Brasil como do exterior. Por exemplo, *Chemistry Education Research and Practice*; *Enseñanza de las Ciencias*; *International Journal of Science Education*; *Journal of Chemical Education*; *Journal of Science Education and Technology*; *Journal of Science Teacher Education*; *Journal of Research in Science Teaching*; *Research in Science & Technological Education*; *Research in Science Education*; *Studies in Science Education*; *Science & Education*; *World Journal of Chemical Education*; *Revista Química Nova na Escola*; *Revista Virtual de Química*; *Revista Química Nova*.

Além dessas revistas, também foram consultadas bases de dados ERIC (Educational Resources Information Center), Scielo (Scientific Eletronic Library Online) e Google Acadêmico.

A pesquisa nesses periódicos e nas bases de dados ocorreu por meio de entradas nos títulos e no resumo com os seguintes termos: “Electrophilic Aromatic Substitution Reaction, Molecular Modeling, Molecular Modeling Computer Simulations, Organic Reactions”. Após o levantamento e a leitura dos resumos para identificar objetivos, metodologia e resultados das pesquisas, identificamos 92 artigos científicos, dos quais 17 foram selecionados. Os artigos pesquisados foram categorizados segundo os parâmetros utilizados na obra de Ramos (2015). As duas categorias

escolhidas foram: os artigos classificados como aplicação didática e pesquisa em educação.

Os trabalhos que envolvem aplicação didática são relatos de efetivas experiências em sala de aula, laboratórios ou projetos envolvendo estudantes. Nestes trabalhos, a participação do estudante na manipulação dos *softwares* de modelagem molecular como tarefa principal ou mesmo como ferramenta auxiliar é condição fundamental. Segundo a pesquisadora, esta categoria foi criada porque, dentro destes artigos, não foi identificada fundamentação teórica ou epistemológica da área da educação, ou ensino em química para embasar a metodologia e avaliação dos resultados de aplicação da modelagem molecular em sala de aula. Caso contrário, estes trabalhos estariam na categoria pesquisa em educação (RAMOS, 2015, p. 31). Já a categoria pesquisa em educação caracteriza trabalhos que apresentam algum referencial teórico e epistemológico da área. São trabalhos teóricos, aplicados ou relatos de experiências diversas envolvendo estudantes, mas que trazem como diferencial o debate na área do ensino em química ou de ciências, fundamentado em referenciais da área (RAMOS, 2015, p. 31).

2.2 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA APLICAÇÃO DIDÁTICA

Ruddick, Parril e Petersen (2012), descreveram um experimento computacional sobre a teoria orbital molecular implementado no primeiro semestre do curso de Química Geral. Neste estudo, é apresentado um módulo computacional que introduz a teoria do orbital molecular de pequenas moléculas para alunos de graduação em química geral. A avaliação tentativa foi realizada para medir a eficácia do módulo na aprendizagem do aluno. O pacote de *software*, ChemBio3D Ultra 12.0, faz parte do ChemBioOffice Ultra 2010 Suíte da CambridgeSoft. O ChemBio3D é um pacote de modelagem a partir do qual vários tipos de cálculos podem ser facilmente executados. Como muitas universidades e faculdades já têm acesso a esse *software*, um experimento computacional para alunos de graduação que utiliza esse recurso é particularmente conveniente. Embora experimentos computacionais tenham sido implementados em cursos de graduação orgânica e inorgânica de nível superior, poucos experimentos computacionais que efetivamente introduzem a teoria do orbital molecular no nível de química geral foram publicados com resultados quantificáveis.

A atividade foi planejada como uma investigação laboratorial ou atividade em classe para complementar o material de aula sobre teoria do orbital molecular. Pré-teste e pós-testes foram realizados. Em particular, este módulo foi criado para auxiliar os alunos visualizarem a sobreposição *sigma* e *pi* de orbitais atômicos para formar orbitais moleculares e entender como os orbitais atômicos se combinam. Na atividade do módulo os alunos investigaram pequenas ligações, como no H_2 , N_2 , NO_3^- e CO_3^- . Os conceitos de ordem de ligação e multiplicidade de spin foram introduzidos. O módulo consistia de quatro componentes instrucionais projetado para ensinar os alunos a usar a química computacional, e investigar a ligação em pequenas moléculas e apresentar o resultado em termos de diagramas orbitais moleculares.

Os alunos matriculados no curso de química geral foram divididos em dois grupos para todas as experiências de laboratório ao longo do semestre. Para este grupo experimental 1 continha 16 alunos, sendo referido como o grupo de módulo. O grupo 2 continha 15 alunos sendo referido como o grupo de controle. O grupo de módulos participou da modelagem computacional após receber uma aula em sala de aula sobre teoria do orbital molecular (concomitantemente com o grupo controle). O grupo controle recebeu apenas material de aula a teoria do orbital molecular e não participou do processo computacional. Ambos os grupos receberam a mesma palestra, e problemas de lição de casa. Ambos grupos receberam um pós-teste sobre teoria do orbital molecular.

Os autores concluíram que o módulo computacional sobre teoria do orbital molecular melhorou o aprendizado dos alunos. Os autores usaram um pacote de *software* já pertencente à universidade para apresentar aos estudantes de química geral tanto a teoria do orbital molecular quanto a química computacional. Os alunos que participaram do módulo, além de assistir a uma palestra em classe, pontuaram 22,7% a mais em um pós-teste de múltipla escolha de 10 itens do que os alunos que assistiram sozinhos à aula. O pós-teste avaliou adequadamente o aprendizado para o grupo de controle, mas provou ser muito fácil para os alunos do módulo. Embora os grupos de teste fossem pequenos, a análise do teste t foi projetada para tais situações. Os autores acreditam que a eficácia, o baixo custo e a facilidade de administração deste exercício o tornam uma ferramenta valiosa para professores de química, especialmente aqueles em instituições que já possuem o ChemBio3D Ultra.

Clifford et al. (2013), relataram que as técnicas de química computacional tornaram-se ferramentas cada vez mais importantes para os químicos que buscam

abordar questões científicas. Como tal, é importante que os estudantes de graduação em química desenvolvam competência nesse campo emergente da química. A química computacional tem sido usada como uma ajuda instrucional para uma infinidade de conceitos essenciais de química orgânica, conforme demonstrado por vários excelentes livros de exercícios e numerosos relatórios de literatura. Um subconjunto relevante desses experimentos usa modelagem para amalgamar instrução em sala de aula e experimentos de laboratório. O exame de intermediários de reação, estados de transição e preferências conformacionais é usado para determinar caminhos de reação e correlacionar dados teóricos com observações físicas e espectroscópicas.

As atividades de química computacional foram projetadas para serem concluídas em um período de laboratório de química orgânica de nível introdutório e baseiam-se nos conceitos tradicionais do currículo abordados nas aulas de laboratório de Química Orgânica.

Para isso, os alunos geraram mapas de potencial eletrostático para ácidos acéticos substituídos para analisar a polaridade da ligação e o pKa. Realizaram a modelagem do acetato para explorar a ressonância e realizam pesquisas de conformação para cicloexanos monossustituídos para examinar a influência do efeito estérico na preferência conformacional. Eles também geraram diagramas de coordenadas da reação para reações de substituição e eliminação entre o 2-bromobutano e várias bases alcóxidas. Todos os aspectos dos exercícios se alinham aos tópicos tradicionais e, assim, reforçam sua importância.

Este experimento de laboratório apresentou aos alunos técnicas de modelagem, reforçando simultaneamente os seguintes tópicos da palestra: a base de pKa, ressonância, as diferenças entre substituintes equatorial e axial nos ciclohexanos de cadeira de conformação e os diagramas de coordenadas de reação de substituição e reações de eliminação. Segundo os autores, a justificativa para esta aula de laboratório foi: primeiro, existe uma presença crescente da química computacional em química moderna e com base na experiência dos autores, os alunos normalmente apresentam dificuldade em entender os tópicos examinados nestas aulas de laboratório. Uma avaliação formal do impacto do experimento sobre a aprendizagem dos alunos não foi realizada, mas as perguntas no final do semestre, e as avaliações dos alunos demonstraram que os estudantes perceberam os exercícios computacionais como benéficos para seu aprendizado. Além disso, as mesmas

avaliações demonstraram que os alunos tinham uma opinião favorável a respeito do *software* e em relação aos cálculos. Como resultado, esses exercícios foram conduzidos por mais de 750 laboratórios de química orgânica do primeiro semestre desde 2008, onde atendeu a uma grande área pedagógica da química computacional.

Ochterski (2014), neste artigo, o autor descreve três atividades projetadas especificamente para alunos do ensino médio e cursos universitários de nível introdutório para cursos não científicos que usam química computacional de qualidade de pesquisa de ponta, Gaussian e *software* de visualização, GaussView. A atividade de Iniciação ajuda os alunos a se familiarizarem com o *software*, enquanto as outras duas abordam tópicos de química geral em que visualizar e interagir com modelos químicos é especialmente útil: orbitais atômicos e formatos de moléculas. O desenho da atividade foi programado mediante sequências didáticas com 71 alunos do ensino médio, onde os alunos alternaram entre leitura e exercícios de modelagem. Cada seção incluía um procedimento passo a passo e planilha de atividades, além da introdução inicial sobre como utilizar o *software* Gauss View. Estudos piloto que empregaram as atividades propostas como Formas de Moléculas e Orbitais Atômicos demonstram que os alunos aprenderam e retinham os principais conceitos.

Os estudos piloto foram realizados usando oito computadores pessoais computadores em uma biblioteca do ensino médio que funcionava como um computador de laboratório. Os computadores tinham configurações típicas das encontradas em muitas escolas de ensino médio.

A atividade introdutória foi dividida em várias partes para apresentar aos alunos o *software*. Após uma introdução geral, há seções explicando como usar o GaussView para criar, girar, mover e medir propriedades das moléculas, e como iniciar os cálculos com o GaussView. Cada uma dessas seções incluem um procedimento passo a passo demonstrando o processo envolvido. Os estudos piloto foram realizados usando oito computadores do laboratório de uma escola de ensino médio. Todas as atividades tinham um pré-teste e questões de avaliação no final, envolvendo questões de múltipla escolha e questões abertas.

Em relação ao ensino médio, o autor concluiu que grande parte do material relacionado à química e disponibilizado aos alunos é limitado no que diz respeito a animações e simulações. Utilizando *software* de qualidade para pesquisas educacionais e procedimentos adequados, os alunos têm a sensação de que seu

aprendizado está sendo levado a sério e incentiva-os a levar a aprendizagem a sério, deixando de ser apenas uma atividade de brinquedo ou jogos como os alunos tratam.

Essa atividade também inclui uma planilha como uma estrutura paralela para os alunos completarem enquanto realizam a atividade. Concentra a atenção em vários aspectos de cada seção, às vezes pedindo aos alunos para reafirmarem informações importantes e outras vezes pedindo que pensem um pouco além do que eles acabaram de ler.

Conforme o autor, um equívoco comum que os alunos têm é o número de pares de elétrons em torno de um átomo central é equivalente à geometria molecular da molécula resultante. Em outras palavras, os alunos geralmente tomam o atalho de simplesmente contar os pares de elétrons e usando o resultado para atribuir a geometria molecular. Por exemplo, CH_4 e H_2O têm quatro pares de elétrons ao redor do átomo central, para um aluno atribuir a geometria tetraédrica para ambas as moléculas. O módulo aborda isso, tendo os alunos separadamente, contando o número de átomos e pares isolados conectados ao átomo central devem somá-los. Os alunos identificam explicitamente padrões em como a ligação e os pares isolados se relacionam com diferentes geometrias. Existem três conjuntos de moléculas incluídas na atividade, que pode ser usado individualmente para diferenciar a instrução.

Conforme o autor, no ensino médio, grande parte do material relacionado à química e disponibilizado aos alunos que usam computadores é limitado a animações e simulações. Estudantes jovens e inexperientes às vezes veem essas atividades como brinquedos ou jogos e os tratam casualmente. Usando *software* de qualidade para pesquisa, com essas atividades, dá aos alunos a sensação de que seu aprendizado está sendo levado a sério e incentiva-os a levar a sério também. Os resultados desses estudos piloto apoiaram essa noção, uma vez que indicam que os alunos estavam envolvidos, alcançaram a maioria dos objetivos de aprendizado e mantiveram essa conquista por algum tempo. Essas atividades são projetadas, tanto ao nível de conteúdo quanto de alfabetização, e o objetivo é atender às necessidades dos alunos iniciantes de química geral do ensino médio e nível introdutório da faculdade. As atividades também podem ser utilizadas com estudantes de cursos de química de nível superior, e com o tempo aumentar as dificuldades das perguntas e a variedade do uso de *software* que envolve o nível de pesquisa.

Já Martin, Vanderhoef e Cook (2015), propuseram uma atividade nova e inovadora para estudantes de química geral onde usaram cálculos teóricos de

modelagem molecular em conjunto com a teoria VSEPR para explorar geometrias moleculares. Os alunos utilizaram *software* para visualizar os arquivos de saída de compostos executados em várias geometrias. Esses arquivos de saída foram analisados em relação às geometrias (ângulos de ligação) e estabilidades relativas (energias) de cada composto em cada configuração geométrica específica. Os alunos conseguiram usar esses dados como observações “pseudoexperimentais” em comparações com suas geometrias VSEPR previstas. Esta atividade proporcionou aos alunos do primeiro semestre de química geral uma exposição com *software* de modelagem molecular e permitiu aos estudantes a oportunidade de usar modelos de computador para melhorar sua habilidade espacial, que tem se mostrado uma habilidade fundamental e importante nas ciências.

Monteiro e Firme (2015) aplicaram um minicurso da reação de Diels-Alder na graduação da Universidade Federal do Rio Grande do Norte. O minicurso oferecido teve 15 horas (divididas em 3 horas por dia). Dez alunos participaram do minicurso e de acordo com o questionário pré-minicurso todos os participantes eram estudantes de química de diferentes séries do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Todos os alunos concluíram Química Orgânica 1, que era o principal pré-requisito para este minicurso. Cerca de 50% dos alunos não tinham nenhuma experiência com química computacional.

Utilizando ferramentas de química computacional (Gaussian, Gaussview e Chemcraft), de acordo com autor, os alunos puderam construir o conhecimento por si mesmos e associar aspectos importantes da Físico-Química com a Química Orgânica. Sete reações de Diels-Alder foram previamente selecionadas e as geometrias de todas as espécies estudadas foram otimizadas usando técnicas padrão. Cálculos de frequência foram realizados para analisar os modos vibracionais da geometria otimizada, a fim de determinar se as geometrias resultantes são verdadeiros mínimos ou estados de transição. A otimização da geometria, os cálculos de frequência e a geração dos orbitais moleculares HOMO e LUMO de todas as espécies estudadas foram calculados pelo método do pacote Gaussian 09. A geometria inicial de cada molécula foi feita com o Gauss View 5. A geometria final foi retirada do Chemcraft.

Os alunos aprenderam os fundamentos da reação de Diels-Alder e a influência da teoria do orbital de fronteira na cinética. Eles aprenderam a usar as ferramentas da química quântica e depois de todos os cálculos organizaram e

analisaram os resultados. O autor percebeu que os alunos puderam compreender a influência do efeito substituinte nos aspectos eletrônicos (e cinéticos indiretamente), geométricos e termodinâmicos das reações de Diels-Alder. Considerando reações de Diels Alder termodinamicamente controladas, eles aprenderam que grupos de retirada de elétrons em dienófilos e grupos doadores de elétrons em dieno favorecem essas reações cineticamente e, por outro lado, o oposto desfavorece essas reações.

O autor chegou à conclusão a partir das estatísticas do questionário pós-minicurso e da avaliação dos alunos que os mesmos puderam compreender melhor os aspectos termodinâmicos e cinéticos de uma reação a partir do uso da Química Computacional. O minicurso também contribuiu para o conhecimento da Química Orgânica ao fornecer aos alunos ferramentas práticas e simples para desenvolver o conhecimento por si, e que essas ferramentas também podem ser empregadas no ensino das reações de Diels-Alder em sala de aula.

Miorelli, Caster e Eberhart (2017) destacaram a importância de se ter um modelo de qualidade da estrutura de densidade de carga em cursos introdutórios, justaposta à dificuldade de visualização da densidade por meio de métodos tradicionais. Isto motivou o desenvolvimento de uma atividade interativa na web e em sala de aula que os autores chamaram de “Bond Explorer”. O Bond Explorer utiliza a variedade de habilidades de plotagem no Wolfram Mathematica, conhecido como Mathematica. É um programa de computador que implementa um sistema de álgebra computacional. Além de uma linguagem de programação, contém diversas bibliotecas de programação prontas a serem usadas para diversos fins em várias áreas das ciências exatas. Essa atividade permitiu que os alunos manipulassem modelos 3D da densidade de carga. Desse modo, durante os módulos do Bond Explorer, os alunos trabalham em pequenos grupos para discutir e articular semelhanças entre as densidades de carga para tipos de ligação típicos, por exemplo, ligações covalentes, covalentes polares e iônicas.

Os estudantes receberam um folheto explicativo sobre a explicação de densidade de carga, e uma vez que os alunos tenham um entendimento suficiente o que se entende por densidade de carga e como representá-la graficamente, os mesmos iniciam a manipulação de estruturas 3D no aplicativo Mathematica, permitindo a visualização destes conceitos.

De acordo com os autores, o objetivo das atividades com o Bond Explorer foi fornecer aos estudantes uma base sólida para pensar sobre a densidade eletrônica

de moléculas e materiais. O aplicativo é uma importantíssima ferramenta para imaginar como o compartilhamento de elétrons norteia propriedades, facilitando abstração desses conceitos e facilita o aprendizado sobre a teoria da ligação de valência ou orbital molecular. Os autores comentam que essa atividade nos leva a uma *meta* de longo prazo de treinar os alunos em uma abordagem moderna ao design de materiais: alcançar as propriedades desejadas ajustando a densidade de carga explicitamente através de mudanças no ambiente químico dentro de um material.

Best, Li e Heim (2017) discutiram a adição eletrofílica de um ácido hidroálico (HF, HCl, HBr, HI) a um alceno que é frequentemente uma das primeiras reações aprendidas na graduação do segundo ano nas aulas de Química Orgânica. Durante a discussão do mecanismo, é mostrado que esta reação segue a Regra de Markovnikov, que afirma que o átomo de hidrogênio se ligará ao carbono com menos substituintes, enquanto o átomo de halogênio se ligará ao carbono com mais substituintes. No entanto, a reação do HCl (ácido clorídrico) com ácido atróptico (2- ácido fenilpropenóico) não segue esta regra porque é um sistema conjugado. A modelagem molecular dos possíveis intermediários de carbocátion sugere que a reação segue um mecanismo de adição conjugada envolvendo um 1,4-adição do HCl através do grupo alceno e carboxila conjugados do que a adição no alceno, como os alunos costumam propor primeiro. Cálculos semiempíricos PM3 são usados através do *software* Pc Spartan versão 6.1.8 para estudantes, a fim de determinar as energias de três possíveis intermediários. As energias obtidas da modelagem sugerem que o intermediário de carbocátion produzido pela adição 1,4 é o mais estável.

Após passar pelo experimento, os alunos chegaram a conclusão de que o provável mecanismo dessa reação é uma adição conjugada de HCl ao ácido carboxílico α , β -insaturado em vez de uma simples adição eletrofílica em todo o alceno.

Agrupando as respostas mais comuns dos alunos por assunto mencionado em sete seções diferentes, com um total de 92 alunos sugerem que esse experimento pode ajudar os alunos a aumentar seu nível de confiança com o desenho de estruturas de ressonância (75%), oferece a eles uma maior compreensão de como a modelagem molecular pode ser usada (60%), reforça como desenhar mecanismos razoáveis de reação (65%). Dadas essas respostas, os autores acreditam que esse experimento pode ser uma ferramenta útil para ajudar a desenvolver ainda mais habilidades dos

alunos no mecanismo de reação e no uso de modelagem para investigar problemas químicos.

Os autores Rayan e Rayan (2017), desenvolveram um estudo em que foi levantada a hipótese de que a integração de técnicas computadorizadas e ferramentas de modelagem no ensino presencial tradicional pode produzir um melhor modelo híbrido de ensino, capaz de motivar os alunos e melhorar sua atitude em relação à ciência em geral e à química em particular. Os autores realizaram testes visando verificar como as visualizações moleculares e simulações tridimensionais afetam a compreensão conceitual química dos alunos e suas atitudes em relação ao aprendizado. Desse modo, durante o ano letivo de 2016-2017, foi incorporado o *Software Avogadro* ao ensino e foi testado como isso afetou o desempenho dos alunos nos exames da disciplina de química.

Avogadro é um editor e visualizador de moléculas avançado, projetado para uso em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e outras áreas relacionadas. Pode ser utilizado pelos alunos para visualização molecular e simulação tridimensional de moléculas; o usuário pode minimizar suas estruturas terciárias e visualizá-las de todos os ângulos e perspectivas concebíveis. O Avogadro possui uma interface gráfica interessante que pode ser facilmente manipulada pelo usuário para visualizar as estruturas das moléculas de vários ângulos, em três dimensões.

A população de pesquisa incluiu estudantes universitários do primeiro ano do Al Qasemi Academic College que estavam matriculados em cursos de química (vinte e dois estudantes participaram desta pesquisa). Eles foram divididos em dois grupos iguais: (a) um grupo experimental, no qual os alunos usaram visualização molecular e simulações 3D no aprendizado de química, e (b) um grupo de controle, no qual os alunos aprenderam química através da abordagem tradicional, observando imagens apenas em livros didáticos, sem o auxílio de ferramentas computadorizadas para visualização molecular e simulação 3D.

O objetivo do estudo foi aprender até que ponto a modelagem molecular e as simulações tridimensionais podem melhorar o aprendizado de química nas faculdades de educação e simplificar a compreensão dos conceitos de química pelos alunos.

A conclusão que os autores chegaram é que existe uma diferença nos escores médios entre os dois grupos (8,2 pontos para o grupo experimental e 6,4 pontos para o grupo controle) foi significativa. O feedback dos alunos após a iniciativa foi positivo

e encorajador. A maioria dos alunos indicou que aprender química com o Avogadro foi extremamente útil, aproximando o mundo microscópico das moléculas, e sentiram que gostariam de ver esse *software* integrado em seus estudos de química desde o primeiro dia. De acordo com os autores, outros parâmetros serão testados na continuação deste estudo, como as atitudes dos alunos em relação ao aprendizado de química e suas habilidades de investigação.

Brian e Block (2018) discorrem sobre o modelo VSEPR afirmando que o mesmo tem limitações bem estabelecidas em sua capacidade de representar geometrias moleculares e eletrônicas precisas de moléculas simples, o que pode criar uma necessidade significativa para os alunos reaprenderem conceitos de estrutura e ligação em química orgânica. Os autores apresentaram aos alunos um método alternativo para descrever geometrias moleculares e estruturas eletrônicas que é muito mais consistente com observações experimentais do que o VSEPR. Nesse método alternativo de ensino de estruturas, a teoria VSEPR é útil para levar em conta a conjugação de sistemas π adjacentes e a natureza experimentalmente observada de pares isolados, que é suportada por química computacional por meio do recurso de exportação de HTML do WebMO (WebMO é uma interface baseada na web para pacotes de química computacional). Se implementado, permite que os alunos reconciliem a hibridização, a teoria da ligação de valência, a teoria do orbital molecular e as estruturas de ressonância em uma única imagem coerente da estrutura eletrônica e da ligação de moléculas orgânicas

Como metodologia, os autores propõem inicialmente que os alunos encontrem estruturas moleculares e eletrônicas precisas computacionalmente usando o WebMO e seu recurso de exportação de HTML. Após os alunos são informados de que os átomos na conjugação π devem ter um orbital p (ou orbital rico em p) alinhado com o π - vizinho sistema e veja os orbitais π de simetria resultantes via WebMO. Por fim, os alunos são instruídos que qualquer átomo com dois ou mais pares não ligantes terão pelo menos um par solitário em um orbital p, que é suportado por dados computacionais. A disponibilidade de estruturas computacionalmente precisas proporciona aos alunos mais confiança na precisão de qualquer representação bidimensional e em quaisquer inferências que eles fazem com base nessa imagem relacionada à estrutura e reatividade. Os alunos não ficam se perguntando se seus desenhos em papel ou a construção de um modelo físico representam a molécula

efetivamente; eles podem confirmar ou rejeitar sua estrutura previsão usando essas saídas computacionais.

De acordo com os autores, a precisão do VSEPR era limitada, mesmo com moléculas com grupos funcionais simples. Sua incorporação no currículo foi baseada em sua simplicidade, mas sem uma apreciação completa como isso limitaria a compreensão e racionalização de reatividade química. Como cientistas e educadores científicos, os autores afirmam que devemos estar dispostos a descartar modelos antigos baseados em equívocos e mal-entendidos quando um novo modelo mais preciso se torna disponível e acessível aos alunos. A conclusão dos autores é que com o surgimento da Química Computacional na graduação chegou o momento de ensinarmos um modelo melhor de estrutura e vínculo que permitirão aos alunos melhorar e racionalizar fenômenos químicos.

Zdanovskaia et al. (2018) relataram que o uso de modelagem molecular computacional para aprimorar o ensino de conceitos químicos está se tornando comum. A incorporação dessa técnica no currículo, no entanto, geralmente requer investimento financeiro. Esta realidade coloca um problema para as instituições onde o financiamento e os recursos associados são escassos, com um potencial impacto negativo na aprendizagem dos alunos. Para lidar com essa situação, é apresentado um recurso da Web gratuito e universalmente acessível, projetado para tornar a química computacional disponível para colégios comunitários e instituições similares que carecem de recursos ou experiência suficientes para projetar seus próprios módulos computacionais. O site permite que os alunos visualizem, manipulem e analisem saídas do Gaussian 09 de moléculas orgânicas na interface de usuário WebMO. Os exercícios associados orientaram os alunos através de conceitos-chave na compreensão da estrutura, ligação e reatividade de moléculas orgânicas. O site e os exercícios foram usados em duas instituições diferentes de dois anos como parte de seus cursos de química orgânica do segundo semestre.

Os autores destacaram o tópico doação eletrônica e efeitos do grupo de retirada em anéis aromáticos. O exercício envolvia a análise da distribuição de carga no benzeno e seus derivados (anilina, estireno e ácido benzóico), usando mapas de potencial eletrostático.

Os alunos inicialmente desenharam as estruturas de ressonância de cada molécula e fizeram a comparação com o mapa de potencial eletrostático correspondente. De acordo com os autores, esse processo auxiliou no

estabelecimento da visualização da doação de elétrons ou de retirada de elétrons de cada substituinte, relacionando as cargas atômicas formais das estruturas de ressonância para regiões específicas de carga mostradas no mapa de potencial eletrostático. Esse relacionamento é fortalecido pela introdução dos valores de carga atômica para cada molécula. Os alunos comparam as cargas NPA do átomo do anel, com a RMN de ^1H dos valores de deslocamento químico no benzeno, anilina, estireno e ácido benzóico, usando os valores do benzeno como referência. Os alunos usaram esses dados, juntamente com estruturas de ressonância e imagens do orbital molecular ocupado com energia mais alta (HOMO) e orbital molecular desocupado de menor energia (LUMO) para cada molécula, para concluir que os elétrons substituintes (como no $-\text{CO}_2\text{H}$) reduzem a densidade de elétrons nas posições *orto* e *para* em relação a átomos de C do benzeno, levando a núcleos ^1H desprotegidos e deslocamentos químicos de ^1H NMR no campo molécula. Um substituinte doador de elétrons, como $-\text{NH}_2$, resulta em um efeito oposto na distribuição de carga e ^1H . O produto químico de RMN muda nas posições correspondentes. O componente final da análise baseia-se no exercício anterior, enfatizando ainda mais a ligação entre a estrutura eletrônica de um heteroátomo e sua capacidade de se envolver em conjugação π com um anel aromático. Usando anilina como exemplo, os alunos usaram a teoria VSEPR para prever a hibridação geometrias eletrônicas e moleculares do átomo de N e seu par isolado e compararam essas previsões com os dados obtido a partir dos cálculos do pacote M062X.

Os autores concluem que disponibilidade de dados computacionais autênticos para moléculas orgânicas através de um navegador da web elimina a necessidade de recursos especializados, por exemplo, licenças de *software*, um computador cluster ou vários computadores dedicados à computação química. A desvantagem dessa abordagem “empacotada” conforme os autores, é que os alunos não ganham experiência no uso de *software* computacionais para construir moléculas. No entanto, as concepções dos alunos sobre estrutura e vínculo são aprimoradas pela capacidade de visualizar e manipular moléculas e orbitais.

Rodenbough e Manyilizu (2019), relatam o desenvolvimento de lições relevantes sobre a teoria VSEPR projetadas especificamente para implementação em um ambiente de escolas secundárias da África Oriental. Os planos de aula são contemplados com a utilização de *software* por estudantes de pós-graduação em ciências dos materiais, e redirecionados para as aulas de química do ensino médio.

De acordo com os autores no Quênia, os laboratórios de informática do ensino médio existem há algum tempo, e também, são usados para fins de alfabetização em tecnologia da computação. Os estudantes quenianos estão se tornando cada vez mais familiarizados com a tecnologia, e a proposta curricular atual é ensinar conteúdo científico, lições de física, química e biologia em computadores.

Segundo os autores, o contexto na Tanzânia é, de certa forma, semelhante. A Tanzânia lançou recentemente sua Política de Educação e Formação Profissional Treinamento de 2014, que identificou diferentes desafios que afetam a qualidade da educação em escala nacional, como a falta de laboratórios para assuntos científicos, insuficiente número de professores. Além disso, a política indica problemas como má utilização das TIC na educação, domínio fraco da aprendizagem e ensino de idiomas e currículos que não refletem o cenário globalmente competitivo na ciência.

Os autores identificaram a necessidade de um tipo específico de aula. Os planos de aula teriam que incluir programas que poderiam ser instalados e não depender de acesso à Internet. Por fim, os planos de aula teriam que incluir conteúdo científico relevantes para o contexto da África Oriental, para que pudessemos cumprir o objetivo de criar uma pedagogia culturalmente responsiva.

De acordo com o delineamento metodológico proposto pelos autores, 41 alunos foram divididos em dois grupos.

No grupo A, 20 alunos estavam sujeitos a lições de química sobre o modelo VSEPR, enquanto os 21 alunos do grupo B estava sujeito às mesmas lições tradicionais, mas com a utilização de computador. Ambos os grupos receberam um teste padrão depois das lições. Um exemplo de pergunta no teste foi: “Considere metano, amônia e água. Por que eles têm ângulos próximos, mas diferentes”? Após, em outro teste de conteúdo, todos os alunos dos dois grupos foram expostos a o *software* e um questionário foi usado para avaliar o sucesso dos planos de aula desenvolvidos.

Os autores chegaram à conclusão que os alunos puderam aprender com mais sucesso do que poderiam ter de outra forma. Os professores relataram que o sistema era bom, que os alunos estavam envolvidos com a lição no computador (fazendo perguntas, etc.) e que os alunos puderam fazer bons desenhos depois de ter visualizado o conteúdo no computador.

2.3 PUBLICAÇÕES NA CATEGORIA PESQUISA EM EDUCAÇÃO

O autor Levy (2012), relatou os resultados de um estudo que visava explorar as vantagens da visualização dinâmica para melhorar a compreensão dos processos moleculares. Segundo o autor, foi projetado um módulo de currículo aprimorado por tecnologia no qual alunos de química do ensino médio realizam experimentos virtuais com visualizações moleculares dinâmicas de sólidos, líquidos e gases. Eles interagiram com as visualizações e realizaram atividades de investigação para fazer e refinar conexões entre fenômenos observáveis e processos de nível atômico relacionados à mudança de fase. As explicações propostas por 300 duplas de alunos em resposta aos itens de pré/pós-avaliação foram analisadas por meio de uma escala para medir o nível de raciocínio molecular.

Os resultados indicam que do pré-teste ao pós-teste, os alunos progredem em seu nível de raciocínio molecular e são mais capazes de conectar forças intermoleculares e mudança de fase em suas explicações. Sendo assim, o comportamento de inúmeras moléculas, cada uma seguindo regras individuais de movimento, e o estudo relacionado de calor e mudança de fase, é um assunto complexo para os alunos do ensino médio entenderem, e que a literatura sugere algumas razões para a dificuldade, que incluem a compreensão estatística envolvida, a natureza abstrata da termodinâmica como um sistema teórico, a incapacidade dos alunos de vivenciar e observar diretamente esses processos, e a separação dos fenômenos microscópicos dos fenômenos de macroscópicos.

O estudo de caso proposto destacou uma fonte adicional de dificuldade, a saber, o foco instrucional tradicional em visualizações estáticas do mundo molecular dinâmico em constante mudança. Os livros didáticos têm uma natureza bidimensional estática, ou seja, o aprendizado é em duas dimensões, não há uma proposta que gere aos alunos o desenvolvimento visuoespacial. Em muitos casos, são insuficientes para fornecer os suportes que os alunos precisam para entender os fenômenos no nível molecular.

O papel das visualizações dinâmicas no ensino de ciências está claramente se tornando cada vez mais importante e as novas tecnologias são consideradas para promover melhor o aprendizado eficaz de tópicos complexos, como mudança de fase.

Os autores Smetana e Bell (2013) afirmaram que estudos abstratos considerando o uso de simulações de computador são limitadas, apesar do crescente

interesse neste modo de uso. O estudo atual explorou como uma coleção de simulações de computador foi integrada em ambas configurações de instrução para toda a classe e pequenos grupos durante uma unidade de química do ensino médio no estudo da estrutura atômica. Estatísticas descritivas são relatadas para pré e pós-avaliações quantitativas de instrução no entendimento conceitual do aluno. Análise foi guiada por indução analítica de uma variedade de fontes de dados qualitativos, incluindo observações na sala de aula e entrevistas.

O estudo ocorreu durante uma unidade de instrução de quatro semanas em estrutura atômica que abordou sete conceitos de química (estrutura atômica, modelos atômicos e natureza provisória de ciência, íons, isótopos, radioatividade, equilíbrio nuclear, equações de decaimento e meia-vida). A unidade incluía uma variedade de atividades de aprendizagem, como, por exemplo simulações de computador, palestra, atividades práticas, trabalhos de casa e oportunidades para exercícios individuais e prática, e um projeto de pesquisa/apresentação.

As premissas teóricas deste estudo estão embutidas na teoria de aprendizagem social-construtivista de Vygotsky no qual o desenvolvimento humano ocorre por meio de interação social e nessa interação social ocorre a transmissão cultural e o desenvolvimento cognitivo. Teorias mais recentes de pares de aprendizagem estendem essa compreensão para descrever como os outros, mesmo que não sejam mais especialistas, podem trabalhar em conjunto para construir conhecimento, promovendo assim a aprendizagem e o desenvolvimento (SLAVIN et al., 2003). Ferramentas, como a simulação de computador, ações descritas no presente estudo, também podem atuar como criar artefatos para promover o aprendizado e o desenvolvimento.

Uma das principais conclusões dos autores sugere que, quando usadas de forma adequada, as tecnologias educacionais têm o potencial de tornar o aprendizado interativo, autêntico e significativo. Como tal, eles podem ajudar os professores a enfrentar o desafio a vontade de mudar de práticas tradicionais de ensino em direção a ambientes de sala de aula mais centrados no aluno, onde membros da comunidade de aprendizagem trabalham em colaboração.

Já os autores O' Dwyer e Childs (2014) relataram a dificuldade dos alunos de ensino médio na Irlanda em relação à Química Orgânica. Segundo os autores, a Química Orgânica exige que o aluno esteja no estágio formal do desenvolvimento cognitivo para a compreensão dos conceitos. Estudos realizados no Reino Unido, e

mais recentemente na Irlanda, mostraram (80%) dos alunos do ensino médio ainda estão operando no estágio concreto do desenvolvimento cognitivo. Esse é apenas um dos fatores que contribuem para as dificuldades por aqueles alunos que estão aprendendo Química Orgânica pela primeira vez. Todos os alunos do ensino médio na Irlanda devem estudar o programa definido para o exame final. Assim, os educadores estão restritos a ensinar o conteúdo prescrito do programa. Na Irlanda, o ensino médio de Química tem duração de dois anos com um exame final e emissão de certificado. Este exame determina a entrada dos alunos nos cursos de graduação. A Química Orgânica é responsável por 20% do currículo de química no ensino médio, e 15% pelo conteúdo do exame final do curso. Muitos pesquisadores identificaram a Química Orgânica como uma área de dificuldade conceitual.

Diante desse quadro, foi desenvolvido o programa OCIA! (Organic Chemistry in Action), um programa baseado em evidências projetado para facilitar o ensino e aprendizagem de Química Orgânica no ensino médio, e a introdução da Química Orgânica na graduação. O objetivo do programa é melhorar as atitudes dos alunos em relação ao interesse e a compreensão dos conceitos envolvidos na disciplina.

Trata-se de um pacote de ensino inovador, e que ofereceu uma abordagem alternativa para o ensino do conteúdo. O programa visa usar as descobertas do CER para um propósito específico: melhorar a compreensão e as atitudes em relação à química orgânica. Por exemplo, o uso de recursos visuais facilita a capacidade dos alunos de interpretar a dimensão submicroscópica da Química. Além de usar modelos moleculares, estudos mostraram que representações computadorizadas e animações de modelos moleculares e reações auxiliam a compreensão dos alunos e a capacidade de visualizar diferenças de eletronegatividade, polaridades de ligação, cargas parciais, distribuição de elétrons, bem como forma molecular e ângulos de ligação.

O desenvolvimento e implementação do programa OCIA! Provou que as descobertas do Chemical Education Research (CER) podem ser eficazes quando implementando em salas de aula do ensino médio, trabalhando nas restrições de um currículo prescrito. Os autores propõem que a inovação curricular deve ter como objetivo uma melhoria, em vez do que apenas mudança. Embora os desenvolvedores de currículo estejam cientes e informados sobre o CER e suas implicações, é importante formar professores nesta área, a fim de equipá-los para implementar mudanças curriculares de forma mais eficaz. Os autores esperam que as ideias e

abordagens apresentados no programa OCIA! Pode ser adaptado para uso mais amplo em outros países no ensino médio.

Em relação ao autor Springer (2014), o mesmo abordou a importância de que muitas tarefas em Química Orgânica requerem uma compreensão da estrutura molecular em três dimensões. A aprendizagem baseada em multimídia sugere que as mentes humanas contêm uma quantidade finita de memória de trabalho e que atividades de aprendizagem complexas podem apresentar muitas informações a serem processadas simultaneamente. De acordo com o autor, vários artigos sugerem como incorporar modelos de computador no laboratório de química orgânica, mas relativamente poucos artigos discutem como incorporar esses modelos amplamente na aula de química orgânica. Pesquisas anteriores sugeriram que a manipulação de modelos físicos ou de computador aumenta a compreensão do aluno. Este estudo demonstrou que, simplesmente visualizando as manipulações apropriadas realizadas por um educador em um modelo de computador durante um período de recitação, os alunos em ambos os semestres de introdução à Química Orgânica tiveram um desempenho significativamente melhor em um pós-teste de medição da compreensão da estrutura molecular do que aqueles que não visualizaram os modelos de computador.

O aluno não deve apenas compreender a estrutura 3D da molécula, mas também deve entender como as representações estão relacionadas entre si. Se essas relações não forem compreendidas, um aluno pode desenvolver conhecimento desconexo. Assim, ao visualizar um modelo 3D pode ser benéfico para a aprendizagem, reduzindo a carga cognitiva da memória de um aluno requisitos mentais para traduzir uma representação 2D para uma 3D e entender as conexões entre as várias representações 2D coloca uma carga cognitiva bastante grande na memória de um aluno. O autor Springer coloca que pesquisadores concluíram que alunos que simplesmente viram um modelo 3D, mas não interagiram com ele não tiveram melhor desempenho. Simplesmente visualizando um modelo em 3D de computador pode não ser suficiente para melhorar o desempenho porque muitos alunos podem não entender o que eles estão vendo. O autor realizou um estudo em um Curso de Química Orgânica em uma renovada Universidade de pesquisa através de dois grupos de controle, um experimental e um grupo de controle. Os conhecimentos foram analisados através de um pré e pós-teste. O autor utilizou uma abordagem quantitativa para mensurar os resultados. O estudo foi elaborado com as

seguintes questões em mente: o entendimento do aluno sobre a estrutura molecular melhorou significativamente, simplesmente vendo o desempenho do professor com manipulações de um modelo de computador em palestra ao lado de representações 2D típicas? Quais tópicos, se houver, parecem se beneficiar da simples visualização com modelos de computador?

Os resultados do estudo sugerem que simplesmente visualizar modelos de computador e manipulações relevantes com modelos de computador com uma explicação verbal de como interpretar os modelos podem melhorar significativamente a compreensão de um aluno sobre estrutura molecular. Alunos do grupo experimental tiveram um desempenho significativamente melhor em um pós-teste projetado para medir a compreensão da estrutura molecular do que aqueles alunos no grupo de controle, embora não houvesse diferença significativa nas pontuações do pré-teste.

Em relação quais os tópicos, se houver, benefícios com a inclusão de modelos de computador, os alunos do grupo experimental tiveram um desempenho significativamente melhor em ambas categorias, como: ângulo de ligação, tensão de anel, deformação de torção, geometria molecular e conformação.

Concluindo, o autor relata que o projeto experimental não pode explicar o que os alunos estavam pensando enquanto resolviam os problemas. Sem ter algum aspecto qualitativo de estudo, como um questionário ou entrevista, é impossível dizer o que os alunos estavam pensando enquanto resolviam os problemas. Um estudo futuro poderia utilizar uma abordagem de métodos mistos, incluindo um aspecto quantitativo e um aspecto qualitativo para entender o que os alunos estavam pensando enquanto observam os modelos de computador e como eles resolvem os problemas no teste. Essa tendência para determinar a melhor eficiência no uso de modelos de computador no currículo de Química Orgânica deve ser explorada.

Os autores Cruz-Ramirez de Arellano e Towns (2014), tiveram como objetivo elucidar a compreensão dos alunos sobre os conceitos de Química Orgânica, explorando a reação de um halogeneto de alquila, uma das primeiras funções orgânicas estudadas na graduação. O referencial teórico selecionado para o estudo foi o construtivismo pessoal (GEELAN,1987). Essa teoria enfatiza a ideia de que os indivíduos constroem conhecimentos para através da interpretação da repetição de evento e esse conhecimento é individual e adaptável, e não objetivo. Bodner (1986) interpretou o construtivismo pessoal no contexto das salas de aula de química. Ele sugeriu que indivíduos usem o que eles já sabem para organizar e entender novas

informações, em outras palavras, que o conhecimento é construído na mente do aluno. Portanto, a única maneira de elucidar o que os alunos sabem sobre um determinado tópico é pedindo-lhes diretamente para descrever como eles construíram e conectaram os conceitos relevantes para esse tópico.

Para descobrir como os alunos construíram seus conhecimentos em relação às reações dos halogenetos de alquila, foi desenvolvido um estudo no qual os participantes foram convidados a resolver uma série de perguntas que continham todos os conceitos essenciais sobre a reação. Além de usar entrevistas semiestruturadas, gravadas e transcritas, os estudantes foram entrevistados usando o protocolo *Think Aloud*. No protocolo *Think Aloud*, o estudante é solicitado a pensar em voz alta conforme está resolvendo alguma situação, ou seja, o que está pensando durante a execução de uma tarefa. O método permite compreender o que o estudante está pensando no exato momento de responder aos questionários ou ao interagir com simulações.

O cenário para este estudo foi uma grande universidade de pesquisa intensiva com o apoio estatal dos Estados Unidos.

Em geral, as conclusões do estudo mostraram que os alunos exibiram lacunas na compreensão ao lidar com: classificar substâncias como bases e nucleófilos; avaliar a resistência básica ou nucleofílica das substâncias; e descrever com precisão as etapas que ocorrem e os intermediários reativos que se formam durante a reação de formação do halogeneto de alquila. Da mesma maneira, pesquisas futuras podem aplicar essa metodologia para elucidar os alunos na compreensão de qualquer tópico em Química Orgânica.

Na pesquisa dos autores Dass, Head e Ruhsnton (2015), os mesmos enfatizaram que a modelagem como prática científica deve ser incentivada em salas de aula K-12 (estrutura K-12 para Educação em Ciências, onde os autores defendem que os alunos façam conexões entre os níveis macroscópicos e particulados de substâncias químicas e processos físicos para um processo mais coerente e completo afim de que a compreensão desses fenômenos possa ser desenvolvida). O estudo descrito investigou como um grupo de professores de química do ensino médio desenvolveram suas compreensões em relação à natureza e função dos modelos, e como eles incorporaram as práticas de modelagem em sala de aula através da participação em um programa de PD (desenvolvimento profissional) utilizando o MBI como estrutura. O MBI (modelo baseado em investigação) é um método instrucional

que se baseia nos princípios centrais de investigação, enquanto solicita os alunos construir, testar e revisar modelos. Os alunos usam esses modelos para desenvolver argumentos baseados em evidências que desenvolvem sua compreensão sobre um modelo. O MBI utiliza informações e curiosidade inata dos alunos sobre o mundo natural e não requer um particular conjunto de habilidades do aluno ou conhecimento prévio na obtenção de resultados positivos.

Conforme os autores, os modelos desempenham um papel central no ensino de química, tanto na elucidação de vários fenômenos químicos, estrutura atômica, ligação e termodinâmica. E interações moleculares que determinam as propriedades do sistema. Em algumas salas de aula fora dos Estados Unidos, os professores relataram a utilização de modelos para explicar como e por que as mudanças na matéria ocorrem.

O objetivo principal do trabalho foi entender a essência da experiência compartilhada em aprender e se desenvolver em modelos baseados em práticas de inquérito. Os métodos de coleta de dados incluíram uma série de pesquisas on-line e uma entrevista em grupo focal. Os autores utilizaram abordagem quantitativa para análise dos dados. Os autores analisaram que a inclusão dos papéis dos modelos mostra um aumento na compreensão dos participantes sobre aspectos gerais de modelos e modelagem.

Em relação aos resultados do estudo, os autores concluíram que os resultados estão alinhados com os dilemas da reforma construtivista, de acordo com Windschill, e que o MBI pode ser considerado uma pedagogia, e deveria ser introduzido nas aulas de química. Como educadores, desenvolver atividades exemplares de investigação baseadas em modelos é importante, e fundamental é compartilhá-las com a comunidade da educação química devido à falta de exemplos na literatura atual.

2.4 CONSIDERAÇÕES

Na revisão de literatura o objetivo desejado era encontrar assuntos relacionados a Reação de Substituição Aromática Eletrofílica. De acordo com as obras pesquisadas, não encontramos esse tópico nos periódicos de educação e aplicação didática.

Por meio das contribuições apresentadas, percebe-se a escassez do assunto nos periódicos. Acreditamos que falta de interesse pelo estudo da SAE a nível de educação seja uma oportunidade para futuras pesquisas, visto que se trata de um assunto de relativa complexidade para os estudantes de nível médio, e um desafio para os pesquisadores. Apesar de não encontrarmos o assunto sobre Reações de SAE em periódicos da área da educação e aplicação didática, destacamos alguns artigos que têm pontos em comum com o nosso trabalho, por exemplo: a utilização de *softwares* de modelagem molecular; o estudo sobre estruturas 2D e 3D; a importância da visualização no ensino de Química e a contribuição da tecnologia para favorecer o aprendizado através da utilização de *softwares* de modelagem molecular, investigações de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem. Além disso, referenciais teóricos encontrados como Vygotsky (contemplado na TMC), a teoria VSEPR utilizados na nossa pesquisa.

No que se refere aos artigos de Aplicação Didática destacamos o autor Ochterski (2014), onde o desenho da atividade foi programado através de sequências didáticas, em que os alunos alternaram entre leitura e exercícios de modelagem. Cada seção incluía um procedimento passo a passo e planilha de atividades, além da introdução inicial sobre como utilizar o *software* Gauss View. Os estudos piloto foram realizados usando oito computadores do laboratório de uma escola de ensino médio. Todas as atividades tinham um pré-teste e questões de avaliação no final, envolvendo questões de múltipla escolha e questões abertas. Em relação a esta atividade, podemos traçar um paralelo com o nosso experimento. Os autores utilizaram o *software* Gauss View, alternaram leitura e exercícios de modelagem, as atividades tinham um pré-teste, pós-teste e questões de avaliação final. Já no nosso experimento tínhamos o *software* Arguslab, um experimento didático, um pré-teste, pós-teste e entrevistas.

No experimento dos autores Rayan e Rayan (2017), os mesmos testaram como visualizações moleculares e simulações tridimensionais afetam a compreensão conceitual de química dos alunos e suas atitudes em relação ao aprendizado de química. A maioria dos alunos indicou que aprender química com o Avogadro foi extremamente útil, aproximando o mundo microscópico das moléculas. Nesta atividade temos como semelhança de forma as visualizações moleculares e simulações tridimensionais afetam a compreensão conceitual de química. Na nossa

pesquisa temos como um dos objetivos específicos investigar de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem.

Com relação aos artigos Pesquisa em Educação destacamos o de Levy (2012), qual o autor menciona o papel das visualizações dinâmicas no ensino de ciências está claramente se tornando cada vez mais importante e as novas tecnologias são consideradas para promover melhor o aprendizado eficaz de tópicos complexos. Com relação ao trabalho do autor Levy podemos considerar as semelhanças sobre visualizações e contribuição da tecnologia para favorecer o aprendizado através da utilização do Arguslab.

Já o artigo de Smetana e Bell (2013) destaca que quando as tecnologias educacionais são usadas de forma adequada, tornam o aprendizado mais significativo. Sendo assim, podem ajudar os professores a enfrentar o desafio a vontade de mudar de práticas tradicionais de ensino em direção a ambientes de sala de aula mais centrados no aluno. As premissas teóricas deste estudo estão embutidas na teoria de aprendizagem social-construtivista de Vygotsky que reconhece os processos sociais e individuais em jogo na construção do conhecimento. Neste contexto podemos traçar um paralelo sobre a contribuição da tecnologia para favorecer o aprendizado através da utilização do Arguslab, através do nosso referencial teórico, ou seja, a Teoria da Mediação Cognitiva.

Por fim, Springer (2014) relata que na aplicação do projeto experimental não pode explicar o que os alunos estavam pensando enquanto resolviam os problemas. Sem ter algum aspecto qualitativo de estudo, como um questionário ou entrevista, é impossível dizer o que os alunos estavam pensando enquanto resolviam os problemas. Essa tendência para determinar a melhor eficiência no uso de modelos de computador no currículo de Química Orgânica deve ser explorada. Em relação a este experimento verificamos a importância do nosso referencial metodológico abarcando a metodologia Report Aloud, a Análise Gestual por Stephens e Clement, a Análise de Conteúdo de Bardin e as entrevistas.

3 REFERENCIALTEÓRICO

Neste capítulo apresentamos a bases teórica do trabalho, a Teoria de Mediação Cognitiva em Rede (TMC).

3.1 TEORIA DA MEDIAÇÃO COGNITIVA EM REDE (TMC) POR QUÊ EM REDE?

O referencial teórico da TMC foi idealizado em 2000 e concebido em 2004, ou seja, 20 anos atrás. A Teoria da Mediação Cognitiva em Rede (TMC) de Souza (2004), (SOUZA et al., 2012), é uma abordagem à inteligência humana que tenta entender as mudanças cognitivas associados ao surgimento e disseminação de tecnologias de informação e comunicação ao longo das últimas décadas. De acordo com a TMC, a cognição consiste em um fenômeno de processamento de informações, o qual se dá em boa parte fora do cérebro. É uma teoria que relaciona as TICs com mudanças na cognição qualitativamente.

3.1.1 A Revolução Digital

O surgimento da internet modificou inúmeras áreas da sociedade, sendo sabido o crescente uso de aparelhos eletrônicos, como notebooks, tablets e smartphones, por pessoas de todas as idades e classes sociais. Sendo assim, as formas sobre como entendemos e trabalhamos a educação também se transformou. O emprego de tecnologias vem modificando as nossas relações e comunicações.

De acordo com Filho e Castioni (2021), em um mundo cada vez mais conectado, em que as mudanças são contínuas, o advento da internet modificou diversas áreas da sociedade, este processo abrange mudanças profundas ocorridas por meio do uso de tecnologias digitais. Outro aspecto a destacar é que a transformação digital afeta todos os setores da sociedade.

Essas afirmações são evidenciadas ao se observar o que está ocorrendo na área da educação em razão da pandemia da Covid-19, doença infecciosa que, em um curto espaço de tempo, espalhou-se em vários países. Ao se observar especificamente a atividade docente, nota-se que a transposição da forma de trabalho foi mais significativa, uma vez que as instituições de ensino foram proibidas de atuar presencialmente, medida que fez com que os professores migrassem das suas

atividades presenciais para o formato on-line e trabalhassem a partir das suas residências. Diante disso, intensificou-se a necessidade do uso das novas tecnologias no processo de ensino-aprendizagem, campo que até recentemente era envolto por muita resistência e embates (FILHO; CASTIONI, 2021, p. 51).

Esse cenário, que privilegia o uso das novas tecnologias na educação, viabiliza a proposição de estudos que tenham como foco a discussão do uso das novas tecnologias no processo de ensino- aprendizagem.

Rodrigues (2016), traz uma definição mais aprofundada ao dizer que as TIC são o conjunto total de tecnologias que permitem a produção, o acesso e a propagação de informações, assim com tecnologias que permitem a comunicação entre pessoas. Outros autores trazem conceitos semelhantes, como Souza (2017, p.1), que afirma:

A Tecnologia da Informação e Comunicação, ou simplesmente TIC, pode ser definida como o conjunto de atividades e soluções providas por recursos de computação que visam permitir o armazenamento, o acesso e o uso das informações para auxiliar a tomada de decisão.

Conforme Souza (2004), os processos de pensamento são moldados por mediação com o meio e essa mediação vai mudando a própria cultura destes grupos. Conforme Souza et al. (2012), nesse sentido, o papel da tecnologia da informação (TI) no pensamento humano pode ser considerado uma nova forma de Mediação cognitiva com um alcance mais complexo do que as modalidades anteriores, como a Mediação Cultural. Tem-se, então, um cenário desenvolvido a partir da Revolução Digital, no qual o autor expressa a existência de uma Hiper cultura.

De acordo com Souza et al. (2012), na atualidade, os indivíduos que estão passando pela Era Digital acabam tendo que aprender e compreender determinadas ações realizadas com o uso da tecnologia, a qual se torna uma exigência.

Nesse sentido, Souza (2004) aponta que os computadores acabaram tendo maior destaque do que os demais objetos utilizados para o uso na mediação externa, já que são mais práticos e programáveis. Diante desta realidade, o autor afirma diz que:

[...] na atual Revolução Digital, testemunha-se a emergência de uma Hiper cultura, 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.85).

Considerando as TIC como aspectos que alicerçam a hiper cultura, é de se esperar que o pensamento associado a ela apresente lógicas e formas de representação análogas a tais tecnologias (SOUZA, 2004, p. 85). Desse modo, o autor da TMC coloca que o “pensamento hiper cultural” deve ser caracterizado por representações visuais, lógicas matemático-científica, elaboradas formas de classificação e ordenamento, e estratégias eficazes para a seleção do que é fundamental, além de algoritmos com o objetivo processar grandes conjuntos de informações.

De acordo com Souza (2004), a Revolução Digital está associada com modificações socioculturais e psicológicas da geração de pessoas habituadas com a hiper cultura, exibindo um novo perfil. O surgimento da hiper cultura está ligado com a criação de novas maneiras de pensar, que geram ganhos cognitivos, de acordo com a Teoria da Mediação Cognitiva.

3.1.2 Fundamentos da TMC

A teoria da mediação cognitiva (TMC) é uma teoria contextualista, construtivista, que estuda o processamento da informação da inteligência humana e visa proporcionar uma abordagem ampla para a cognição humana e está fundamentada nas teorias de Jean Piaget, Gérard Vergnaud, Lev Semenovitch Vygotsky e Robert Sternberg. A teoria fornece uma síntese teórica coerente de teorias psicológicas e estruturais que são geralmente vistas como separadas, ou mesmo em conflito entre si, de modo a produzir um modelo unificado (SOUZA, et al., 2012, p.2).

Conforme Souza (2004), a TMC recorre à teoria de Vygotsky em especial no que diz respeito em relação aos conceitos de internalização de sistemas de signos e de zona de desenvolvimento proximal. De acordo com o autor da TMC, um dos pilares da teoria 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.

Da mesma maneira, o autor da TMC foi buscar na teoria dos campos conceituais de Vergnoud alguns elementos importantes, dentre eles o conceito de teoremas em ação. De acordo com (SOUZA, 2004 apud RAMOS, 2015), 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 Vergnoud, e são desenvolvidos para permitir o processo de mediação e de aquisição de processamento de informações.

O autor da TMC ainda se faz valer do conceito de Piaget 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 acordo com Souza (2004), há uma convergência em relação à forma proposta de aquisição de *drivers* com o processo de equilíbrio de Piaget, visto que tanto um quanto outro descreve o desenvolvimento cognitivo em função de processos dinâmicos básicos.

Segundo Souza (2004 apud RAMOS, 2015), Robert Sternberg desenvolveu a Teoria Triárquica a partir do paradigma do processamento de informação, considerando que a estrutura cognitiva humana possui uma arquitetura específica, com três facetas: primeiro a faceta analítica, responsável pela nossa capacidade analítica; segundo a faceta criativa, responsável pelo pensamento criativo e pela adaptação inovadora e eficaz às novas situações; terceiro 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 realidade. 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” (2004, p. 127 apud RAMOS, 2015).

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 arquitetura distribuídas (SOUZA, 2004, p. 129).

Souza, (2004) evidencia que o cérebro humano isolado se apresenta como insuficiente para explicar a maior parte do desempenho cognitivo. De acordo com Souza (2004), o cérebro humano, bem como os órgãos sensoriais, não tem capacidade suficiente de processamento dos fenômenos e situações vivenciadas por um indivíduo. Desse modo, a pessoa que executar alguma tarefa mental, agregará novos mecanismos, como armazenamento e manipulação de dados, e isso ocupa um “espaço” na memória humana. O recurso é o ser humano expandir a sua capacidade cognitiva por meio de um processamento extracerebral de informações.

O ser humano utiliza esses agentes externos diariamente, obtendo uma melhora cognitiva, como, por exemplo, a anotação de lembretes, sejam eles em papel, ou até mesmo por notas no celular, sendo o primeiro um recurso mais primitivo, enquanto o último faz parte das TIC ou a própria agenda do celular. Através da utilização dessas ferramentas externas de processamento, o indivíduo consegue liberar memória para a realização de atividades (ANJOS, 2022, p. 48).

Desse modo, a TMC apresenta a Mediação e o Processamento extracerebral de Informações como mecanismos que auxiliam no processamento cognitivo.

3.1.3 Mecanismos e Formas de Mediação

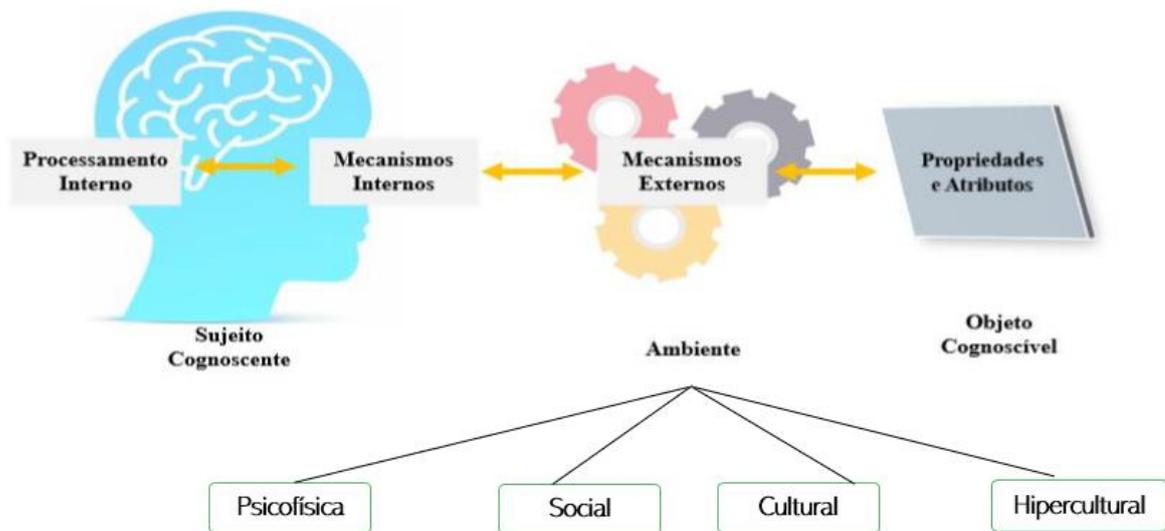
Conforme o autor da TMC, “o processo pelo qual os seres humanos dependem de estruturas externas, a fim de complementar o processamento de informações feito por seus cérebros (cognição extracerebral) é chamado pela TMC de mediação” (SOUZA et al., 2012, p. 2).

Conforme Souza (2004), tal mediação é composta por objeto, processamento interno e mecanismo interno e externo. O objeto refere-se ao conceito abstrato, o problema, a situação, ou algo sobre o qual o indivíduo está tentando construir o conhecimento. O processamento interno caracteriza-se pela atividade cerebral fisiológica que executa as operações lógicas básicas do indivíduo. Os mecanismos internos são representados pela estrutura mental do indivíduo que gerencia algoritmos, códigos e dados, permitindo a conexão, a interação entre o processamento interno do cérebro e o processamento extracerebral, que envolve gerenciamento de *drivers*, algoritmos, protocolos, códigos e dados. Ou seja, é a interação e integração entre o processamento interno e o processamento extracerebral, operando como um *driver* de hardware como um protocolo de rede. Já

em relação aos mecanismos externos, podem ser desde simples objetos físicos a atividades sociais complexas, sistemas simbólicos, artefatos culturais e redes de computadores.

De acordo com a ilustração da figura abaixo, podemos observar um resumo do que ocorre com o processamento cognitivo ao interagir com mecanismos externos para o aumento da capacidade do processamento de informações de um indivíduo.

Figura 1 - Processamento cognitivo por mediação externa.



Fonte: Adaptado de Souza (2004)

Segundo Souza (2004), para interagir com os objetos do ambiente, o indivíduo necessita de certas habilidades que permitam o manuseio desses objetos. Dessa forma, com a utilização de algum mecanismo externo de mediação aparece a necessidade de se desenvolver mecanismos internos que viabilizem a compreensão do funcionamento e das informações fornecidas pela mediação.

De acordo com Souza (2004, p. 65) tais elementos extracerebrais só poderão efetivamente ser de utilidade para um indivíduo, se este dispuser de uma forma de interagir eficazmente com eles, segundo a necessidade e adequadamente, ou seja, para o autor da TMC, é necessário que a estrutura interna do indivíduo compreenda o processamento do que está sendo realizado. Os chamados drivers são estes mecanismos internos que possibilitam essa interação com mecanismos externos.

Conforme Souza (2004), na TMC, os *drivers* são considerados mecanismos internos presentes na estrutura cognitiva do indivíduo que possibilitam a utilização de

mecanismos externos. Portanto, os *drivers* permitem a comunicação entre a estrutura cognitiva do sujeito e o mecanismo externo de processamento de informações, de maneira que ambos possam interagir e o sujeito entenda o funcionamento desse mecanismo externo, a ponto de compreender e internalizar as informações nele contidas.

A mediação cognitiva é possível apenas se existirem mecanismos internos de suporte à mediação que permitam a comunicação e o controlo de eventuais mecanismos de processamento extracerebral, ou seja, quando o indivíduo detém, dentro de si, um conjunto de conhecimentos e habilidades que lhe permitam o acesso e o uso de tais mecanismos externos (SOUZA, 2004, p. 66)

Existem quatro formas de mediação, de acordo como autor da TMC. No quadro abaixo apresentamos a descrição de cada uma das quatro mediações desenvolvidas na TMC retratando os mecanismos externos, mecanismos internos e como ocorre o processamento extra cerebral.

Quadro 1 - As mediações da Teoria da Mediação Cognitiva

Mediação	Mecanismo Externo	Mecanismo Interno	Processamento Extracerebral
Psicofísica	Física do objeto e do ambiente	Sistemas sensoriais	Percepção
Social	Interação entre indivíduos	Habilidades sociais	Percepção e memória
Cultural	Sistemas simbólicos e artefatos	Conhecimento tradicional ou formais	Percepção, memória, categorização e aprendizagem
Hipercultural	Tecnologias da informação	Conceitos e habilidades do domínio da TI	Percepção, memória, categorização e aprendizagem, julgamento, elaboração, tomada de decisões

Fonte: Adaptado de Souza (2004)

A Mediação Psicofísica está relacionada às características fisiológicas do sujeito com a composição do objeto, bem como à posição espacial de ambos e à natureza do ambiente. Já a Mediação Social, quando ocorre a interação com diversos sujeitos em um mesmo ambiente; a Mediação Cultural, implicando a linguagem, sua organização textual e a capacidade de a sociedade relatar experiências e acontecimentos envolvendo categorizações complexas de ideias e conceitos; e a Mediação Hiper-cultural, que se utiliza do acesso à tecnologia, ao computador, às simulações, ou seja, há uso de ferramentas tecnológicas (SOUZA, 2004).

4 REFERENCIAL METODOLÓGICO

Para a análise dos dados metodológicos, utilizamos dois formatos de análise, tanto no âmbito textual, quanto no âmbito gestual.

Com o intuito de buscar informações sobre as relações conceituais desenvolvidas pelos estudantes, realizamos a combinação dos protocolos “Think Aloud” de Van-Someren; Barnard; Sandberg (1994) e “Report Aloud” de Trevisan; Serrano (2019), para a construção das questões que foram utilizadas nas entrevistas. Para analisar e interpretar os dados textuais coletados, utilizamos da Análise de Conteúdo de Bardin (2016). Para a análise gestual foram utilizados dos trabalhos de (CLEMENT, 1994; CLEMENT; STEINBERG, 2002; MONAGHAN; CLEMENT, 1999; STEPHENS; CLEMENT, 2010; 2015)

4.1 REPORT ALOUD

A metodologia utilizada para as entrevistas foi a *Report Aloud* (TREVISAN et al., 2019), que é uma adaptação do método *Think Aloud* (VAN-SOMEREN; BARNARD; SANDBERG, 1994).

No protocolo *Report Aloud* o entrevistador e o entrevistado mantêm uma conversa constante, em que o estudante reporta qual foi o seu processo de pensamento aplicado enquanto estava respondendo às questões, ou seja, o estudante resolve os testes e só depois descreve o que pensou ao respondê-los. A ideia é identificar o que ele pensou ou imaginou no momento que realizou a atividade. Já no *Think Aloud*, o estudante é solicitado a pensar em voz alta conforme está resolvendo alguma situação, ou seja, o que está pensando durante a execução de uma tarefa. O método permite compreender o que o estudante está pensando no exato momento de responder aos questionários ou ao interagir com simulações. Com a utilização do *Report Aloud*, é possível superar alguns obstáculos que podem surgir ao se entrevistar algum participante com timidez, que possa se sentir desconfortável em expor o que está raciocinando naquele momento.

4.2 ANÁLISE GESTUAL POR STEPHENS E CLEMENT

A análise das entrevistas se deu através da técnica de Análise Gestual Descritiva (CLEMENT, 1994; CLEMENT; STEINBERG, 2002; MONAGHAN; CLEMENT, 1999; STEPHENS; CLEMENT, 2010, 2015). É uma análise qualitativa que busca identificar gestos descritivos realizados pelos estudantes.

Ela parte da premissa que existe um vínculo entre esses gestos descritivos realizados pelo indivíduo e suas imagens e simulações mentais presentes em sua estrutura cognitiva. Através dessa análise, acredita-se ser possível identificar como está presente na estrutura cognitiva do estudante os seus conhecimentos após realizar as atividades, bem como identificar a influência delas (SOUZA, 2015, p.103).

De acordo com Clement (1994), existem dois tipos básicos de gestos: o primeiro descreve imagens mentais dinâmicas, isto é, imagens mentais em situações de movimento e outro relacionado a imagens estáticas. O gesto dinâmico, pode ser identificado quando, por exemplo, o estudante movimenta uma das mãos para simbolizar a propagação de uma onda. Já o gesto estático, seria a representação, com as mãos, de uma partícula.

Conforme Monaghan e Clement (1999), esses gestos são uma maneira do estudante externalizar o que está pensando no momento, sendo um indicador de suas imagens e simulações mentais. A interpretação desses gestos realizados pelo aluno é uma fonte de informações não detectáveis através somente do diálogo ou escrita. Por isso é importante analisar além do que o estudante está falando ou explicando, compreendendo o que ele está gesticulando. Há uma relação entre o que o estudante relata verbal e gestualmente, sem que ambas transmitam necessariamente a mesma informação.

Dessa forma, é muito importante a identificação de padrões de gestos e sua relação com os conhecimentos presentes na estrutura cognitiva do estudante. Os gestos são uma linguagem própria, expressando o que o estudante eventualmente não consegue expressar através da linguagem verbal (SOUZA, 2015, p. 104).

Assim, visamos encontrar a relação existente entre as imagens e simulações mentais dos estudantes e seus níveis de compreensão dos fenômenos.

4.3 ANÁLISE DE CONTEÚDO

Para analisar as transcrições das entrevistas realizadas, optamos pela Análise de Conteúdo de Bardin.

Desse modo, a análise de conteúdo mostra-se como um caminho para a compreensão profunda do significado trazido pela mensagem.

Em sua obra, Bardin (2015, p. 31), apresenta a função heurística, a qual, conforme a autora, enriquece a tentativa exploratória e aumenta a propensão para a descoberta. Em relação à função de administração da prova, na qual são construídas hipóteses que servem de diretrizes para a análise, utilizando-se do método de análise sistemático para confirmar ou refutar as hipóteses anteriormente construídas.

Conforme a autora, a análise de conteúdo é um único instrumento, marcado por uma grande disparidade de formas e adaptável a um campo de aplicação muito vasto, as comunicações (BARDIN, 2015, p. 33). Sendo assim, este conjunto de técnicas de análise apresenta como característica fundamental a flexibilidade e a adaptabilidade. Portanto, a autora descreve que os instrumentos a serem utilizados dependem da quantidade de pessoas envolvidas na comunicação e da natureza da mensagem.

Para Bardin (2015), o termo análise de conteúdo designa: um conjunto de técnicas de análise das comunicações visando obter, por procedimentos sistemáticos e objetivos de descrição do conteúdo das mensagens, indicadores (quantitativos ou não) que permitam a inferência de conhecimentos relativos às condições de produção/recepção (variáveis inferidas) destas mensagens (BARDIN, 2015, p. 47).

O aspecto quantitativo manifesta-se por meio das categorias de fragmentação da comunicação, ao longo das quais são identificadas a frequência com a qual cada elemento é aplicado, empregado ou citado. As categorias de fragmentação devem seguir uma sequência de regras para ser possível a validação da análise. Conforme Bardin (2015) as categorias desenvolvidas devem ser homogêneas, exclusivas, pertinentes e objetivas.

Em relação às categorias homogêneas, um único princípio de classificação deve governar a sua organização. Já em relação às categorias exclusivas estipula que cada elemento não pode existir em mais de uma divisão (o mesmo dado não pode ser incluso em mais de uma categoria). No que diz respeito à categoria sobre pertinência, o autor menciona que uma categoria é considerada pertinente quando está adaptada

ao material de análise escolhido, e quando pertence ao quadro teórico definido. No que tange a objetividade, o autor coloca que as diferentes partes de um mesmo material, ao qual se aplica a mesma condição categorial, devem ser codificadas da mesma maneira, mesmo quando submetida a várias análises.

Por fim, as categorias adequadas ou pertinentes devem ser relevantes diante o objetivo da análise.

De acordo com Bardin (2015), o material de documentos que constitui o *corpus* é submetido a um estudo, incluindo os procedimentos de codificação, categorização e classificação. No que diz respeito a codificação, para o autor é a transformação dos dados brutos do texto segundo regras precisas, que permitem atingir uma representação de seu conteúdo. Em relação aos elementos do texto, e ao recorte, Bardin afirma: a unidade de registro ou unidade de contexto elementar (UCE), menor parte do conteúdo, pode ser de natureza e de dimensões muito variáveis. A unidade de contexto deve ser por agrupamento das unidades por similaridade. Já o recorte é a escolha das unidades de registro, e deve-se optar por uma das unidades a seguir: palavra, tema, objeto, personagem, acontecimento, documento e frase.

A parte final da análise de conteúdo, e principal objetivo, é a inferência de conhecimentos relativos às condições de produção. A inferência recorre a indicadores quantitativos ou não, de acordo com (BARDIN, 2015, p. 40).

Neste instante são considerados os índices levantados através da categorização dos recortes. Segundo Bardin (2015) o analista deduz de maneira lógica o sentido da mensagem através da interpretação que possui sobre a mesma.

Bardin (2015) aponta que, a inferência pode se relacionar a problemática de duas formas. Uma delas em compreender o que levou ao enunciado, e neste caso, investiga-se apontar as causas, precedendo a mensagem expressa. Já em relação à segunda forma, há relação com as consequências do enunciado. Dessa maneira, o objetivo do analista limita-se ao impacto que a mensagem pode causar.

Concluindo, a metodologia da análise de conteúdo permite a análise de todo o *corpus* selecionado sob uma única teoria.

5 REAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO ELETROFÍLICA AROMÁTICA (SAE)

O objetivo deste capítulo é ilustrar como ocorre o processo de ensino na escola Affonso Wolf em relação à regioquímica da reação de Substituição Aromática Eletrofílica (SAE) em anel benzênico já contendo um substituinte. Para essa elucidação, ilustraremos as etapas contidas no livro didático da autora Martha Reis da Fonseca.

5.1 CONSIDERAÇÕES

Em relação à Reação de SAE, se já há um substituinte no anel benzênico, um segundo eletrófilo só pode atacar em uma de três posições e uma mistura de compostos *orto*, *meta* e *para* dissubstituídos é obtida. Os antigos químicos descobriram que a orientação relativa dos substituintes nos produtos da reação não dependiam qualitativamente da natureza do eletrófilo. Ao contrário, a orientação do eletrófilo em uma reação com o anel já contendo um substituinte depende da natureza do grupo, que está ligado ao anel (ALLINGER, 1996, p. 325–326). De acordo com Allinger (1996), o nitrobenzeno, por exemplo, dá sempre um produto de reação *meta* dissubstituído para a nitração, sulfonação, bromação, ou qualquer outra reação de substituição eletrofílica.

Para Mc Murry, 2005, os substituintes afetam a reatividade no anel aromático. Alguns substituintes ativam o anel, tornando-os muito mais reativos que o benzeno, outros o desativam, tornando-o muito menos reativo. Por exemplo, na reação de nitração, um substituinte OH, deixa o anel cerca de mil vezes mais reativo que o benzeno, enquanto um substituinte NO₂ torna o anel mais de dez milhões de vezes menos reativo. Os três possíveis produtos de dissubstituição (*orto*, *para* e *meta*), normalmente não são formados na mesma proporção. Ao contrário, a natureza do substituinte que já está presente no anel determina a posição do segundo substituinte (Mc MURRY, 2005). Wolf em relação à regioquímica da reação de Substituição Aromática Eletrofílica (SAE) em anel benzênico já contendo um substituinte. Para essa elucidação, ilustraremos as etapas contidas no livro didático da autora Martha Reis da Fonseca.

5.2 METODOLOGIA DE ENSINO DA SAE EM UM LIVRO DIDÁTICO

O estudo da regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica na Escola Estadual técnica Affonso Wolf, ocorre no terceiro ano do Ensino Médio e no segundo ano do Curso Técnico em Química Integrado ao Ensino Médio. A maioria dos alunos relaciona os grupos localizados no anel aromático como ativadores e desativadores. Segundo os alunos, os grupos ativadores são os responsáveis pela regioquímica nas posições *orto* e *para*, já os grupos desativadores são os responsáveis pela regioquímica em *meta*. Desse modo, os estudantes aprendem a regioquímica das reações de SAE através de tabelas, ou seja, substituintes *orto* e *para* dirigentes e os substituintes *meta* dirigentes.

Tomaremos como exemplo a explicação da autora Martha Reis da Fonseca em relação ao ensino da reação de SAE (FONSECA, 2013, v. 3, p. 166-73).

As reações de substituição em derivados do benzeno — ou qualquer composto aromático que apresente um grupo funcional diferente de hidrocarboneto — são importantes como caminho na síntese de inúmeros compostos de interesse industrial e comercial. Nesse caso, as substituições são orientadas pelo substituinte (ou grupo funcional) que se encontra ligado ao núcleo aromático. Essa orientação pode ocorrer de duas maneiras:

A autora inicia com os substituintes *orto* e *para* dirigentes ou de primeira classe — classificando-os ativantes. São os substituintes que orientam as substituições para as posições 2, 4 e 6 em relação a eles, conhecidas como posições *orto* e *para*. Após ilustra com exemplos alguns substituintes *orto/para* dirigentes.

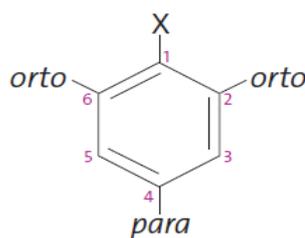
Quadro 2 - Substituintes *orto* e *para* dirigentes.

Substituintes <i>orto</i> e <i>para</i> dirigentes					
amina $\text{H}-\ddot{\text{N}}-\text{H}$	hidróxi $-\ddot{\text{O}}\text{H}$	metóxi $-\ddot{\text{O}}-\text{C}-$	alquila (C_{terciário}) $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	alquila (C_{secundário}) $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{H} \end{array}$	
alquila (C_{primário}) $\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ -\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{H} \end{array}$	alquila $\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ -\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	flúor $-\ddot{\text{F}}:$	cloro $-\ddot{\text{Cl}}:$	bromo $-\ddot{\text{Br}}:$	iodo $-\ddot{\text{I}}:$

Fonte: Fonseca (2013)

Assim, dado um substituinte X de primeira classe, *orto* e *para* dirigente, pertencente a um núcleo aromático, temos a possibilidade de orientação na posição *orto* e *para*, conforme ilustrado na figura abaixo.

Figura 2 - Possibilidade de orientação do grupo orientador X no anel aromático, *orto* e *para*.



Fonte: Fonseca (2013).

Em relação aos substituintes *meta* dirigentes, a autora, classifica-os como de segunda classe – desativantes. De acordo com a autora são os que orientam as substituições para as posições 3 e 5 em relação a eles. Essas posições são conhecidas como *meta*.

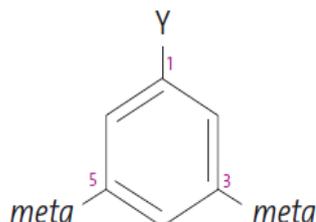
Quadro 3 - Substituintes *meta* dirigentes.

Substituintes <i>meta</i> dirigentes					
nitro $-\text{N}=\text{O}$	sulfônico $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{S}=\text{O} \\ \\ \text{O}-\text{H} \end{array}$	carboxila $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	aldoxila $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C} \\ \\ \text{H} \end{array}$	carbonila $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C} \\ \end{array}$	ciano $-\text{C}\equiv\text{N}$

Fonte: Fonseca (2013).

Assim, dado um substituinte Y de segunda classe, *meta* dirigente, pertencente a um núcleo aromático, temos a possibilidade de orientação na posição *meta*, conforme ilustrado na figura abaixo.

Figura 3 - Grupo orientador X ilustrando a posição *meta*.



Fonte: Fonseca (2013).

A autora faz o seguinte questionamento: é possível saber (sem consultar nenhuma tabela) se um substituinte no anel aromático é *orto*, *para* ou *meta* dirigente? De acordo com Fonseca, a resposta é sim. Podemos pensar, por exemplo, em termos de diferença de eletronegatividade e utilizar a regra dos sinais (FONSECA, 2013, p. 171).

Em relação à regra dos sinais, a autora tece os seguintes comentários: o substituinte que pertence ao núcleo aromático polariza as ligações induzindo alternadamente um caráter negativo a certos átomos de carbono do anel e um caráter positivo a outros. Uma nova substituição sempre ocorrerá nos átomos de carbono que tiverem caráter negativo conforme a figura 4 (FONSECA, 2013, p. 172). Por exemplo, na molécula do fenol, o eletrófilo entrará no carbono 2 ou 6 (posição *orto*) ou no carbono 4 (posição *para*) devido ao sinal negativo no átomo de carbono. Já na molécula do nitrobenzeno, o eletrófilo entrará na posição 3 ou 5 (posição *meta*), conforme a figura 3.

Porém, para conhecermos o valor da eletronegatividade do átomo ligado ao anel aromático (grupo X ou grupo Y), precisamos pesquisar em outras tabelas, como a tabela periódica, ou como a autora ilustra, a escala de eletronegatividade de Linus Pauling.

Tabela 1 - Escala de eletronegatividade de Linus Pauling.

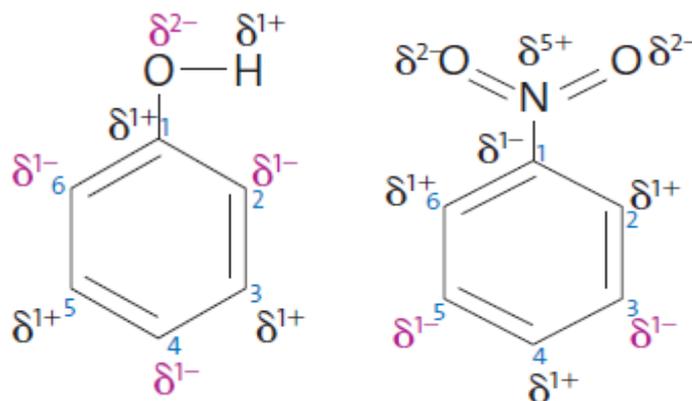
Escala de eletronegatividade de Pauling	
Elemento	Eletronegatividade
F	4,0
O	3,5
N	3,0
Cl	3,0
Br	2,8
I	2,5
S	2,5
C	2,5
H	2,1

Fonte: Fonseca (2013).

A tabela acima ilustra a eletronegatividade de Linus Pauling, onde é possível pesquisar a eletronegatividade dos elementos.

Na figura abaixo, a autora ilustra a densidade eletrônica nos átomos de carbono do fenol e do nitrobenzeno.

Figura 4 - Moléculas do fenol e do nitrobenzeno.



Fonte: Fonseca (2013).

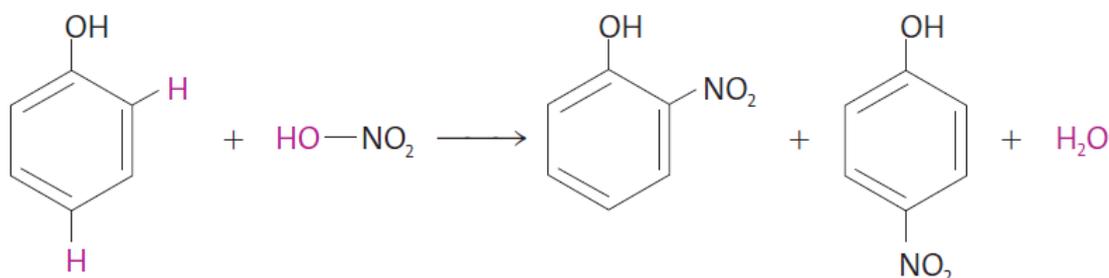
Em relação ao fenol, o oxigênio é mais eletronegativo e atrai para perto de si os elétrons da ligação feita com o carbono 1 do anel aromático, que adquire então um caráter positivo. Esse fenômeno induz a polarização alternada dos demais carbonos do anel. A autora conclui que o grupo hidroxila, OH, é *orto* e *para* dirigente, pois os carbonos 2, 4 e 6 são os que adquirem caráter negativo.

Já para o nitrobenzeno, o oxigênio é mais eletronegativo e atrai para perto de si os elétrons da ligação feita com o nitrogênio, que então adquire caráter positivo e induz o átomo de carbono 1 do anel aromático a se polarizar negativamente. O carbono 1 induz a polarização alternada dos demais carbonos do anel.

A conclusão da autora é que o grupo nitro, NO₂, é *meta* dirigente, pois os átomos de carbono 3 e 5 são os que adquirem caráter negativo.

Em suma, a autora apresenta a mono nitração do fenol. A figura abaixo ilustra a reação de mono nitração do fenol.

Figura 5 - Reação de mononitração do fenol.



Fonte: Fonseca (2013).

Podemos observar que o grupo OH é *orto* e *para* dirigente, temos uma mistura dos isômeros o-nitrofenol e p-nitrofenol. O produto principal (obtido em maior quantidade) é o da substituição em posição *para* (mais estável).

Na posição *orto*, os substituintes estão muito próximos um do outro, gerando um deslocamento de carga que desestabiliza o anel aromático.

6 A MODELAGEM MOLECULAR

Neste capítulo procuramos abordar o que é a modelagem e apresentamos as potencialidades e as principais ferramentas de três *softwares* gratuitos disponíveis na internet, o *software ChemSketch*, o *Avogadro* e o *Arguslab* utilizado nesta pesquisa.

6.1 O QUE É MODELAGEM MOLECULAR

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 constituem o domínio de atuação da modelagem molecular (SANTOS, 2001). Para isso, é fundamental determinar e estabelecer um modelo que consiga representar corretamente o comportamento de um agregado molecular, como por exemplo, os cálculos necessários, as relações intermoleculares, examinando os resultados obtidos a fim de estabelecer à conclusão da validade do modelo.

De acordo com Santos (2001), a existência de propriedades físico-químicas bem definidas da matéria e suas previsões através das leis da física conferem à química um amplo caráter científico. Este fato permite aos químicos criar modelos capazes, em uma certa extensão, de agrupar, prever e desenvolver novos materiais.

Santos (2001), afirma que a utilização de modelos para a descrição de propriedades da matéria leva a possibilidade de cometer-se erros devido às aproximações impostas para simplificar o mundo real. Dentro deste contexto, é importante frisar a diferença entre teoria e modelo. Por teoria entende-se um conjunto de leis capazes de fornecer resultados e conclusões a partir de um número de variáveis conhecidas. Normalmente, espera-se que as teorias se apliquem com a precisão definida pelos próprios limites da natureza. Por outro lado, os modelos têm por objetivo descrever aspectos específicos de certas propriedades do sistema.

A química teórica vai além deste limite, tendo também como função o desenvolvimento de novos modelos. As ramificações dentro desta ampla área de atuação se dão em função da natureza física do modelo utilizado e, evidentemente, do problema em questão (SANTOS, 2001).

De uma forma geral, para Santos (2001), todo tipo de estudo que envolve a aplicação de modelos teóricos utilizando os conceitos de átomo e molécula na

descrição de estrutura e propriedades de interesse em química pode ser classificado como modelagem molecular.

Conforme Rodrigues (2001), a modelagem molecular fornece informações importantes para o processo de descoberta de fármacos. Ela permite a obtenção de propriedades específicas de uma molécula que podem influenciar na interação com o receptor. Como exemplos, podemos citar o mapa de potencial eletrostático, o contorno da densidade eletrônica e a energia e os coeficientes dos orbitais de fronteira HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) e do LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) etc.

Os principais programas de modelagem molecular possuem uma variedade de procedimentos e métodos matemáticos que são utilizados para cálculo de energias e de geometrias moleculares.

Um programa de modelagem molecular permite a representação, visualização, manipulação e determinação de parâmetros geométricos (comprimento e ângulo de ligação) e eletrônicos (energia dos orbitais de fronteira, momento de dipolo, potencial de ionização etc) de uma molécula isolada, além de realizar estudos em macromoléculas (proteínas) e complexos droga–receptor. A grande maioria dos programas de modelagem molecular é capaz de retratar entidades químicas com um alto grau de precisão. Esta afirmação é oriunda de estudos comparativos de parâmetros eletrônicos e geométricos obtidos experimentalmente. Os métodos mais empregados para a obtenção de propriedades moleculares são: a mecânica molecular e os métodos quânticos, sendo que os métodos quânticos estão divididos em duas classes: os semi-empíricos e o ab initio (RODRIGUES, 2001).

A Mecânica molecular (MM) é um todo que calcula a estrutura e a energia das moléculas com base nos movimentos dos núcleos. Os elétrons não são considerados explicitamente, mas ao contrário, é assumido que eles encontrarão uma distribuição ótima, uma vez que as posições dos núcleos são conhecidas. Esta ideia é baseada na aproximação de Born-Oppenheimer. Esta aproximação estabelece que os núcleos são mais pesados e, portanto, movem-se mais lentamente do que os elétrons. Desta forma, os movimentos nucleares, as vibrações e as rotações podem ser estudadas separadamente, admitindo que os elétrons se movem rapidamente, e ajustam-se aos movimentos do núcleo. Assim, pode-se admitir que a mecânica molecular trata a molécula como uma coleção de esferas conectadas por molas, onde as esferas representam os núcleos e as molas representam as ligações (RODRIGUES, 2001).

Os métodos semi-empíricos são baseados no mesmo formalismo dos métodos ab initio, mas parte de seus parâmetros são ajustados a dados experimentais. A parametrização dos métodos semi-empíricos com dados experimentais aumentou significativamente a acuracidade química e a velocidade dos métodos de orbitais moleculares. Os métodos semi-empíricos mais recentes são AM1 (Austin Model 1) e PM3 (Parametric Method 3) contidos em diversos pacotes de cálculos teóricos. Do ponto de vista da estrutura das ligações hidrogênio, importantes em sistemas biológicos, o método PM3 tem apresentado resultados mais próximos aos obtidos experimentalmente e por cálculos ab initio. As diversas aproximações semi-empíricas permitem evitar o cálculo de um grande número de integrais, o que possibilita a aplicação destes métodos em sistemas com um número maior de átomos. Nestes métodos, os núcleos são assumidos em sucessivas posições estacionárias, sobre as quais a distribuição espacial ótima dos elétrons é calculada pela resolução da equação de Schrödinger. O processo é repetido até que a energia não mais varie dentro de um limite escolhido, ou seja, até se alcançar um ponto estacionário da superfície de energia (RODRIGUES, 2001). Já os métodos ab initio de acordo com Morgon e Coutinho (2001), também são baseados na equação de Schrödinger, e caracteriza-se por ser um método auto-consistente, onde nenhum parâmetro experimental é utilizado, todas as integrais são avaliadas, além disso, é um método mais lento, mais preciso e os resultados são mais próximos do real.

6.2 SOFTWARES DE MODELAGEM MOLECULAR

Os *softwares* educacionais estão sendo a cada vez mais aperfeiçoados e utilizados na área de ensino, como química, física, biologia e matemática. Os *softwares Avogadro, ChemsSketch e o Arguslab* são ferramentas que atendem essa necessidade, além de estarem disponíveis gratuitamente na rede mundial de computadores. A seguir explanaremos as suas principais características e funcionalidades.

6.2.1 ACD/ChemSketch

O *Software ACD/ChemSketch* nos permite reproduzir estruturas químicas, incluindo compostos orgânicos, organometálicos e polímeros; realizar cálculos

essenciais, obtendo assim, as propriedades básicas da molécula (BATISTA et al., 2016).

Este *software* permite calcular ainda, a valência de cada átomo restringindo a construção da molécula de acordo com a regra do octeto, a não ser que este seja programado a não fazer esta limitação (RAUPP; SERRANO; MARTINS, 2008). O *software* é empregado também em mecanismos de reações, proporcionando uma compreensão da disposição espacial das moléculas, trabalhando a movimentação destas no espaço; e para visualização de diagramas esquemáticos como equipamentos utilizados em laboratórios de Química e outros campos gerais na área de Química (BATISTA et al., 2016).

Podemos apresentar como vantagem do *software ACD/ChemSketch*, possibilitar a realização de desenhos de estruturas moleculares complexas, ser *freeware*, com interface e comandos simples, o que possibilita a sua utilização em qualquer computador e de forma gratuita, e pelo fato deste *software* disponibilizar diversas funções, não se limitando a uma tarefa específica, o mesmo oportuniza à sua utilização, para realização das mais diversas funções e tarefas relacionadas à química (BATISTA et al., 2016).

6.2.2 Avogadro

De acordo com Batista et al. (2018), o *Software Avogadro* é uma avançada ferramenta de visualização e edição molecular gratuita e de código aberto projetado para uso entre plataformas em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e áreas relacionadas. Oferece renderização flexível de alta qualidade e uma poderosa arquitetura de plugins. Dentre suas ferramentas, se destacam a possibilidade de multiplataforma (construtor/editor molecular); manipular estruturas 3D; instalação fácil e gratuita; intuitivo (construído para trabalhar com facilidade tanto para estudantes avançados quanto para pesquisadores; traduções para chinês, francês, alemão, italiano, russo, espanhol entre outras línguas; determina diversas propriedades dos compostos desenhados, tais como: cálculo de energia e massa molecular; flexível, os recursos incluem a importação aberta de arquivos químicos do Babel, a geração de entrada para vários pacotes de química computacional, cristalografia e biomoléculas.

O *software* também permite que as moléculas criadas em 3D possam ser vistas sob vários ângulos, como uma animação, função esta que colabora muito para a transmissão do conteúdo e compreensão por parte do aluno em termos de visualização, é uma alternativa que permite que o professor faça a interação com os alunos, mostrando os tipos de ligação e geometria das moléculas, o que é complicado quando se usa apenas o livro didático e figuras em duas dimensões (SANTOS; WARTHA; FILHO et al., 2010 apud BATISTA et. al., 2018).

Por ter uma interface de fácil entendimento e manuseio, pode ser utilizado como recurso na compreensão de conceitos como: geometria molecular, identificação dos ângulos de ligação, torção dos ângulos, hibridações, cálculo de energia e massa molecular, arranjo cristalino em aglomerados moleculares entre outros. Determina comprimentos de ligação, ângulos e diédricos. O programa apresenta também propriedades moleculares, tais como: nomenclatura das moléculas conforme a IUPAC, peso molecular, fórmula química e número de átomos (BATISTA et al., 2018).

Conforme Batista et al. (2018), o *software* Avogadro também faz cálculos de mecânica molecular, voltados para simulação computacional em química, sendo um excelente recurso para alunos e professores. As extensões representam uma variedade bastante diversificada de plugins, incluindo diálogos de geração de entrada para vários códigos de química quântica, como GAMESS, Molpro, Mopac, NWChem, etc., animação da molécula e visualização de orbitais moleculares e densidade eletrônica, visualização de espectros.

Além de construir moléculas átomo-a-átomo, também permite construir uma molécula de fragmentos. Os usuários podem inserir fragmentos pré- construídos de moléculas, ligantes ou sequências de aminoácidos comuns, ele inclui mais de 300 moléculas comuns e fragmentos moleculares para facilitar a construção de estruturas maiores. Em todos os casos, após a inserção do fragmento, a ferramenta de manipulação centralizada no átomo é selecionada, permitindo que o fragmento seja movido ou girado na posição facilmente (RODRIGUES, 2001 apud BATISTA et al., 2018).

O programa também apresenta a possibilidade da visualização dos Mapas Potenciais Eletrostáticos que fornece a informação sobre os possíveis sítios de ligação entre as moléculas e seus receptores. Essas superfícies podem ser utilizadas para comparar com inibidores de diferentes substratos ou de estados de transições

reacionais, incrementando assim, a descoberta de novos fármacos (RODRIGUES, 200 apud BATISTA et al., 2018).

6.2.3 Arguslab

O *Software Arguslab* é distribuído livremente para plataformas Windows pela Planaria Software. O *software* permite desenhar e modificar estruturas em 3D, conhecer todas as características químicas sobre o carbono e sua ligação covalente, medir as distâncias de ligação, os ângulos de ligação. Além dessas possibilidades, os alunos podem se familiarizar com moléculas orgânicas e com moléculas bioquímicas.

De acordo com Batista, Marinho, Márcia Marinho e Emmanuel (2017), o *Arguslab* apresenta sua interface na língua inglesa, onde seus menus são disponibilizados na parte superior e possui a opção de disponibilizar os comandos na forma de pictogramas, facilitando assim, a sua utilização. Trata-se de *software* avançado, que permite realizar modelagem molecular, à nível de teoria quântica, que pode ser empregado para realizar cálculos teóricos (otimização de geometria, energia e propriedades) no nível de teoria MM, EHT, AM1 / PM3 e MNDO / ZINDO e ainda, obtenção do MESP (Mapa de Potencial Eletrostático), as energias dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), docking molecular, sua otimização e visualização 3D.

Outra possibilidade, é plotar os orbitais moleculares, que tem um papel crucial no entendimento da reatividade química e nível atômico e são importantes descritores para a racionalização de várias reações químicas. Neste contexto, o conceito de orbital de fronteira refere-se ao uso da densidade eletrônica dos orbitais de fronteira, HOMO e LUMO, para prever a posição mais reativa sobre espécies químicas: HOMO (Orbital Molecular Ocupado de maior energia) e LUMO (Orbital Molecular desocupado de menor energia). Estas funções colaboram muito para a transmissão do conteúdo e compreensão por parte do aluno em termos de visualização, é uma alternativa que permite que o professor faça a interação com os alunos, mostrando os tipos de ligação e geometria das moléculas, o que é complicado quando se usa apenas o livro didático e figuras em duas dimensões (SANTOS et al., 2010 apud BATISTA; MARINHO; MARINHO, 2017).

O programa também apresenta a possibilidade de plotar o mapa de superfície de potencial eletrostático (MESP), que fornece a informação sobre os possíveis sítios de ligação entre as moléculas e seus receptores. Essas superfícies podem ser

utilizadas para comparar com inibidores de diferentes substratos ou de estados de transições reacionais, incrementando assim, a descoberta de novos fármacos (RODRIGUES, 2001 apud BATISTA; MARINHO; MARINHO, 2017).

Pesquisadores na área do ensino, buscam por meios que possam otimizar a compreensão dos alunos sobre conceitos de Química ou de Ciências em geral. Dentre os novos meios ou tecnologias, podemos destacar recursos como os *softwares* de modelagem molecular, que potencializam a aprendizagem. O *Avogadro*, o *ChemSketch* e o *Arguslab* são *softwares* educacionais disponibilizados para o exercício do ensino-aprendizado, programas que permitem desenhar estruturas químicas, obtendo suas propriedades moleculares, dentre outras funções, são programas gratuitos que podem ser utilizados livremente, contendo interface compatível com a maioria dos editores de texto e com a Internet, e são programas de fácil manipulação e praticidade, sendo empregado na realização de diversas tarefas. O emprego destes *softwares* pode servir como ferramenta de suporte e recurso didático auxiliar à assimilação do conteúdo, facilitando o entendimento dos alunos em temáticas que são vistas como abstratas e de difícil assimilação.

7 DELINEAMENTO METODOLÓGICO

Este capítulo descreve a metodologia da investigação. Para melhor compreensão, o capítulo está dividido em quatro partes, na primeira é descrito o teste piloto, na segunda parte a caracterização do experimento definitivo, na terceira os materiais desenvolvidos, e na quarta parte o desenvolvimento do experimento definitivo (desenvolvimento das atividades de modelagem molecular).

7.1 TESTE PILOTO

A nossa intenção inicial era iniciar a aplicação dos procedimentos da pesquisa no mês de agosto de 2020. A programação seria dividida em quatro etapas: pré-teste; aulas de modelagem molecular computacional; pós-teste e entrevistas. Decidimos por este formato após observarmos tal formato em trabalhos encontrados na revisão bibliográfica.

A partir do dia 15 de março de 2020, às aulas presenciais na escola foram canceladas, devido à Pandemia de Covid-19. Optamos por esperar durante algum tempo a volta à normalidade, mas o quadro pandêmico piorava com o passar do tempo no estado e no país. Diante do quadro pandêmico foi necessário cancelar esta etapa da pesquisa. Desse modo, o teste piloto ocorreu entre o final do mês setembro de 2020 e a primeira quinzena de 2020.

7.1.1 Participantes da Pesquisa do Teste Piloto

Os participantes escolhidos foram quatro alunos da turma do terceiro ano do Curso Técnico em Química Integrado ao Ensino Médio. Os critérios de escolha destes estudantes foram os seguintes: comprometimento nas aulas durante o curso, vontade de aprender, interesse pelo assunto, e todos os estudantes possuíam computadores (notebooks). Alunos do teste piloto já enfrentavam dificuldades em relação ao currículo não cumprido em algumas disciplinas, tempo reduzido, o aprendizado de Química baseado em duas dimensões, e a modalidade atual de ensino não gera uma proposta aos alunos para o desenvolvimento da capacidade visuoespacial.

No que se refere aos tópicos sobre Reações de SAE visto no segundo ano do curso profissionalizante, os mesmos foram aplicados em curto espaço de tempo e de maneira muito rápida, dificultando o entendimento por parte dos alunos.

Salientamos que os conceitos de eletrófilo, nomenclatura *orto*, *meta* e *para* e Reações de SAE eram de difícil compreensão para os alunos, além de estarem no esquecimento devido ao tempo.

Os estudantes já haviam estudado tópicos como fundamentos da Química Orgânica estrutural, funções orgânicas, propriedades físicas de compostos orgânicos, e isomeria e cargas parciais de átomos durante as aulas curriculares da disciplina de Química Orgânica no primeiro ano do curso profissionalizante. Já em relação aos conceitos como otimização da geometria, geração de cargas parciais de átomos através do relatório no *software* e ao mapa de potencial eletrostático, os mesmos foram introduzidos por conta da atividade de modelagem molecular, com objetivo de alavancar os conhecimentos da disciplina de Química Orgânica do curso técnico.

Dos quatro alunos, destacamos o aluno APL (agora denominado de aluno piloto). O mesmo destacou-se pela participação e realização das atividades, e através desse aluno consideramos que tanto o pré-teste como o pós-teste e os roteiros de modelagem molecular foram validados.

Devido ao rearranjo organizacional das aulas online, e a adaptação da escola e dos professores a nova realidade vigente, não havia tempo hábil para desenvolver muitas atividades, porque as aulas eram divididas entre todas as disciplinas do currículo e do curso técnico. Desse modo, os alunos tinham aulas limitadas de todas as disciplinas, e não podiam exceder o número de encontros remotos diários. Os encontros virtuais eram de no máximo 30 min; a turma TQI 31 tinha o prazo de 5 semanas para finalizar as atividades em casa; os alunos enfrentaram o excesso de atividades, ou seja, as 14 disciplinas do ensino profissionalizante juntamente com as 14 disciplinas do Ensino Médio. A turma estava no último ano do curso e os alunos não tiveram aulas de laboratório durante o ano de letivo de 2020; os conteúdos do EM como os do Curso Técnico estavam atrasados e não seriam contemplados na sua totalidade, o que gerava muita ansiedade por parte dos alunos. Na nossa opinião, diante do contexto acima, os fatos prejudicaram os alunos no desempenho na modelagem molecular.

Desse modo, decidimos aplicar o pré-teste no final do mês de setembro de 2020. Tanto o pré-teste como o pós-teste eram compostos de oito questões estruturadas, sendo quatro questões de múltipla escolha.

A seguir apresentamos as questões do pré-teste e do pós-teste com os respectivos comentários.

7.1.2 Experimento Piloto

Através do experimento piloto consideramos a validação dos roteiros de modelagem molecular e do pré-teste e do pós-teste por meio do estudante APL. Após realizamos os devidos ajustes nos roteiros, pré-teste e no pós-teste. A seguir descrevemos as questões do pré-teste e do pós-teste com os respectivos objetivos. Tanto o pré-teste como o pós-teste eram compostos de oito questões estruturadas, sendo quatro questões de múltipla escolha. O pré-teste e o pós-teste encontram-se no (APÊNDICE A).

A primeira questão, de múltipla escolha, envolvia o conceito sobre eletrófilo, quais dos grupos fornecidos seriam eletrófilos. A pergunta propõe que o estudante marcasse a resposta de acordo com o seu conhecimento prévio sobre eletrófilo.

1) Qual ou quais grupos abaixo são eletrófilos?

() NH_4^+ ; Cl^- ; NO_2^+ ; Br^+

() Br^+ ; OH^- ; H^+ ; CH_3^+

() CH_3^+ ; H^+ ; Cl^+ ; NO_2^+

() Cl^- ; Br^- ; OH^- ; I^-

A segunda questão de múltipla escolha, envolvia o conceito sobre grupos orientadores *orto/para* e *meta*. O objetivo era verificar a noção do estudante sobre a orientação desses grupos no anel e verificar o conhecimento sobre o conceito destes grupos por parte dos alunos.

2) Relacione as colunas para grupo ativador (orientador *orto* e *para*) e grupo desativador (orientador *meta*)?

a) NH_3 ; $-\text{CH}_3$; $-\text{OCH}_3$; $-\text{OH}$

b) $-\text{CO}$; $-\text{CN}$; $-\text{NO}_2$; $-\text{COOH}$

() São os que orientam as substituições nas posições 3 e 5 em relação a eles, posição conhecida como *meta*

() São os substituintes que orientam as substituições nas posições 2, 4 e 6 em relação a eles, conhecidas como posições *orto* e *para*.

A questão três envolvia um grupo genérico ligado ao anel benzênico, e ao reagir com a molécula do eletrófilo qual seria a(s) possíveis posições no anel, identificando as mesmas. O objetivo era verificar se o aluno conseguiria fazer as orientações possíveis.

3) Considere uma molécula com anel aromático (benzeno) e um grupo genérico ligado ao anel. Ao reagir à molécula com um eletrófilo (E^+), qual às orientações possíveis do eletrófilo no anel? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes. Em relação as questões 4, 5 e 6 o objetivo era verificar qual as posições que os respectivos grupos OH (hidroxila); NO_2 (nitro) e Cl (halogênio) orientariam o grupo NO_2^+ no anel. Questão típica encontrada nos livros didáticos.

4) Com relação à molécula do fenol, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.

5) Com relação à molécula do nitrobenzeno, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.

- 6) Com relação à molécula do clorobenzeno, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes. Já a questão sete envolvia o conceito sobre mapa de potencial eletrostático, qual o significado que os alunos atribuíam ao mapa de potencial, importantíssima ferramenta para visualização da distribuição da carga elétrica sobre a molécula.
- 7) Em relação ao Mapa de Potencial Eletrostático de uma Molécula, marque a alternativa correta:
- () Mostra a distribuição tridimensional de carga elétrica na molécula
 - () Mostra a distribuição dos átomos na molécula
 - () Através do Mapa de Potencial Eletrostático podemos definir se uma molécula é neutra ou negativa
 - () Mostra a geometria molecular da molécula

Finalizando com a questão oito, que na concepção tem a mesma relação com a pergunta sete.

- 8) Qual a finalidade do Potencial Eletrostático de uma molécula?
- () O Potencial Eletrostático mede a interação das ligações entre os átomos na molécula
 - () O Potencial Eletrostático mede a interação de uma carga positiva com núcleos e elétrons de uma molécula ao longo de uma superfície de densidade eletrônica
 - () O Potencial Eletrostático mede a interação núcleo – núcleo entre os átomos de uma molécula bem como a sua densidade eletrônica
 - () O Potencial Eletrostático mede a interação entre elétrons em uma molécula

Tanto o pré-teste, pós-teste, aulas de modelagem e entrevistas foram agendados através do WhatsApp e Google Sala de Aula. Após a aplicação do pré-

teste, iniciamos as aulas com as atividades sendo realizadas no Google Meet. Devido ao curto tempo das aulas, os estudantes complementavam as atividades fora dos horários das aulas em suas residências. No quadro abaixo ilustramos as atividades desenvolvidas com os alunos durante o experimento piloto.

Quadro 4 - Atividades desenvolvidas no experimento piloto.

Planejamento	Conteúdo Proposto	Ações do Professor	Tempo (min)
Aula 1: pré-teste	Questões envolvendo modelagem molecular	Fornecer o pré-teste e acompanhar os alunos no Google Meet (APÊNDICE A)	60
Aula 2: explicações sobre a instalação do <i>software</i>	Instalação do <i>software</i>	Fornecer o site do <i>software</i> e auxiliar na instalação	30
Aula 3: primeiros passos no <i>software</i>	Como abrir um arquivo, salvar, deletar átomos, ligações e construir a molécula da água	Fornecer o roteiro (APÊNDICE C) e orientações no processo	30
Aula 4: modelagem da molécula do benzeno	Construir a molécula do benzeno: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos através da geração do relatório das cargas de Mulliken e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE H) e orientações no processo	30
Aula 5: modelagem da molécula do clorobenzeno	Construir a molécula do clorobenzeno: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE I) e orientações no processo	30
Aula 6: modelagem da molécula do fenol	Construir a molécula do fenol: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE J) e orientações no processo	30
Aula 7: modelagem da molécula do nitrobenzeno	Construir a molécula do nitrobenzeno: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE K) e orientações no processo	30
Aula 8: pós-teste	Questões envolvendo modelagem molecular	Fornecer o pós-teste e acompanhar os alunos no Google Meet (APÊNDICE A)	60

Fonte: A pesquisa.

Durante as aulas foram desenvolvidas cinco atividades de modelagem, sendo sete o total de encontros até a realização do pós-teste.

No primeiro encontro foi realizado o pré-teste com oito questões estruturadas sobre modelagem molecular, sendo quatro questões de múltipla escolha. Após a realização do pré-teste iniciaram as aulas de modelagem molecular através do Google Meet. Por meio de encontros semanais com duração de 30 min para as aulas, com exceção ao pré-teste e pós-teste que tiveram a duração de 60 min. Os encontros semanais foram extra classe, ou seja, fora do horário das aulas da disciplina, com autorização concedida pela direção.

No segundo encontro os estudantes tiveram como atividade a instalação do *software* de modelagem molecular Arguslab.

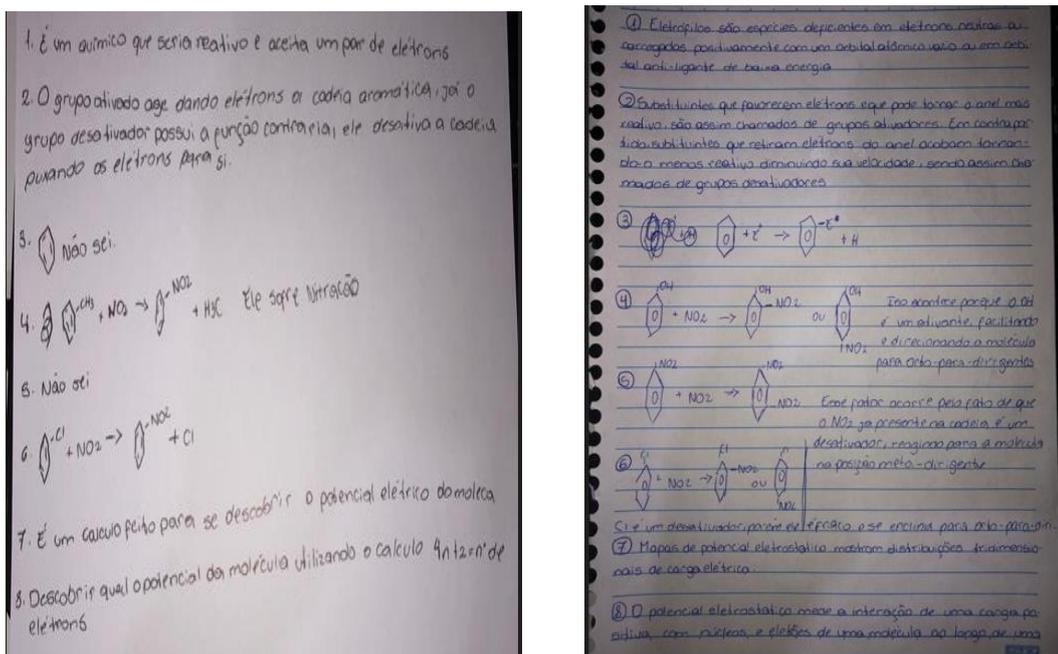
Na terceira aula as atividades propostas foram as de iniciação no *software*, contemplando os seguintes exercícios: como abrir e salvar um arquivo, deletar átomos, ligações e construir a molécula da água. Já a quarta atividade consistia na modelagem da molécula do benzeno. Na quinta, sexta e sétima aula o objetivo proposto era o de modelar a molécula do clorobenzeno, fenol e do nitrobenzeno, considerados exercícios de modelagem mais complexos para os alunos. Os exercícios propostos foram de otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula.

Concluindo, no oitavo encontro, a aplicação do pós-teste. Após a finalização das atividades, aplicamos o pós-teste, e logo após as entrevistas, com as mesmas questões do pré-teste.

7.1.3 Resultados

Em relação aos resultados, decidimos analisar os resultados mais significativos. Assim, optamos por analisar os resultados de um dos quatro alunos, que denominamos de APL (aluno piloto). Abaixo apresentamos os resultados do pré-teste e no pós-teste.

Figura 6 - Resultados do Aluno APL no pré-teste e no pós-teste no experimento piloto.



Fonte: A pesquisa.

No pré-teste verificamos as dificuldades inerentes da questão sobre a reação de SAE. Já no pós-teste a evolução conceitual por parte do aluno, acertando a resposta na reação da molécula do benzeno, fenol, nitrobenzeno e no clorobenzeno. Conforme as respostas do aluno APL durante a entrevista, e comparando as respostas escritas no pré-teste e pós-teste, acreditamos que as respostas no pré-teste tenham origem cultural, mas não temos condições de saber a respeito da origem da mediação hipercultural, isto, porque não fomos enfáticos durante a entrevista, ou seja, não questionamos o aluno em relação à origem. Então, não podemos afirmar sobre a aquisição ou não de *drivers* hiperculturais. O estudante não fez gestos significativos durante a entrevista, mas de acordo com Ramos (2015), o fato dele não fazer gestos durante a entrevista não quer dizer que o aluno não esteja produzindo imagens mentais estáticas, ele somente não está externando essas imagens com um gesto. Sempre que o aluno gesticula ele está externando uma imagem mental, mas quando ele não gesticula não quer dizer que ele não tenha essa imagem mental produzida para poder responder. Concluindo, justificamos que provavelmente as questões dos testes e da entrevista não tenha sido suficiente para perceber isso.

O mesmo ocorreu em relação as demais questões, o que é um eletrófilo, o que são grupos ativadores e desativadores, e o que é o mapa de potencial eletrostático.

7.1.4 Considerações e Ajustes Metodológicos

Após a conclusão do experimento piloto, julgamos necessário fazer alguns ajustes em relação às perguntas. Ao pré-teste e ao pós-teste retiramos a questão “Qual a finalidade do Potencial Eletrostático de uma molécula” que era semelhante à pergunta “o que é o mapa de potencial eletrostático”. Adicionamos a questão “faça o desenho da molécula da amônia usando a representação 2D e 3D”; “represente a molécula da água e da amônia nas suas respectivas geometrias e responda se a molécula é polar ou apolar”, e a pergunta aberta “o que você sabe sobre modelagem molecular”. O objetivo era adicionar questões de modelagem menos complexas mesclando com as questões mais complexas. Também reavaliamos a questão em relação à reação com o eletrófilo com a molécula do benzeno, pois estava mal formulada. Inserimos a questão represente a molécula do benzeno desenhando as duas representações com as ligações conjugadas em um desenho com as ligações tracejadas, para verificar dados sobre aromaticidade. Por fim, a questão escreva tudo o que você sabe sobre geometria molecular, como se estivesse explicando para um colega. Após os ajustes, o pré-teste e o pós-teste ficaram constituídos com dez questões.

Concluimos, que as aulas de modelagem não devem ser realizadas nas aulas da disciplina de Química, devido ao tempo reduzido e a concorrência com as demais disciplinas do currículo. Desse modo, a nossa decisão de manter aulas extras em relação ao currículo foi assertiva. No experimento definitivo também optamos por fazer aulas paralelas em relação ao currículo. Após os ajustes no pré-teste e pós-teste, consideramos pela validação dos mesmos e dos roteiros de modelagem por meio do aluno APL.

7.2 EXPERIMENTO DEFINITIVO

A pesquisa foi realizada na Escola Estadual Técnica Affonso Wolf, localizada na cidade de Dois Irmãos, região metropolitana de Porto Alegre/RS. Durante o período da pesquisa a escola contava com aproximadamente 950 estudantes matriculados no Ensino Médio e Técnico. A escola possui os cursos Técnico em Química e Design de Móveis, assim conta com laboratórios específicos para ambos.

7.2.1 Participantes da Pesquisa do Experimento Definitivo

A turma era constituída de vinte alunos, sendo que inicialmente quinze alunos decidiram participar da pesquisa. Com o decorrer das aulas, três alunos desistiram. No final, além do professor-pesquisador, participaram da pesquisa doze estudantes do terceiro ano do Curso Técnico em Química Integrado ao Ensino Médio, com idades entre 16 e 17 anos. A escolha dos estudantes se deu pelo fato de estarem na turma da qual o pesquisador era o professor titular da disciplina de Química no EM e Química Orgânica no ensino técnico, e a maioria dos alunos iniciou os estudos no ensino fundamental na própria escola, e todos os vinte alunos da turma possuíam acesso a computadores, ou seja, tinham seus próprios notebooks.

Os estudantes já haviam estudado tópicos como fundamentos da Química Orgânica estrutural, funções orgânicas, propriedades físicas de compostos orgânicos, e isomeria e cargas parciais de átomos durante as aulas curriculares da disciplina de Química Orgânica no primeiro ano.

Assim como os alunos do experimento piloto, os estudantes do experimento definitivo já enfrentavam dificuldades em relação ao currículo não cumprido em algumas disciplinas, tempo reduzido, o aprendizado de Química baseado em duas dimensões, e a modalidade atual de ensino não gera uma proposta aos alunos para o desenvolvimento da capacidade visuoespacial.

Já em relação aos conceitos como otimização da geometria, geração de cargas parciais de átomos através do relatório no *software* e ao mapa de potencial eletrostático, os mesmos foram introduzidos por conta da atividade de modelagem molecular, com objetivo de alavancar os conhecimentos da disciplina de Química Orgânica do curso técnico.

No que se refere aos tópicos sobre Reações de SAE visto no segundo ano do curso profissionalizante, os mesmos foram aplicados em curto espaço de tempo e de maneira muito rápida, dificultando o entendimento por parte dos alunos.

Salientamos que os conceitos de eletrófilo, nomenclatura *orto*, *meta* e *para* e Reações de SAE eram de difícil compreensão para os alunos.

Em relação à turma, destacamos o aluno que denominaremos de *expert M*. O *expert* foi o destaque da turma durante o curso, ou seja, era um autodidata, ensinava os demais colegas quando necessário, participou de Olimpíadas de Química, e

estudou e fez muitos exercícios do livro dos autores Peter Atkins e Loretta Jones *Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*.

Em relação ao *expert*, no que diz respeito aos conhecimentos prévios sobre os conteúdos, otimização da geometria, mapas de potencial eletrostático, os mesmos já eram familiares. Salientamos que os conceitos de eletrófilo, nomenclatura *orto*, *meta* e *para* e Reações de SAE eram de fácil compreensão, além de estarem memória devido aos estudos para as Olimpíadas de Química.

O *expert* afirmou durante as entrevistas que já tinha estudado tudo o que viu na modelagem molecular na literatura. O conteúdo de geometria molecular, os modelos VSEPR, tudo ele já tinha tido contato com livros e na preparação para as olimpíadas. Segundo o *expert*, o Arguslab apenas reforçou tudo o que ele já havia aprendido, enfim, comenta, o Arguslab foi muito interessante para exercitar essas questões. Na verdade, conforme o *expert* declarou, o Arguslab foi um organizador de ideias, ou seja, um organizador prévio.

7.2.2 Contexto da Pesquisa

As mudanças, oriundas o teste piloto, foram ajustadas e as atividades do experimento definitivo tiveram início em março de 2021.

Desse modo, a pesquisa foi desenvolvida remotamente, e aqui considera-se o remoto como uma adaptação temporária do ensino presencial, onde os estudantes e o professor-pesquisador não compartilham o mesmo espaço físico, mas mantêm contato virtualmente, por *e-mail*, *WhatsApp* ou *Google Meet*. A utilização do aplicativo de comunicação *WhatsApp* foi de grande relevância para a investigação em relação ao esclarecimento de dúvidas.

Assim como no experimento piloto, pedimos autorização da direção da escola para a realização das atividades extra classe.

7.3 MATERIAIS DESENVOLVIDOS

Para poder realizar uma análise confiável de dados qualitativos, é interessante desenvolver o maior número possível de ferramentas para a criação de dados. Desse modo, utilizamos os seguintes instrumentos de pesquisa: um pré-teste e um pós-teste

escrito e individual (o pré-teste e o pós-teste são os mesmos), e roteiros de modelagem molecular.

7.3.1 Entrevistas

As entrevistas com os alunos foram realizadas individualmente, agendadas via Google Meet e caso fosse necessário, reagendadas via WhatsApp, em horários estabelecidos entre o professor-pesquisador e os alunos. Todas as entrevistas foram gravadas, e realizadas através do Google Meet, ou seja, por videochamada. Os alunos tiveram acesso a todos os seus testes e roteiros, através do compartilhamento de tela.

As entrevistas foram baseadas nas perguntas e respostas do pré-teste e pós-teste. Todos os doze participantes realizaram as entrevistas, totalizando doze vídeos gravados. Por meio das entrevistas que se deu a análise qualitativa, buscando identificar as simulações e imagens mentais utilizadas pelos estudantes, bem como a origem delas.

Para a análise dos dados seguimos o proposto conforme o referencial metodológico.

Acreditamos que para identificar as representações e *drivers* adquiridos pelos estudantes por mediação por computador, e para a entrevista conseguir revelar este conhecimento, entendemos 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 pelo estudante. Além do que, cabe ao entrevistador buscar constantemente a realização de comparações entre as respostas dos testes pré-modelagem e pós-modelagem.

Assim sendo, destacamos como critério fundamental para saber com certeza se a aquisição do *driver* é de natureza cultural ou hipercultural, é a profundidade realizada nos questionamentos durante a entrevista, ou seja, se fomos a fundo nos questionamentos durante a entrevista. Cabe mencionar que as nossas entrevistas tiveram falhas, isto é, em determinados pontos não fomos com a profundidade necessária que deveria ser. Por isso, temos em alguns casos dificuldades de esclarecer a origem desses *drivers*. Mas em outros casos realizamos novas entrevistas de curto período com alguns estudantes que se disponibilizaram, como: *expert* M, aluno W, aluno GH, aluna MT e a aluna V. Outros detalhes importantes

como simplesmente analisar gestos pode não levar à conclusão, ou seja, é inconclusiva. Em relação ao desenvolvimento da capacidade visuoespacial, seria interessante realizar uma entrevista antes do pré-teste e outra após o pós-teste.

Em relação ao intervalo de tempo entre as entrevistas extras e a primeira entrevista, estudos apontam que, o tempo transcorrido entre a realização das atividades e a entrevista, como ocorre no *Report Aloud*, não interfere nos resultados (RAMOS, 2015; WOLFF, 2015; TREVISAN, 2016).

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

P: Com relação à molécula do fenol, qual o nome da posição nos Carbonos 2, 3 e 6? Escreva o nome nos retângulos abaixo? O que tu estavas imaginando quando leu a questão e foi responder?

W: pois é, eu havia entendido essa questão como eu tenho que nomear qual o carbono da ligação *orto*, carbono da ligação *meta* e carbono da ligação *para*. Então, eu fiz o anel só para representar o anel do Benzeno.

P: É anel benzênico aquilo ali?

W: Falta as ligações duplas.

P: Tu sabes como seria a molécula do fenol?

W: Com um OH na ponta. Certo?

P: Então faz de novo aí no papel.

W: Tá bem.

W: E daí ele pediu o carbono 2, 3 e 6. Eu começo contando (aluno mostrou o caderno) eu começo contando ...

P: Tu lembra como era a numeração? Tu modelaste ela no *software*, né?

W: Ahhh.

P: Tu lembra qual era a numeração. Como começava a numeração?

W: Aqui o carbono que está ligado ao radical é o carbono 1, o primeiro. Aí eu posso começar a contar que começa pela primeira vez?

P: A numeração começa então a partir do grupo funcional?

W: Isso.

P: Tem diferença de lados se tu botares o eletrófilo?

W: Eu posso escolher por onde eu vou começar a contar desde o lugar onde que eu começar a contar tenha a primeira ramificação. Sempre começa a contar pela primeira ramificação e que seja o menor número possível.

P: Então, bota como tu colocou no pós-teste.

W: tu disseste para colocar *orto*, *meta* e *para* assim como eu tinha posto?

P: Isso. Como tu desenhou no pós-teste. Aí tu botas a numeração para ver como tu escolheria?

W: Pois,é, aí fica o para no caso ele é o carbono 4. Certo. Não?

P: Tu lembra como era no Arguslab?

W: Pois é, eu lembro que no Arguslab era o seis. Só que agora contando assim

P: Faz pelo Arguslab.

W: Pois é, aí eu não me lembro onde era o 4 e o 5 pelo Arguslab. Eu lembro somente que o *para* ficava no seis.

P: Carbono *orto* seria qual número?

W: Seria o dois.

P: Carbono *meta*?

W: Seria o três.

P: Carbono *para*?

W: Seria o seis.

W: Sim, perfeito. *Orto* é 2 e 4 o carbono *meta* é 3 3 5 e o *para* 6. Tu contas assim: 1, 2, 3, 4, 5 e seis (aluno gesticula). Por isso que tanto faz o lado.

P: Então, tu fizeste a molécula do fenol e disse que tem o grupo OH (hidroxila), botou as posições. Esse grupo Hidroxila vai orientar o eletrófilo, e qual seria o eletrófilo da reação? Olha na questão nove.

W: NO₂.

P: Então a hidroxila é que vai ditar a regra.

W: A hidroxila no caso é um ativador?

P: Aí eu é que estou te perguntando, o que é que tu achas que é a hidroxila. A resposta está na questão número sete. Pesquisador mostra a questão na folha.

W: Justamente eu coloquei como se fosse ativador mesmo.

P: Então se tu fosse reagir o fenol e o NO₂ ... não esquece tem a flechinha a esquerda são os reagentes e a direita é produtos. Correto?

W: Sim.

P: Então, faz no papel o Fenol reagindo com o NO₂ e colocando os produtos. O que é tu achas que iria dar?

P: Tu disseste que a hidroxila é um ativador?

W: Sim.

P: Qual a posição que orienta?

W: *Orto* e *para*.

P: Então, representa a reação completa para mim:

P: Bota abaixo aí: fenol mais NO₂ tu falaste que é o eletrófilo ...

W: Eu desenho o Fenol ou escrevo o fenol?

P: Desenha a molécula. E nos produtos tu coloca o que tu achas que daria.

W: Na verdade eu posso ter duas possibilidades né? Pode ser *orto* ou *para*. Então tu queres que eu faça os dois anéis ou só um está bom?

P: Bota o que tu achas que daria.

W: Tá.

W: Aqui eu desenhei o fenol e o NO₂ (já tinha desenhado antes) e aqui eu fiz o anel com a hidroxila acima e o NO₂ ligado ao *orto*. E aqui eu escrevi um dois porque pode ser o NO₂ ligado ao carbono *para*.

7.3.2 Pré-Teste e Pós-Teste

A seguir descrevemos os objetivos das questões do pré-teste e pós-teste, após os ajustes realizados no final do experimento piloto.

A primeira pergunta propõe que o estudante relate sobre a sua ideia em relação a representação 2D e 3D, ou seja, se os alunos tinham essa representação mental.

- 1) Faça o desenho da molécula da amônia usando a representação 2D e 3D?

A segunda pergunta propõe que o estudante relatasse sobre a sua ideia em relação as respectivas geometrias, e sobre a polaridade das moléculas. O objetivo foi identificar algumas concepções e/ou mediações acerca do tema proposto, bem como possíveis mudanças entre pré-teste e pós-teste.

- 2) Represente a molécula da água e da amônia na sua respectiva geometria e responda se a molécula é polar ou apolar?

Já terceira questão o objetivo era que o estudante desenhasse as duas representações com as ligações conjugadas e as ligações duplas tracejadas, e respondesse se a molécula era aromática ou não-aromática.

- 3) Represente a molécula do benzeno desenhando as duas representações com as ligações conjugadas e um desenho com as ligações tracejadas. A molécula do benzeno é aromática ou não-aromática?

Em relação a quarta pergunta, o objetivo verificar qual a noção que os estudantes tinham a respeito do Mapa de Potencial Eletrostático de uma molécula, ou seja, se os alunos tinham algum conhecimento sobre a distribuição tridimensional da carga elétrica na molécula.

- 4) Qual a finalidade do Mapa de potencial Eletrostático de uma molécula?

A quinta questão tinha por objetivo verificar se os alunos conseguiriam representar o Mapa de Potencial Eletrostático de uma molécula simples, como a da água.

- 5) Represente a molécula da água e esboce o Mapa de Potencial Eletrostático?

No sexto questionamento a intenção era verificar se os alunos tinham a noção sobre o conceito de eletrófilo.

- 6) Qual dos grupos abaixo são eletrófilos?

A partir da sétima questão, o intuito era examinar se o estudante tinha alguma noção do que são grupos ativadores e desativadores, tópico muito difundido em reações orgânicas no estudo das reações em anel aromático.

- 7) Relacione as colunas para grupo ativador (orientador *orto e para*), e grupo desativador (orientador *meta*)?

Na oitava questão, a proposta era averiguar a noção de nomenclatura em compostos com anel aromático já possuindo um grupo orientador ou desativador no anel.

- 8) Com relação a molécula do fenol, qual o nome da posição nos carbonos 2, 3 e 6? Escreva o nome nos retângulos abaixo.

Em relação a pergunta nove, os objetivos eram de averiguar a noção dos estudantes sobre reações envolvendo eletrófilos em anel aromático, se os mesmos saberiam fornecer as estruturas do eletrófilo, reagentes e os produtos da reação.

- 9) Represente a reação entre o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro) com os seguintes compostos: fenol, nitrobenzeno e clorobenzeno. Forneça as estruturas dos reagentes, o eletrófilo e os produtos da reação.

Finalizando com a questão dez (pergunta aberta), cujo objetivo era de verificar os conhecimentos que os alunos tinham sobre modelagem molecular. Para responder à pergunta, foi informado aos alunos que pudessem desenhar, usar canetas coloridas, lápis de cor e fazer gráficos, tabelas, equações.

- 10) Escreva no espaço abaixo, tudo o que você sabe sobre modelagem molecular, como se estivesse explicando para um colega. Para isso, utilize gráficos, tabelas, imagens, equações, tudo que você desejar.

Em relação a questão de número 10, o ideal seria perguntar quais são as principais geometrias que você conhece, ou quais os principais fatores que determinam a geometria de uma molécula, porque pelos menos o aluno tem algum parâmetro de resposta.

7.3.3 Roteiros de Modelagem Molecular

Em relação aos roteiros de modelagem molecular, foram confeccionados nove roteiros, são eles: APÊNDICE C que trata de como abrir um arquivo, salvar, deletar

átomos, ligações e construir a molécula da água; APÊNDICE D que tem como objetivo construir a molécula da amônia; Já o APÊNDICE E trata do cálculo de ligação e ângulo na molécula da água; APÊNDICE F trata do cálculo de ligação e ângulo na molécula da amônia; APÊNDICE G diz respeito a otimização da geometria de uma molécula; APÊNDICE H trata da modelagem da molécula do benzeno; APÊNDICE I trata da modelagem da molécula do clorobenzeno, otimizar a geometria da molécula, pesquisar as cargas parciais nos átomos e a confecção do mapa de potencial eletrostático, APÊNDICE J trata da modelagem da molécula do fenol, otimizar a geometria da molécula, pesquisar as cargas parciais nos átomos e a confecção do mapa de potencial eletrostático, APÊNDICE K diz respeito a modelagem da molécula do nitrobenzeno, otimizar a geometria da molécula, pesquisar as cargas parciais nos átomos e a confecção do mapa de potencial eletrostático.

Todos os nove roteiros foram elaborados pelo pesquisador a partir de atividades desenvolvidas no *software* Arguslab.

7.4 DESENVOLVIMENTO DO EXPERIMENTO PILOTO

Após a conclusão dos ajustes, iniciamos o planejamento do experimento didático. O experimento didático foi planejado do seguinte modo: na primeira aula foi aplicado o pré-teste, na décima segunda aula aplicação do pós-teste e na segunda até a décima aula foi aplicado as atividades de modelagem molecular.

7.4.1 Experimento Didático

No quadro abaixo ilustramos as atividades desenvolvidas com os alunos no experimento definitivo. Os roteiros, pré-teste e pós-teste encontram-se APÊNDICE.

Quadro 5 - Atividades desenvolvidas no experimento definitivo.

Planejamento	Conteúdo Proposto	Ações do Professor	Tempo (min)
Aula 1: pré-teste	Questões envolvendo modelagem molecular.	Fornecer o pré-teste e acompanhar os alunos no Google Meet (APÊNDICE B)	60
Aula 2: explicações sobre a instalação do <i>software</i>	Instalação do <i>software</i>	Fornecer o site do <i>software</i> e auxiliar na instalação	30
Aula 3: primeiros passos no <i>software</i>	Como abrir um arquivo, salvar, deletar átomos, ligações e construir a molécula da água	Fornecer o roteiro (APÊNDICE C) e orientações no processo	30
Aula 4: modelagem molecular	Construindo a molécula da amônia	Fornecer o roteiro (APÊNDICE D) e orientações no processo	30
Aula 5: modelagem molecular	Otimizando a geometria de uma molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE G) e orientações no processo	30
Aula 6: modelagem molecular	Cálculo de ligação e ângulo entre átomos da molécula da água	Fornecer o roteiro (APÊNDICE E, G) e orientações no processo	30
Aula 7: modelagem molecular	Cálculo de ligação e ângulo entre átomos da molécula da amônia	Fornecer o roteiro (APÊNDICE F, G) e orientações no processo	30
Aula 8: modelagem da molécula do benzeno	Construir a molécula do benzeno: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE H) e orientações no processo	30

Quadro 5 - Atividades desenvolvidas no experimento definitivo (cont).

Planejamento	Conteúdo Proposto	Ações do Professor	Tempo (min)
Aula 9: modelagem da molécula do clorobenzeno	Construir a molécula do clorobenzeno: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE I) e orientações no processo	30
Aula 10: modelagem da molécula do fenol	Construir a molécula do fenol: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE J) e orientações no processo	30
Aula 11: modelagem da molécula do nitrobenzeno	Construir a molécula do nitrobenzeno: otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula	Fornecer o roteiro (APÊNDICE K) e orientações no processo	30
Aula 12: pós-teste	Questões envolvendo modelagem molecular	Fornecer o pós-teste e acompanhar os alunos no Google Meet (APÊNDICE B)	60

Fonte: A pesquisa.

No primeiro encontro foi realizado o pré-teste com nove questões estruturadas sobre modelagem molecular e uma questão aberta. Após a realização do pré-teste iniciaram as aulas de modelagem molecular através do Google Meet. Por meio de encontros semanais com duração de 30 min para as aulas, com exceção ao pré-teste e pós-teste que tiveram a duração de 60 min, foram realizadas nove atividades de modelagem, sendo doze o total de encontros até a realização do pós-teste.

No segundo encontro os estudantes tiveram como atividade a instalação do *software* de modelagem molecular Arguslab.

Na terceira aula as atividades propostas foram as de iniciação no *software*, contemplando atividades como: abrir e salvar um arquivo, deletar átomos, ligações e construir a molécula da água. Já na quarta aula a proposta era construir a molécula

da amônia, após a modelagem da molécula d'água no exercício anterior. Após, no quinto encontro, a proposta era de otimizar a geometria da molécula da água, e verificar os cálculos na interface gráfica do *software*. Em relação ao sexto e ao sétimo encontro, a proposta tinha como objetivo calcular o comprimento das ligações entre os átomos e verificar o valor dos ângulos.

Na oitava, nona, décima e décima primeira aula o objetivo proposto era o de modelar a molécula do benzeno, clorobenzeno, fenol e do nitrobenzeno, considerados exercícios de modelagem mais complexos para os alunos. Os exercícios propostos foram de otimizar a geometria, colocar as cargas parciais nos átomos (a partir da geração do relatório das cargas de Mulliken) e construir o mapa de potencial eletrostático da molécula. Concluindo, na décima segunda aula, a aplicação do pós-teste.

8 ANÁLISE DE RESULTADOS

O objetivo deste capítulo é apresentar os resultados obtidos durante a pesquisa. Apresentaremos os dados mais significativos após a análise do pré-teste, pós-teste e das entrevistas.

O capítulo está dividido em três partes, sendo a primeira a descrição das categorias e subcategorias, a inferência e interpretação das tabelas com as categorias e as respectivas subcategorias, e a análise dos resultados em cada categoria e subcategoria.

8.1 CATEGORIAS E SUBCATEGORIAS

Para analisar tanto o material escrito desenvolvido pelos participantes quanto a transcrição da entrevista realizada, optamos pela utilização da Análise de Conteúdo de Bardin.

Dentre as técnicas de Análise de Conteúdo optamos pela Análise Categorical que, de acordo com Bardin, é a mais antiga e utilizada dentre as técnicas de análise de conteúdo e “funciona por operações de desmembramento do texto em unidades, em categorias segundo reagrupamentos analógicos” (BARDIN, 2015).

As quatro categorias de análise formuladas e as respectivas subcategorias foram as seguintes:

Categoria 1: “VSEPR” – as citações dos alunos apresentam como respostas, colocações envolvendo ligações químicas simples; ligações químicas duplas; ângulo; representação da estrutura da molécula; geometria da molécula; par de elétrons desemparelhados; par de elétrons livres; eletronegatividade; polaridade; densidade eletrônica. Na subcategoria Estrutura 2D e 3D apresentam como respostas, ligações químicas simples; ligações químicas duplas; ângulo; estrutura da molécula; parte da molécula; molécula como um todo. Já na subcategoria Geometria Molecular e Polaridade, apresenta respostas como, geometria da molécula, parte da molécula; molécula como um todo; par de elétrons desemparelhados; par de elétrons livres; eletronegatividade; polaridade; densidade eletrônica.

Categoria 2: “Aromaticidade” – a categoria Aromaticidade apresenta a subcategoria Ressonância, e as colocações dos alunos apresentam como respostas, citações envolvendo benzeno; ligações duplas no anel aromático; ligações

conjugadas; ligações tracejadas; ligações pi; citação da figura geométrica hexágono e losango; regra de Huckel.

Categoria 3: “Mapa de Potencial Eletrostático” - a categoria Mapa de Potencial Eletrostático apresenta a subcategoria Densidade Eletrônica. As respostas dos alunos apresentam citações envolvendo distribuição de elétrons; distribuição tridimensional da carga eletrônica; cargas; cores na molécula; densidade eletrônica; mapa de potencial; parte da molécula; molécula como um todo.

Categoria 4: “Reação Química” – apresenta as subcategorias Eletrófilo e Reação em Anel Aromático. As citações dos alunos apresentam como respostas, colocações envolvendo reação em anel; reação de substituição eletrofílica aromática; reação em anel aromático; posições *orto*, *para* e *meta*; posições de grupos; grupo ativador; grupo desativador; orientador *orto*; orientador *para*; orientador *meta*; eletrófilo.

8.2 INFERÊNCIA E INTERPRETAÇÃO DAS TABELAS COM AS CATEGORIAS E RESPECTIVAS SUBCATEGORIAS

Tabela 2 - Dados sobre a categoria VSEPR

Categoria 1	Subcategoria	f	%
VSEPR	Estrutura 2D e 3D	13	21,00
	Geometria Molecular e Polaridade	49	79,00
	Total	62	100

Fonte: A pesquisa.

Na tabela 2 podemos observar os resultados da categoria VSEPR. De acordo com os resultados, observamos que foi a categoria com o maior número de citações, no total de 62. A subcategoria Geometria Molecular e Polaridade obteve 49 citações com índice de 79%. Já a subcategoria Estrutura 2D e 3D, obteve 13 citações com índice de 21%. Em relação a essas atividades de modelagem molecular, o conteúdo geometria molecular têm a mediação cultural muito forte, ou seja, são atividades corriqueiras e o aluno se vê confrontado com esses conteúdos muito cedo, além de saber mais a respeito do conteúdo, também verbalizam mais.

Tabela 3 - Dados sobre a categoria Aromaticidade

Categoria 2	Subcategoria	f	%
Aromaticidade	Ressonância	17	100
	Total	17	100

Fonte: A pesquisa.

Já tabela 3 podemos observar os resultados da categoria Aromaticidade. Nesta categoria obtivemos apenas a subcategoria Ressonância. Em relação a este conteúdo consideramos que são assuntos menos corriqueiros e que exige tempo e aulas apropriadas para o bom entendimento por parte dos alunos. É importante salientar que a turma teve dificuldades no aprendizado do conteúdo, e a maior parte dos alunos não adquiriu conhecimento adequado do assunto devido ao tempo reduzido, e a qualidade das aulas on line durante o período da pandemia. Acreditamos que o contexto contribuiu para a baixa frequência desta subcategoria.

Tabela 4- Dados sobre a categoria Mapa de Potencial Eletrostático

Categoria 3	Subcategoria	f	%
Mapa de	Densidade Eletrônica	28	100
Potencial	Total	28	100
Eletrostático			

Fonte: A pesquisa.

De acordo com a tabela 4 podemos observar os resultados da categoria Mapa de Potencial Eletrostático. Nesta categoria obtivemos apenas a subcategoria Densidade Eletrônica. Em relação a este conteúdo consideramos que são assuntos menos corriqueiros e que exigem tempo e aulas apropriadas para o bom entendimento por parte dos alunos. É importante salientar que a turma teve dificuldades no aprendizado do conteúdo e a maior parte dos alunos não adquiriu conhecimento adequado do assunto devido ao tempo reduzido e a qualidade das aulas on line durante o período da pandemia.

Tabela 5 - Dados sobre a categoria Reação Química

Categoria 4	Subcategoria	f	%
Reação Química	Eletrófilo	6	18,00
	Reação em Anel Aromático	27	82,00
	Total	33	100

Fonte: A pesquisa.

Na tabela 5 podemos observar os resultados da categoria Reação Química. É nesta categoria que reside o foco da pesquisa. A subcategoria Eletrófilo obteve apenas 6 citações com índice de 18%. Já a subcategoria Reação em Anel Aromático, obteve 27 citações com índice de 82%. Salientamos que a maior parte das citações foram por parte do *expert* e algumas pelo aluno W. Concluímos que a compreensão eletrofílica se deu apenas pelos alunos W e o *expert*. O aluno W estudou juntamente com o *expert* conseguindo obter algum conhecimento. Já os demais estudantes não tiveram essa compreensão, provavelmente ao mesmo contexto descrito nas categorias mapa de potencial eletrostático e aromaticidade.

Tabela 6 - Visão global da avaliação das respostas, em relação às categorias que emergiram durante a análise de confecção, com as respectivas frequências e percentuais.

Categorias	f	%
VSEPR	62	44,00
Aromaticidade	17	12,00
Mapa de Potencial Eletrostático	28	20,00
Reação Química	33	24,00
Total	140	100

Fonte: A pesquisa.

Na tabela 6 podemos observar os resultados da frequência das respostas com elementos de cada categoria que apareceu no *corpus*. Dentro da categoria Reação Química estão as respostas que elucidam a compreensão da modelagem da Reação de Substituição Eletrofílica Aromática. É nesta categoria que está o foco da pesquisa de modelagem molecular, mas foi a categoria que apresentou somente 24% do total das respostas durante a entrevista, bem abaixo da categoria VSEPR que apresentou 44%.

Conforme os comentários realizados na primeira categoria, as atividades de modelagem molecular, o conteúdo geometria molecular têm a mediação cultural muito forte, ou seja, são atividades corriqueiras e o aluno se vê confrontado com esses conteúdos muito cedo, e as demais categorias não são tão corriqueiras, exigindo aulas mais elaboradas por parte do professor e tempo adequado para a explanação do conteúdo. Além disso, devemos considerar a influência do contexto de aprendizagem durante a pandemia.

8.3 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA VSEPR

Antes de analisar os resultados das categorias descrevemos abaixo os diferentes tipos de *drivers* e os critérios utilizados para a atribuição; as sequências necessárias para a modelagem da reação de Substituição Aromática Eletrofílica que devem ser seguidos no *software* Arguslab e a correção realizada em relação ao apêndice D no tópico geometria da molécula da amônia.

A seguir descrevemos os diferentes tipos de *drivers*, de acordo com Souza (2004), e os critérios utilizados para atribuição sobre aquisição de *drivers* culturais e hiperculturais:

Os *drivers* psicofísicos são os que comandam a mediação com o mundo físico a partir da percepção, ou seja, do sistema sensorial. Já os *drivers* sociais são desenvolvidos a partir das habilidades sociais, na mediação direta com pessoas ou grupo de pessoas. Em relação aos *drivers* culturais, os mesmos são acionados quando estamos no processo de aquisição de uma determinada cultura do conhecimento formal. Por exemplo, na maioria das vezes representado pela grafia (letras). No que diz respeito aos *drivers* hiperculturais, esses são desenvolvidos a partir da mediação com algum aparato hipercultural, por exemplo, com um *software*, ou seja, semelhantes ao *software*.

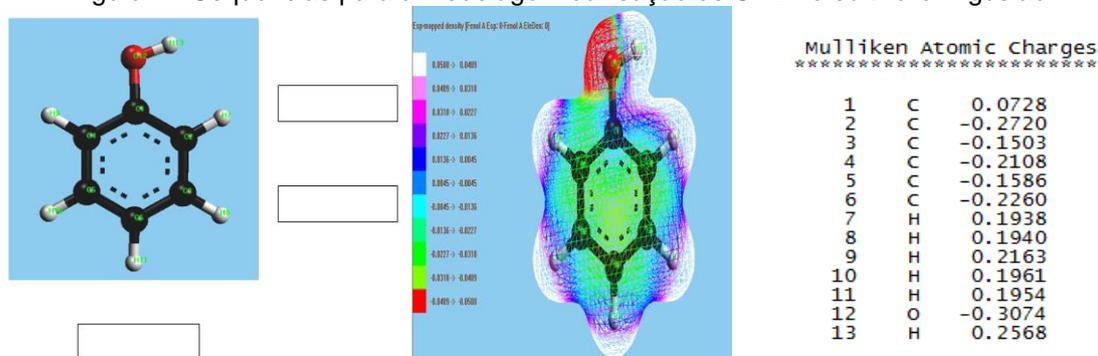
Importante salientar que os *drivers* de visualização molecular podem ter tanto origem cultural como hipercultural. Além destes, os *drivers* de modelagem molecular, sendo esses de origem hipercultural. Além disso, um detalhe que deve ser considerado em especial, é que as representações do *software* são as mesmas do livro. Em termos de representação cultural e hipercultural, a única forma de realizar a categorização é através da entrevista, em que o aluno verbaliza se resolveu a questão com base no seu conhecimento adquirido nas aulas e/ou livros, ou no conhecimento adquirido com o manuseio do *software*.

A seguir apresentamos as sequências necessárias para a modelagem da reação de Substituição Aromática Eletrofílica que devem ser seguidos no *software* Arguslab conforme os APÊNDICES I, J e K. Tomamos como exemplo a reação de SAE na molécula do fenol.

Primeiro passo: construir a molécula do fenol no Arguslab. Após, na segunda etapa, confeccionar o mapa de potencial eletrostático da molécula do fenol. No

terceiro passo, confeccionar a tabela das cargas de Mulliken da molécula do fenol. Estes passos encontram-se no APÊNDICE J.

Figura 7 - Sequências para a modelagem da reação de SAE no *software* Arguslab.



Fonte: A pesquisa.

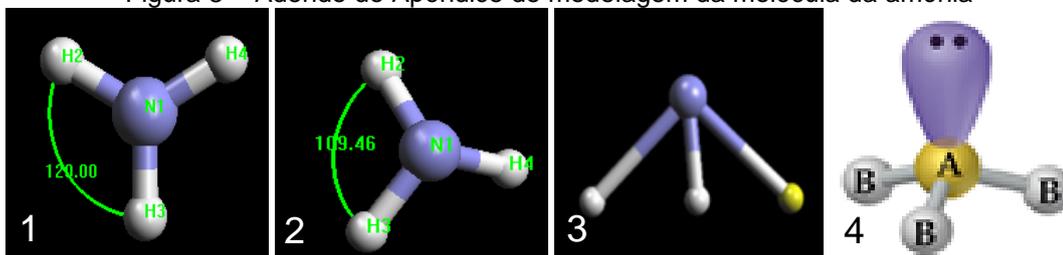
Concluída as etapas acima, o aluno identifica as cargas de Mulliken em cada átomo de carbono, segundo o relatório Mulliken Atomic Charges, e coloca as respectivas cargas nos espaços em branco conforme a primeira imagem. Após analisa o mapa de potencial eletrostático da molécula do fenol, verificando os átomos de carbono com cargas negativas, região de maior densidade eletrônica, com maior carga negativa no mapa, segunda imagem. Com o conhecimento prévio de que os grupos que irão atacar o anel são denominados eletrófilos, tem carga positiva e ávido por elétrons, e em relação aos halogênios que orientam na posição *orto* e *para* o estudante compara no mapa de potencial eletrostático as regiões onde se concentra a carga negativa nos átomos de carbono, justamente os dados das cargas de Mulliken. Assim, o aluno consegue direcionar o grupo NO_2 nas respectivas posições do anel, sem precisar saber de antemão se o grupo X ou Y, no caso (OH^-) denominado hidroxila é *orto-para* ou *meta* dirigente, e não é necessário consultar nenhuma tabela.

Analisando o contexto da entrevista, o *expert* realizou as atividades de modelagem propostas, construiu as moléculas do clorobenzeno, nitrobenzeno e fenol, otimizou as geometrias das moléculas, construiu e interpretou os mapas de potencial eletrostáticos das respectivas moléculas, pesquisou a cargas de Mulliken sobre os átomos de carbono da molécula do clorobenzeno, e interpretou a entrada do eletrófilo nas posições no anel.

Em relação aos ajustes no apêndice D, o mesmo foi necessário porque a geometria da molécula da amônia foi inserida equivocadamente nos procedimentos,

ou seja, a geometria correta seria a piramidal trigonal e não a trigonal planar, conforme a figura abaixo:

Figura 8 - Adendo do Apêndice de modelagem da molécula da amônia



Fonte: A pesquisa

Na imagem 1 a geometria trigonal planar com ângulo de 120° . Já na imagem 2 a geometria piramidal trigonal com ângulo de $109,45$. Na imagem 3 a geometria da molécula da amônia não otimizada (forma de pirâmide). Na imagem 4 a geometria piramidal trigonal com os pares de elétrons sobre o átomo central (representação de livros didáticos).

Salientamos que a proposta corretiva da geometria foi apresentada aos estudantes antes do final do pós-teste e antes das entrevistas.

8.3.1 Análise na Subcategoria Estrutura 2D e 3D

Em relação ao estudante W, quando questionado sobre como desenhar a molécula da amônia usando a representação 3D, e o que você estava imaginando quando leu a questão, o aluno W respondeu o seguinte:

Eu imaginei a amônia (NH_3) eu lembro que a amônia tinha a geometria, aquela geometria, era não era plana, tinha o ângulo piramidal. Então eu fiz a representação 2D e 3D¹. Inclusive ficou similar no pré-teste e pós-teste. No pós-teste a pirâmide do NH_3 ² ficou um pouco bem mais feita e não foi apenas accidental. A percepção que eu tinha assim um pouco diferente, eu entendia, tanto que tu vai ver... Eu coloco que a polaridade, a amônia é apolar³ porque no começo eu tinha essa sensação porque eu não entendia a polaridade muito com a geometria em si, eu pensava eletronegatividade, muita coisa que não tinha ligação. Aí já depois entendendo direitinho a geometria eu consigo entender que forma polos que aqui é positivo aqui é negativo entende. Eu consigo criar essa imagem na minha cabeça: tem um polo positivo e um negativo, portanto é polar⁴. No pré-teste eu ainda não tinha essa sensação. Aí tu vai ver a pirâmide do pré-teste ficou um pouco mais plana digamos assim do que o pós-teste que eu já me preocupei um pouco mais em representar essa pirâmide [00:04:50].

Em 1 o aluno coloca que a molécula da amônia tinha o ângulo piramidal (*driver* cultural de visualização), e diz que fez a representação em 2D e 3D. Em 2 comenta que a pirâmide da amônia (*driver* cultural) ficou bem feita e não foi acidental. Em 3 W diz que a molécula é apolar, ou seja, errou a resposta. Mais adiante em 4 afirma que após entender a geometria ele consegue entender que forma polos positivos e negativos, e assim consegue criar essa imagem na cabeça. Já em 5 o estudante diz que pesquisa sobre a molécula e afirma que foi estudando Química Orgânica. Em 6 o aluno diz que o expert através do *software* fez W ter uma percepção mais tridimensional da molécula. Em 7 a confirmação através do *software* Arguslab com auxílio do *expert*, o aluno W consegue entender a polaridade. Podemos concluir a partir de 4 que o aluno adquire *drivers* de visualização molecular através da mediação hipercultural.

O professor-pesquisador questiona o aluno, onde tu visualizaste estes detalhes?

A resposta do aluno W é:

Bom o meu método de estudar química é assim eu penso numa molécula, eu pesquiso ela e aí eu tento analisar. Quando eu vejo uma coisa que eu não entendi muito bem aí eu pesquiso sobre a molécula e eu tento entender. Mas nesse caso aqui em específico foi estudando orgânica.⁵ eu não sei. Enfim, foi alguma química, e aí eu estava com o expert M sabe, conversando com ele e o expert me explicou isso. Fazendo ter uma percepção mais tridimensional da molécula. Lembrei foi justamente nessa disciplina quando a gente fez a modelagem, lembra no Arguslab.⁶ Aí eu perguntei para o expert porquê da importância de ser assim e não assado, por que eu não posso representar NH_3 com o H em qualquer lugar. Aí o expert me mostrou que a eletronegatividade, os elétrons sobrando. O expert explicou que o nitrogênio tem elétrons sobrando e isso faria com que empurrasse o hidrogênio e criasse esses dois polos sendo mais negativo e um mais positivo e isso sim criasse a polaridade que depois teria a influência quando fosse mistura com outra coisa (outra molécula, composto). Aí, a partir dessa visualização assim que eu consegui entender melhor a questão da polaridade. Então no pré-teste eu não tinha acertado e no pós-teste eu já afirmei isso ⁷ [00:06:52].

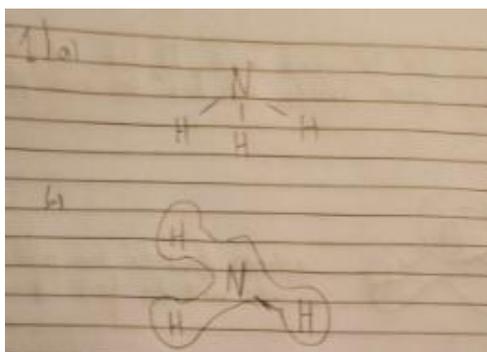
Quando W é questionado sobre os desenhos realizado no pré-teste e pós-teste, o porquê da diferença entre os desenhos?

O desenho que eu fiz parece que os hidrogênios estão ligados entre si. E na verdade os hidrogênios não tem uma ligação direta entre si. Se eu fosse desenhar novamente, eu não tenho muito talento com a mão, mas eu tentei fazer uma pirâmide estruturada só que eu fechei o nitrogênio entre ele, mas na verdade o que liga é o nitrogênio com o hidrogênio, o nitrogênio com o hidrogênio e o nitrogênio com outro hidrogênio. Então nessa representação

eu ajustaria só que eu não sou muito bom de desenho e essa foi a forma que eu consegui achar para representar uma pirâmide⁸ [00:07:39].

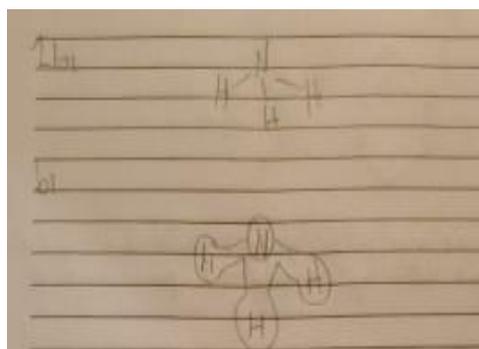
[...] sim, eu valorizei mais para dar ângulo, porque eu já tinha uma compreensão melhor, já dava para representar da maneira mais correta [00:03:11 até 00:04:00, Vídeo 2].

Figura 9 – Representação da molécula da amônia pelo estudante W durante o pré-teste.



Fonte: A pesquisa.

Figura 10 – Representação da molécula da amônia pelo estudante W durante o pós-teste.



Fonte: A pesquisa.

Podemos observar a representação de letras e traços (palitos) para átomos e ligações tanto no pré-teste como no pós-teste para a estrutura 2D. Já em relação à estrutura 3D no pré-teste e no pós-teste, em forma de letras, mas inseridas dentro de bolas interligadas (palitos) remetendo as ligações químicas. Além de um *driver* cultural citado em 8 pelo aluno: uma “pirâmide”.

Concluimos em relação às representações que inicialmente o aluno utiliza-se de *drivers* culturais, ou seja, letras para representar átomos e palitos para representar as ligações em 2D do pré-teste e as estruturas 2D do pós-teste. Após a interação com o *software* de modelagem molecular com auxílio do *expert M*, o estudante passa a representar a estrutura 3D (geometria da molécula corretamente, ou seja, a geometria piramidal trigonal). Há uma diferença de distribuição espacial entre os desenhos da

letra b do pós-teste. Acreditamos que essa diferença seja fruto da interação com o *software* de modelagem molecular, em que a representação da letra b do pós-teste é semelhante ao do *software*. O estudante passa a incorporar *drivers* hiperculturais de visualização molecular e modelagem molecular na sua estrutura cognitiva.

Após o aluno foi instigado pelo professor para representar a molécula da amônia, e se há alguma diferença de “tamanho” entre os átomos. A resposta do aluno W foi por meio de gestos e linguagem verbal:

Eu não imagino. Mas acredito que o nitrogênio seja maior justamente porque tem mais prótons e elétrons. Enfim deve ser maior. [00:11:12]

Por ter mais prótons mais elétrons. Por ter mais elétrons ele ser balanceado deve ter mais prótons, logo o núcleo é maior e tendo mais elétrons mais elétrons girando em volta. Portanto, acredito que com isso ele tenha que aumentar o tamanho dele. [00:11:47]

[...] então, o hidrogênio vai ter somente a camada s, e o nitrogênio já vai ter a camada p, então ele é automaticamente um pouco maior. Talvez o dobro ou algo assim. [00:12:28].⁹

Figura 11 – Sequência de gestos do aluno W, representando o tamanho dos átomos de nitrogênio e hidrogênio na molécula da amônia



Fonte: A pesquisa.

A imagem mental acima ilustra a sequência de gestos produzidos para a representação da diferença de tamanho entre os átomos de nitrogênio e hidrogênio. Na imagem 1 o estudante representa o átomo de nitrogênio utilizando as duas mãos em forma de concha. Na imagem 2 com as duas mãos afastadas em forma de concha uma de frente para a outra, representa o núcleo do átomo de nitrogênio. Nas imagens 3, 4 e 5 inicia a sequência de representação do giro dos elétrons com o dedo indicador da mão direita e com a mão esquerda fechada em forma de esfera. Na imagem 6 com a mão direita em forma de concha afastada da mão esquerda também em forma de concha a representação da diferença de tamanho entre os átomos de nitrogênio e

hidrogênio (quando o aluno cita a camada s do átomo de hidrogênio e a camada p do átomo de nitrogênio. [00:11:40]).

Em nova entrevista, o aluno é questionado pelo professor em relação aos gestos produzidos:

P: Essas imagens saíram de onde? No que tu pensaste quando fez esses gestos?

W: Eu pensei na demonstração do átomo mesmo, parecido com o que a gente consegue ver no *software*, também tem nos livros. Do átomo mesmo e pensando nas órbitas da eletrosfera, por isso que eu fiz com a mão tentando demonstrar.

P: Em relação ao giro dos elétrons na órbita, isso veio de onde? O que é que tu pensaste para fazer isso? De onde saiu essa imagem?

W: A imagem do átomo mesmo:

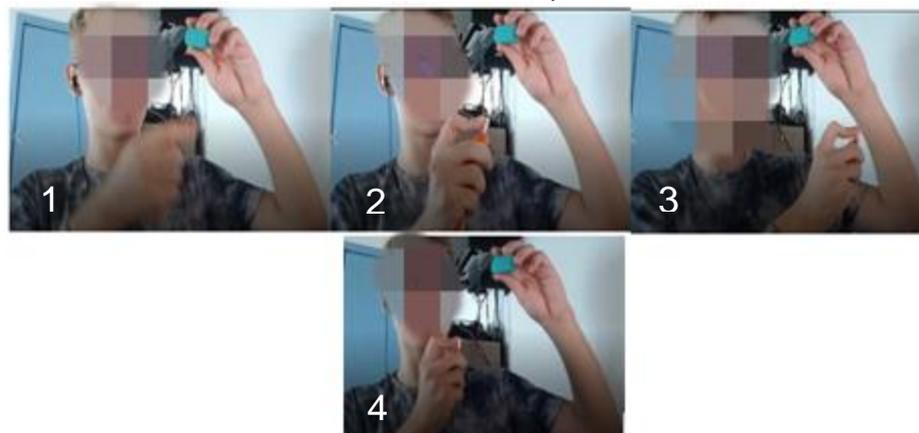
[...] Por si só já tem os elétrons que vão estar sempre na eletrosfera, né. Para balancear ali, que vai ter a mesma, geralmente, a mesma quantidade de elétrons e de prótons. Ali no *software* a gente tem a visão tridimensional do átomo, a gente também daí consegue ter essa concepção, de imaginar o núcleo dele aqui e os elétrons, cada elétron numa órbita diferente, por isso tem vários ângulos diferentes ali, porque eles vão estar circundando o núcleo do átomo. [00:02:00 até 00:05:00 Vídeo 3].¹⁰

Observamos que o aluno utilizou os seguintes *drivers*: a mão em forma de concha e esfera para a representação do átomo e núcleo. Outro *driver* utilizado é um ponto sinalizado pelo dedo indicador para representar o elétron. A órbita do elétron é representada pelo giro do dedo indicador sobre a mão fechada em forma de esfera, reportando a outro o *driver*.

Acreditamos que a descrição da imagem mental acima seja puramente hipercultural conforme a descrição mencionada em 10.

O aluno W propõem outra proposta de representação da molécula da amônia, conforme a Figura 12.

Figura 12 – Sequência de gestos do aluno W, representando a molécula da amônia com uma borracha e um lápis.



Fonte: A pesquisa.

Nessa proposta confirmada na segunda entrevista, o estudante W utiliza como auxílio uma borracha e um lápis para representar os átomos de nitrogênio e hidrogênio e a ligação química, de acordo com a linguagem verbal:

[...] O lápis era para ser o átomo de hidrogênio. Acredito que deve ter sido o único objeto que tinha em mão. Logo, mas era para mostrar os três hidrogênios, mas já pode ser junto com a ligação que seria a ligação simples. Assim, para formar o tripé. [00:17:17 Vídeo 2].

Conforme a declaração do aluno W, a borracha seria para representar o átomo de nitrogênio e o lápis para representar os átomos de hidrogênio e as ligações simples.

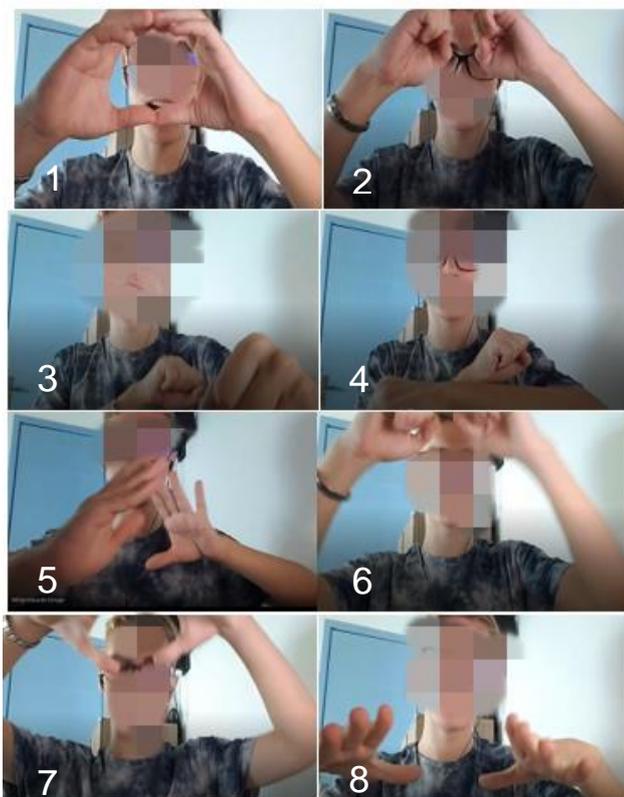
Inicialmente na imagem 1 o aluno com a mão esquerda segura a borracha para representar o átomo de nitrogênio. Após na imagem 2 permanece com a borracha na mão esquerda e com um lápis na mão direita representa o primeiro, o segundo e o terceiro átomo de hidrogênio, e as respectivas ligações. Na terceira imagem o aluno volta com a mão para trás para identificar o terceiro átomo de hidrogênio. O aluno explica que forma uma pirâmide como se fosse um tripé que eu fosse capaz de deixar em pé [00:14:19].

Já nesta imagem mental, verificamos que o aluno W utilizou *drivers* psicofísicos, como: uma borracha para representar o átomo de nitrogênio; um lápis para representar os três átomos de hidrogênio e as três ligações químicas, e um tripé para representar a geometria.

Quando o aluno W é questionado sobre os pares de elétrons livres, como ele faria a representação da molécula, a resposta verbal e gestual foi a seguinte:

Aqui tá o nitrogênio um pouco maior do que os hidrogênios, assim. E aí agora aqui tem os elétrons sobrando e que daí vão fazer ter três hidrogênios aqui formando uma pirâmide. Esses elétrons aqui acima do nitrogênio derrubam os hidrogênios e fizeram criar esse ângulo, e eles têm a distância igual entre um hidrogênio ao outro porque eles são todos positivos, e, portanto, se repelem e tem a mesma distância um do outro.

Figura 13 - Sequência de gestos do aluno W, representando o par de elétrons livres sobre o átomo de nitrogênio distorcendo as ligações de hidrogênio.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 o aluno aproxima a mão direita e esquerda uma de frente para outra na forma de bola para representar o átomo de nitrogênio. Na segunda imagem com as duas mãos fechadas em forma de esfera e aproximando-as representa o par de elétrons livre sobre o átomo de nitrogênio. Na terceira e quarta imagem o aluno utiliza os dois braços para representar os átomos de hidrogênio. Na quinta imagem com as mãos espalmadas representa um triângulo para demonstrar a geometria piramidal da molécula, forma de pirâmide. Já na sexta imagem com as duas mãos fechadas em forma de esfera e aproximando-as representa o par de elétrons livre sobre o átomo de nitrogênio. Na sétima imagem com a aproximação das mãos em

forma de círculo representa os elétrons acima do átomo de nitrogênio. Já na oitava imagem o aluno representa a distorção das ligações de hidrogênio para baixo para formar o ângulo da molécula da amônia, representando os átomos de hidrogênio com as mãos espalmadas. O aluno explica que forma uma pirâmide como se fosse um tripé que eu fosse capaz de deixar em pé. [00:17:37].

Já nesta terceira imagem mental percebemos a presença de *drivers* hiperculturais. Acerca dos *drivers* hiperculturais podemos citar a forma de concha para representar o átomo de nitrogênio e elétrons; forma de esfera para representar o par de elétrons; a mão espalmada para representar a geometria e átomo de hidrogênio. Braços para representar os átomos de hidrogênio, o tripé com o objetivo de representar a geometria.

O professor-pesquisador questiona o aluno em relação a fonte dos conhecimentos adquiridos, quando tu disseste que conversou com o *expert* e visualizou isso, como aconteceu foi no papel ou ele te mostrou, como foi isso? A resposta do estudante W:

A gente fazendo aqueles exercícios de modelagem, eu liguei para o expert através do Discord¹ que tu podes ligar para amigos e nisso tem uma opção que tu compartilha a tela como no Google Meet. Eu liguei para o expert compartilhei a tela e o expert ia me explicando. Após ele abriu o Arguslab dele e compartilhou a tela e aí eu vendo a explicação e a modelagem do expert eu consegui ter essa noção de entender a molécula em três dimensões ¹¹ [00:24:30].

Em nova entrevista com o aluno W, o estudante comenta: [...] como se fosse um tripé de hidrogênios. A gente consegue fazer essa simulação no *software* e ter essa concepção. [00:06:00 até 00:02:00 Vídeo 3].

Em relação aos conhecimentos observamos que o estudante não trabalhou com a noção de plano e de posicionar a molécula considerando esse plano, utilizando as representações clássicas de ligações químicas que estão para atrás do plano  e para a frente do plano .

¹ Discord é um aplicativo gratuito de comunicação que permite que você converse por voz, vídeo e texto com amigos, comunidades de jogos e desenvolvedores. Ele possui centenas de milhares de usuários, o que faz com que ele seja uma das formas mais populares de se conectar com as pessoas online. O Discord pode ser usado em quase todas as plataformas e dispositivos conhecidos, incluindo Windows, macOS, Linux, iOS, iPadOS, Android, e navegadores. O que é o Discord? Disponível em: <<https://tecnoblog.net/350768/o-que-e-discord>>. Acesso em: 26 out. 2021

No que diz respeito a polaridade, o estudante W inicialmente afirma que a molécula é apolar porque no começo ele não tinha a percepção não entendia a polaridade com a geometria. Após passar pela modelagem molecular o aluno passa a entender a geometria. Ele consegue entender que forma polos positivos e negativos. O aluno consegue criar essa imagem na cabeça: tem um polo positivo e um negativo, portanto é polar. No pré-teste o aluno comenta que não tinha essa sensação, compreensão. Como salientamos anteriormente há uma diferença de distribuição espacial entre os desenhos da letra b do pós-teste. Desse modo, acreditamos que essa diferença seja fruto da interação com o *software* de modelagem molecular, onde a representação da letra b do pós-teste é semelhante ao do *software*, conforme a linguagem verbal do estudante: “como se fosse um tripé de hidrogênios, a gente consegue fazer essa simulação no *software* e ter essa concepção”. Assim, o estudante passa a incorporar drivers hiperculturais de visualização molecular e modelagem molecular na sua estrutura cognitiva.

Concluimos que a mediação cultural não foi suficiente. Foi preciso o aporte da mediação hipercultural para que ele tivesse a real noção da representação em 3D da molécula. Nesse caso a habilidade visuoespacial do estudante foi modificada através da mediação com o *software*.

Em relação a aluna V, quando questionada sobre a representação da Estrutura 2D e 3D, a estudante comenta:

No pré-teste eu já sabia que amônia da geometria da amônia era piramidal,¹ mas eu não sei não tinha conhecimento e era denominado de 2D como é que seria a representação em si. A gente já tinha realizado exercícios eu fiz a molécula em 2D e eu não sabia da denominação.² Aí no pós-teste eu já tinha conhecimento para fazer a 2D. Na 3D eu fiquei meio assim para realizar por causa que na piramidal com 3D é para ver a profundidade né? O movimento. Então eu não sei se eu representei 100% certo. Porque eu estava pesquisando, e depois teria o nitrogênio na parte superior, ele teria os pares isolados em cima, eles faziam uma repulsão, seria essa fórmula repulsão?”³

Em 1, 2 e 3 percebemos a mediação cultural por parte da estudante em relação a visualização molecular.

Figura 14 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pós-teste pela aluna V.



Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

Sobre a estudante V, verificamos no pós-teste que ela representa os átomos como letras, e as ligações em forma de traços (palitos) na representação 2D. Na representação 3D passa a representar letras dentro de bolas para átomos e as ligações na forma de palitos. A estudante também cita o termo profundidade piramidal quando estava pesquisando. A aluna ainda comenta sobre o nitrogênio na parte superior, e ele teria os pares isolados em cima, sendo que esses pares faziam uma repulsão. Essa condição de representação de pares de elétrons livres não possível no *software*. Em relação a representação em 3D, a mesma é semelhante ao *software*, mas como a estudante não foi questionada a fundo sobre a sua origem não podemos concluir em relação a aquisição de *drivers* hiperculturais, ou seja, é inconclusivo. Nesse caso, podemos afirmar sobre a aquisição de *driver* culturais, como: representação em forma de letras para o átomo e em forma de palitos na representação 2D. Em relação a estrutura 3D letra dentro de bolas para o átomo e palitos para as ligações.

No que se refere aos conhecimentos verificamos através da linguagem verbal da estudante, que a mesma não tinha conhecimento da estrutura 2D (denominação) e como seria a representação. A estudante menciona que havia realizado exercícios, mas não sabia a denominação apesar de ter feito a molécula. No pós-teste a estudante confirma que já tinha conhecimento para representar a estrutura 2D. Já na representação em 3D a aluna diz que estava com dúvidas ao citar que na geometria piramidal é para verificar a profundidade. Ela conclui que não sabia se a sua representação estava totalmente correta, e ao pesquisar (não citou a fonte e também não foi questionada a fundo sobre a origem), menciona que na parte superior do átomo de nitrogênio teria pares isolados e que esses pares fariam a repulsão. Concluímos que esses conhecimentos sobre pares de elétrons e repulsão não foram adquiridos através do *software* de modelagem molecular, e sim provavelmente através da

mediação cultural. Mas também existe a possibilidade da mediação hipercultural, visto que a estudante não foi questionada nas entrevistas.

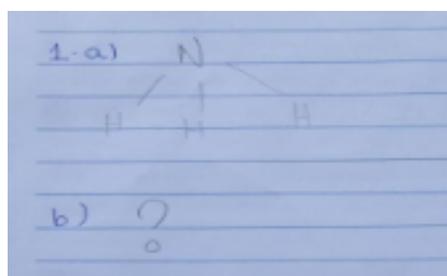
Já em relação a aluna MT quando questionada sobre a representação da Estrutura 2D e 3D, a aluna comenta:

[...] daí no pós-teste a gente já estava trabalhando com o *software*, a gente fez a molécula da amônia e da água, então eu imaginei que para fazer em uma folha em 3D a gente teria que fazer as bolinhas e as ligações, não é? Claro que não ficaria igual se a gente fizesse no *software*, mas eu acho que foi mais ou menos isso que eu pensei em colocar no papel.¹

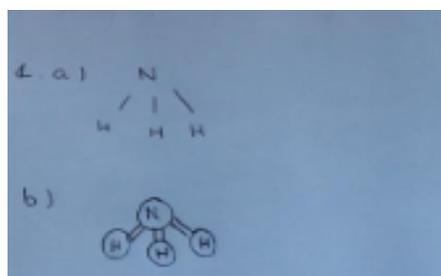
Em 1 percebemos aquisição de *drivers* hiperculturais de visualização molecular e modelagem molecular.

Quando questionada pelo professor-pesquisador em relação as bolinhas, se os átomos tinham cores, o que você imaginava? A resposta da aluna foi a seguinte: “*sim, uma cor eu sei que tem porque a gente trabalhou no software e tinha cor nas bolinhas, só que eu não pensei nessa parte na hora, eu me esqueci*”.

Figura 15 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pela aluna MT.



Pré-teste



Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

Observamos aqui a que a estudante lembrou do *software* Arguslab para representar a Estrutura 3D.

Podemos verificar no pré-teste a presença de *drivers* culturais onde a estudante representa o átomo na forma de letras e as ligações na forma de palitos para a representação 2D. Já no pós-teste a estudante MT utiliza letras e palitos para a representação de átomos e ligações para representar a estrutura 2D. Durante a entrevista quando questionada sobre as bolinhas, se os átomos tinham cor, o que você imaginava, a aluna responde que sim, e esclarece: “*a gente trabalhou no software e tinha cor nas bolinhas, só que eu não pensei nessa parte na hora, eu me*

esqueci". Percebemos a aquisição de *drivers* hiperculturais em relação a visualização dos átomos (visualização molecular), a cor visualizada no *software*.

A partir da representação 3D a estudante passa a utilizar *drivers* na forma de letras dentro de bolas e palitos para representação de átomos e ligações químicas. Salientamos que essa representação é semelhante ao *software* de modelagem molecular. Importante a citação da estudante quando afirma que as bolinhas tinham cor, ou seja, um *driver* hipercultural. Assim, concluímos que a estudante adquiriu a mediação hipercultural em relação a visualização molecular e a modelagem molecular ao representar a molécula e em relação a cor visualizada nos átomos.

No que se refere aos conhecimentos, observamos para a representação 2D o mesmo entendimento tanto no pré-teste quanto no pós-teste. Já para a representação 3D uma mudança significativa de visualização e representação da estrutura, visto que no pré-teste a estudante não respondeu à questão.

Concluímos que a estudante não tinha conhecimento inicial da representação 3D, e a mediação cultural não foi suficiente. Foi preciso o aporte da mediação hipercultural para que ela tivesse a real noção da representação em 3D da molécula. Nesse caso a habilidade visuoespacial da estudante foi modificada através da mediação com o *software*.

De acordo com o aluno GH quando questionado sobre a representação da Estrutura 2D e 3D, comenta o seguinte:

Primeiramente eu, eu pensei nos átomos que compõe a amônia né, que é o NH_3 , e tentei fazer do jeito que eu imaginei, que ali primeiro né, na representação 2D, eu fiz uma, ela só em piramidal, mas sem profundidade, né, e acho que foi isso. E na 3D. [00:04:54]

Mas esse, esse conhecimento de ter três átomos, e profundidade piramidal veio de onde? Você lembra de onde é que veio? "Isso foi pesquisando, ou não lembro se foi tu que ensinou dá geometria da amônia, mas acho que foi quando a gente teve as aulas do Arguslab" [00:05:18].

Figura 16 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pelo aluno GH.



Fonte: A pesquisa.

Em nova entrevista o aluno foi questionado sobre a questão b do pré-teste e pós-teste. Há uma modificação, por que tu fizeste aquela modificação? O que tu quiseste mostrar, tu lembra? A resposta do aluno foi a seguinte:

GH: Acho mais pela representação 3D, eu tentei mudar, pelo que eu vi no Arguslab, representar de uma maneira mais correta, talvez.

P: Mas qual representação tu achas que está mais correta, a letra a ou a letra b do pós-teste?

GH: Eu acho que eu tentei mudar a representação 3D mesmo, para tentar fazer algo mais 3D, mas não sei se foi uma tentativa falha.

P: Mas, então, para ti, a que mais representa a 3D seria a letra b do pré-teste ou do pós-teste?

GH: Eu acho que agora é a do pré-teste. [00:01:00 até 00:02:20 Vídeo 3].

Inicialmente nas representações 2D tanto no pré-teste como no pós-teste, o estudante utiliza *drivers* culturais para a representação, ou seja, letras e palitos para a representação de átomos e moléculas. Já para representar a estrutura 3D no pré-teste utiliza-se de *drivers* culturais letras dentro de bolas e palitos para representar em 3D. Acreditamos que essa representação seja de cunho cultural porque o aluno ainda não havia passado pela modelagem. Em relação a letra b do pós-teste de acordo com as declarações do aluno, o mesmo mudou a representação porque desejava representar de forma mais correta, fazer algo mais 3D. Apesar de representar corretamente voltou atrás em sua opinião e considerou a letra a como representação mais correta. Salientamos que as representações são semelhantes ao *software*, mas também semelhante aos livros. Concluímos que o estudante teve ganhos de visualização e na modelagem molecular ao interagir com o *software* mesmo ao mudar a sua opinião sobre a representação, quando citou: “acho mais pela representação 3D, eu tentei mudar, pelo que eu vi no Arguslab, representar de uma maneira mais correta, talvez”. Desse modo, em relação ao entendimento da estrutura em 3D da

molécula da amônia, podemos observar que o aluno inicialmente com a mediação cultural passa para a mediação hipercultural. Em relação a habilidade visuoespacial do estudante, concluímos que a mesma foi modificada através da mediação com o *software* de modelagem molecular

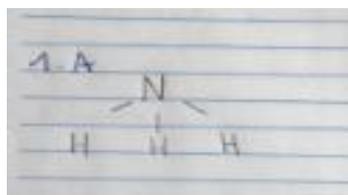
Já em relação a aluna CB, quando questionada sobre a representação da Estrutura 2D e 3D, comenta o seguinte:

[...] a B da 1, eu não fiz porque, quando a gente ainda não tinha mexido no Arguslab, daí eu não tinha noção de como é que era o 3D.

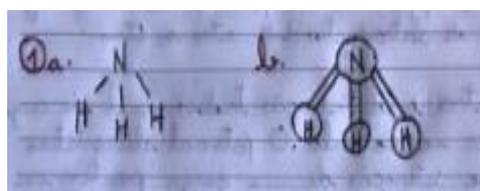
[...] aí, na B, do pós-teste eu imaginei como se fosse fazer no Arguslab lá com as moléculas tudo com as bolinhas certinho e as ligações e a o a molécula normal ali do, da amônia, no primeiro nono ano eu aprendi a fazer.

Na figura abaixo a representação da molécula da amônia no pré-teste e no pós-teste.

Figura 17 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pela aluna CB.



Pré-teste



Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

Verificamos que no pré-teste a estudante utiliza letras e palitos como *driver* culturais para a representação em 2D, e não fez a representação em 3D. No pós-teste para representar a estrutura 2D utiliza letras e palitos para a representação de átomos e ligações. Já para a representação em 3D no pós-teste utiliza letras dentro de bolas e palitos para representar o átomo e as ligações. A aluna CB comenta que fez a representação em 3D porque não tinha noção como era. A pós ter passado pela modelagem molecular a estudante afirmou: “no pós-teste eu imaginei como se fosse fazer no Arguslab lá com as moléculas tudo com as bolinhas certinho e as ligações e a molécula”. A representação em 3D é semelhante ao *software*.

Percebemos que a estudante menciona o termo bolinhas para visualização de átomos no *software*. Concluímos que a aluna CB obteve ganhos importantes em relação a visualização molecular e a própria modelagem molecular, alterando

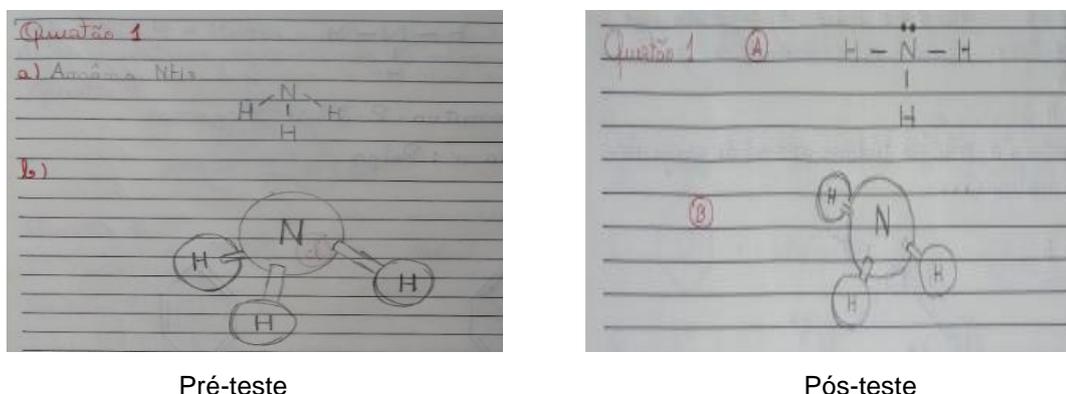
significativamente o seu entendimento em relação a estrutura 3D através da mediação hipercultural.

Concluimos que a mediação cultural não foi suficiente. Foi preciso o aporte da mediação hipercultural para que a aluna tivesse a real noção da representação em 3D da molécula. Nesse caso a habilidade visuoespacial da estudante foi modificada através da mediação com o *software*.

Em relação ao *expert*, o mesmo teceu os seguintes comentários:

[...] eu logo pensei que a estrutura 2D seria a representação de Lewis das moléculas e a 3D a representação mais próxima que se consegue desenhar da geometria da molécula. Quando eu desenhei a molécula da amônia eu levei em consideração os métodos básicos de construção das estruturas básicas dos átomos. A molécula da amônia é constituída de um átomo de nitrogênio e três átomos de hidrogênio, fórmula básica da molécula NH_3 . Considerando que o hidrogênio tem um elétron na camada de valência e o nitrogênio tem cinco elétrons na camada de valência sendo que três estão desemparelhados e dois estão formando um par de elétrons. Eu faço a correta distribuição e a correta distribuição das ligações *sigma*. Ocorrem três ligações *sigma* entre o hidrogênio e o nitrogênio, e o nitrogênio apresenta um par de elétrons no topo que caracteriza a geometria piramidal [00:05:01].

Figura 18 - Representação da molécula da amônia em 2D e 3D no pré-teste e pós-teste pelo *expert*



Pré-teste

Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

O *expert* não realizou gestos durante a entrevista nesta subcategoria. No pré-teste o estudante utilizou *drivers* culturais para representar as estruturas: no pré-teste usou letras e palitos para representar átomos e ligações e letra dentro de bolas e palitos para representar átomos e as ligações. No pós-teste para representar a estrutura 2D utilizou letras e palitos e utilizou dois pontos para representar o par de elétrons sobre o átomo de nitrogênio. Consideramos os dois pontos driver culturais para a representação do par de elétrons livres sobre o átomo de nitrogênio.

Em uma nova entrevista o aluno é questionado sobre o porquê da representação do par de elétrons no pós-teste na representação 2D? Tu terias alguma explicação por quê tu não representaste na letra a? A resposta foi a seguinte:

Expert M: Sim. Eu acho que numa das representações eu fiz sem levar em conta os pares isolados. Na letra a dos pós-teste tem a representação do par de elétrons isolado na molécula. E isso aí eu não levei em conta no pré-teste. Acho que o porquê eu fiz isso, na hora eu não lembrei ou não achei relevante eu representar isso, porque ali na letra a é uma representação só das ligações, sem levar em conta a geometria molecular. Acho que foi isso mesmo. [00:00:30 até 00:02:00 Vídeo 3].

O aluno também é questionado em relação as representações da letra b no pré-teste e no pós-teste, se era para ser a mesma representação? A resposta do aluno foi:

Expert M: É para demonstrar de que maneira os hidrogênios estão ligados no nitrogênio. Para formar a geometria trigonal piramidal da amônia. Eu tentei ali representar ela como uma *piramidezinha*, mas é difícil desenhar. É para ser igual, tanto quanto no pós-teste eu já tinha a imagem tridimensional da amônia.

P: Essas representações que tu fizeste, tanto no pré-teste como no pós-teste, esses desenhos, o que tu imaginavas, de onde saiu isso?

Expert M: Já tinha fonte externa da literatura que eu havia adquirido. Eu já havia visto muitas vezes a molécula da amônia, em mapas de potencial eletrostático, mostrando polaridade, geometria, tudo isso eu já havia aprendido. [00:02:00 até 00:03:00 Vídeo 3].

A conclusão que chegamos é a presença da forte mediação cultural por parte do aluno, não havendo evidências de drivers hiperculturais. Como está descrito na apresentação do *expert*, o *software* Arguslab serviu apenas como um organizador prévio.

8.3.2 Análise na Subcategoria Geometria Molecular e Polaridade

Em relação a categoria Geometria Molecular e Polaridade o aluno W, comentou:

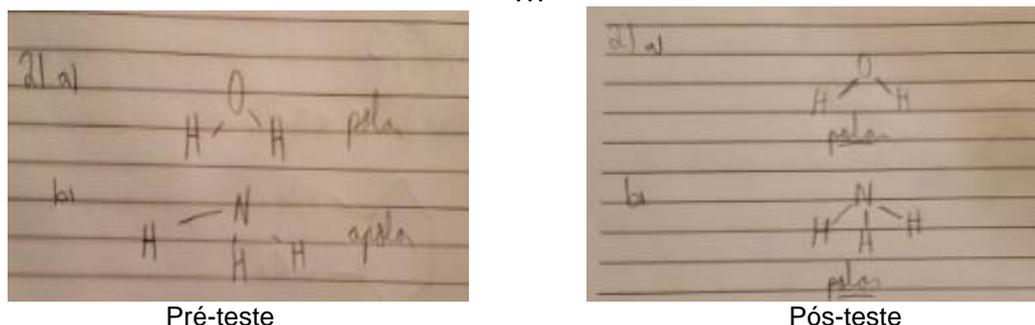
No pré-teste a representação ficou similar, mas eu errei a polaridade da amônia. Eu botei apolar no pré-teste. Igual eu te falei eu estava com aquela imagem que a eletronegatividade tudo mais.. só que na verdade eu devia ter pensado menos nisso e mais na geometria em si que foi daí dessa visualização mais de ver as três dimensões.

Porque quando eu fiz o pré-teste eu enxergava as moléculas de uma maneira muito escrita na folha não tentava fazer esse exercício mental de trazer a molécula tridimensionalmente. Isso só foi ali conforme nós fomos fazendo os exercícios que eu consegui visualizar isso em três dimensões".¹ Até este ponto o aluno estava tratando de representação 3D. "E percebi que isso faz criar um polo em cima um polo embaixo, e depois no pós-teste eu consegui que era apolar sim, como a água. E a água botei que polar porque é solvente universal e já tinha noção que era polar."² Na questão da polaridade foi com o expert M. Quando a gente estava fazendo os exercícios eu perguntei a importância da geometria. Por que eu não podia representar de uma outra forma se tivesse a mesma quantidade de átomos. Tem um nitrogênio e três hidrogênios e por que eu não posso colocar em outro lugar e ele me explicou que as forças fazem com que fique sempre da mesma forma a amônia e que estando todos os hidrogênios abaixo e o nitrogênio acima cria um campo de polo positivo e negativo. Então a molécula vai ser polar porque está bem definido onde vai ser positivo e negativo os polos da molécula.³ [00:19:46].

Em percebemos a mediação hipercultural com ganhos em relação a visualização molecular. Já em 2 a mediação cultural, e em 3 não temos como identificar a origem dos *drivers*, mas é possível supor que sejam hiperculturais porque o aluno cita o "*ele me explicou*", quando o aluno se refere ao *expert M* explicando os conteúdos através do *software*.

A figura abaixo ilustra representação no pré-teste e pós-teste das moléculas da água e da amônia.

Figura 19 - Representações da molécula da água e da amônia no pré-teste e no pós-teste pelo aluno W.



Fonte: A pesquisa.

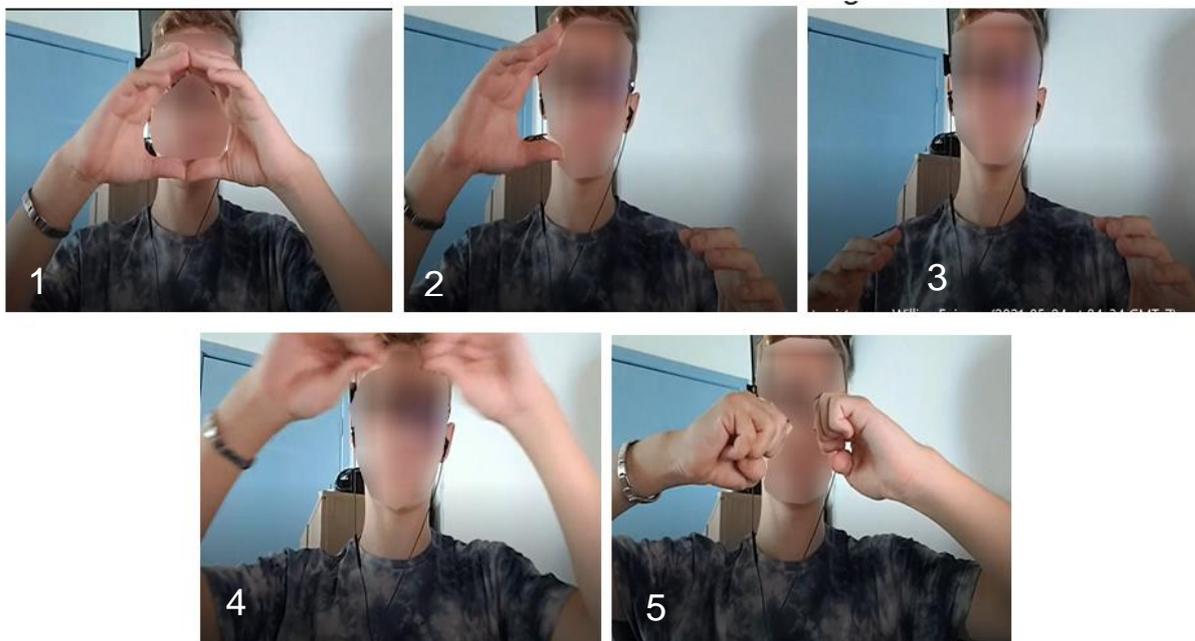
Nas representações acima observamos por parte do estudante a utilização *drivers* culturais tanto no pré-teste como no pós-teste, tais como: letras e palitos para a representação dos átomos e ligações químicas.

No que se refere a polaridade da molécula da água, o estudante comenta que a água é solvente universal, ou seja, faz a analogia entre polaridade e o solvente, e acerta a questão. A explicação mais plausível para esta analogia, é que em muitas oportunidades os professores do Ensino Médio utilizam-se desta relação nas aulas. Em relação à molécula da amônia o estudante no pré-teste erra a resposta e acerta no pós-teste.

Quando o aluno é questionado pelo professor-pesquisador sobre a representação da molécula da água no pós-teste, e se ele modificaria alguma coisa em uma nova representação, e o que ele modificaria, o estudante comenta e gesticula:

Aqui está o oxigênio e ele é um pouco maior que o hidrogênio e os hidrogênios. Os átomos estão um de frente para o outro justamente devido a positividade e eles se repelem. Os átomos de hidrogênio estão aqui em baixo devido aos quatro elétrons que sobram em cima do oxigênio⁴ [00:21:34].

Figura 20 - Sequência de gestos do estudante W, representando a molécula da água com os pares de elétrons livres sobre o átomo de oxigênio.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 com as duas mãos aproximadas de frente para outra na forma de bola a representação do átomo de oxigênio. Na imagem 2 com a mão esquerda aberta em forma de concha o átomo de oxigênio e a mão esquerda aberta a baixo a representação do átomo de hidrogênio também em forma de concha. Na imagem 3 com as duas mãos afastadas e abertas, a representação dos átomos de hidrogênio na parte inferior em forma de concha. Na imagem 4 com os dedos polegar e indicador da mão esquerda e direita e afastados, a representação dos dois pares de elétrons livres sobre o átomo de oxigênio na forma de ponto. Já na imagem 5 com as duas mãos fechadas em forma de esfera os dois pares de elétrons livres sobre o átomo de oxigênio [00:20:43].

Sabemos que a representação de bolas e palitos é uma representação comum entre os livros e os *softwares* de modelagem molecular. Então, para saber exatamente se tais representações das imagens mentais, externalizadas por gestos, são de fato hiperculturais deveríamos ter realizado o devido questionamento na entrevista. Desse modo, não podemos afirmar se as representações utilizadas pelo aluno, são de fato de origem hipercultural.

Após o aluno é questionado em relação à geometria da água, qual seria a geometria, e o aluno responde angular. Mais adiante o pesquisador pergunta onde o aluno obteve essas informações, e o estudante relata:

A gente chegou a ver isso ano passado. Eu tinha entendido, mas muito superficialmente não na prática sabe. Essa visualização de trazer mais para a prática surgiu tendo uma sensação mais tridimensional da molécula.⁵ Eu acho que essa chave virou quando eu conversei com o expert M, mas essa visão mais tridimensional da molécula veio conversando com o expert visualizando a molécula em 3D. Depois que eu consegui visualizar em 3D eu consegui entender muitas coisas como porque as coisas estão funcionando ali porque precisam ter essa distância e ângulos. Essa chave virou na minha cabeça com a conversa com o expert diante da tri-dimensão da molécula com o Arguslab⁶ [00:23:21].

Aqui em 5 ele reconhece que entendeu superficialmente e que a visualização da molécula ajudou na compreensão. De fato, ele virou a chave a partir da conversa com o *expert*, mas não podemos negar que, na mediação cultural com o *expert*, há um elemento hipercultural presente, pois eles foram manipulando a molécula no *software* enquanto conversavam. Já em 6 está bem claro que o ganho de conhecimentos está relacionado com a aquisição de *drivers* culturais (na conversa

com o *expert*), e hiperculturais na manipulação com o *software* quando o aluno menciona em 7 que o *expert* compartilhou a tela e utilizou o *software* Arguslab.

Observamos aqui um ganho na visualização molecular, ou seja, um *driver* de visualização molecular.

Após o pesquisador pergunta, quando tu disseste que conversa com o *expert* M e visualizou isso, como aconteceu foi no papel ou ele te mostrou, como foi isso?

A gente fazendo aqueles exercícios de modelagem, eu liguei para o *expert* através do Discord que tu podes ligar para amigos e nisso tem uma opção que tu compartilhas a tela como no Google Meet. Eu liguei para o *expert* compartilhei a tela e o *expert* ia me explicando. Após ele abriu o Arguslab dele e compartilhou a tela e aí eu vendo a explicação e a modelagem do *expert* eu consegui ter essa noção de entender a molécula em três dimensões⁷ [00:24:30].

Aqui em 7 temos a prova cabal da aquisição de *drivers* hiperculturais, pois tudo na conversa foi mediado por processamento extracerebral de natureza hipercultural

Em uma nova entrevista, o aluno foi questionado em relação a questão da polaridade da molécula da amônia, e resposta foi a seguinte:

W: [...] tanto que eu errei a polaridade ali na primeira dos testes, que eu coloquei que seria apolar.

P: Mas tu erraste no pré-teste, tu não sabias, não tinha certeza se era polar ou apolar, é isso?

W: Na segunda eu já acertei por já ter mais a percepção de como funciona a polaridade.

P: Essa percepção de como funciona a polaridade, onde é que tu aprendeste isso?

W: Tanto nas aulas, nos livros⁸. Nesse sentido o *software* de modelagem ajudou muito⁹. Tu consegues visualizar, tem uma opção, não lembro onde era, mas lá no *software* tu tinhas uma opção que ele fica bem certinho as cores¹⁰. Onde mostra quando fica mais negativo e positivo na molécula, para conseguir ver a criação de polos.

P: Então foi no *software*?

W: É, no *software*. Tu tens a molécula, eu não lembro onde é que era que tu clicavas, faz tempo que eu não abro o *software*. Mas tem um lugar que tu apertavas lá no *software* que ele tinha cores. Daí tu consegue ver bem direitinho que na parte dos hidrogênios ele tem uma cor, e na parte dos nitrogênios tem outra cor.¹¹

P: Quando tu disseste que viu no *software* seria parecido com isso: é colocado na tela o mapa de potencial eletrostático do fenol.

W: É isso. Consegue-se visualizar os campos. Onde é positivo e negativo para ter uma percepção mais espacial de cada um dos polos. Para mim na minha concepção ajudou muito, ficou mais claro, sabe. Do que era apolar e polar.¹² [00:11:00 até 00:14:00 Vídeo 3].

Em 8 temos uma mediação cultural, em 9, 10, 11 uma mediação hipercultural. Em 12 ele responde muito claramente que, embora haja *drivers* culturais, eles não foram suficientes para a correta compreensão da polaridade da molécula. Somente com a aquisição de *drivers* hiperculturais essa compreensão foi consolidada. Em 13 a mediação hipercultural promovendo aquisição de conceitos para melhor resolver questões de polaridade das moléculas. Já em 14 não representou pares de elétrons no pré-teste. E, de fato, não os considerou porque, se tivesse considerado, teria se dado conta de que a molécula não é trigonal planar e sim piramidal.

Em outra etapa, realizamos uma entrevista extra com o *expert M* a fim de compreender como foi a explicação desses detalhes para o aluno W.

P: Questiona o *expert* sobre o que o aluno W entendia por percepção mais tridimensional da molécula?

Expert M: Eu acredito que é referente a geometria da molecular.

Expert M: Porque o W antes, ele não tinha estabelecido nenhuma ligação entre geometria da molécula e como isso provocava a polaridade por conta das características de cada átomo. Como ele falou antes, ele tinha que a molécula da amônia era apolar porque ele não considerava a geometria molecular e como isso influenciava as questões de polaridade. Eu dei as explicações, expliquei para ele porque a amônia não é trigonal planar, ela tem uma curvatura entre os átomos de hidrogênio, isso faz com que o nitrogênio, que é mais eletronegativo, puxe os elétrons e crie um polo negativo em volta dele.

P: Então, ele enxergou isso através do Arguslab?

Expert M: Sim. Eu usei o Arguslab como ferramenta para explicar para ele, tudo aliado com o Mapa de Potencial Eletrônico que o *software* dispõe, e daí eu pude mostrar para ele bem claramente como que se cria os polos.¹³ Foi importante porque antes ele nunca teve contato, eu acho, com essa questão, e o Arguslab é um programa que dispõe de ferramentas muito didáticas, muito intuitivas para demonstrar essas questões. [00:03:42 até 00:09:00 Vídeo 2].

Conforme relatado acima, consideramos que os gestos produzidos pelo estudante para representar a imagem mental da molécula da água e os pares de elétrons são de cunho hipercultural.¹⁴ Concluímos que o estudante W obteve um ganho significativo em relação à visualização molecular (*driver* de visualização molecular) obtida através da mediação hipercultural, através do mapa de potencial eletrostático, conhecimento que o estudante não tinha antes. Apesar do aluno W não representar o mapa de potencial eletrostático da molécula da água e da amônia durante o pós-teste e durante as entrevistas, e de acordo com a linguagem verbal do próprio aluno e do *expert*, foi possível ao estudante W definir a polaridade da molécula da amônia. A mediação cultural não foi suficiente para que o estudante “virasse a chave”. Foi preciso o aporte da mediação hipercultural para que ele tivesse a real

noção do efeito da geometria da molécula na polaridade. Nesse caso a habilidade visuoespacial foi modificada através da mediação com o *software*.

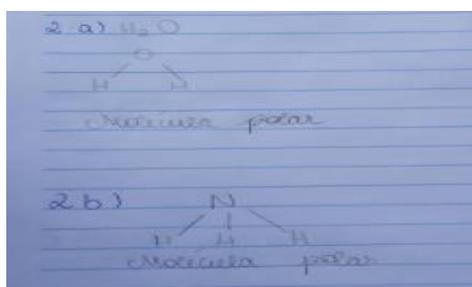
Já em relação à estudante MT, quando questionada sobre a Geometria Molecular e Polaridade, ela teceu os seguintes comentários:

Para fazer isso eu imaginei de novo a água, H_2O , e como eu já vi e havia estudado, como eu estava sempre estudando e vendo geometria em química normal na matéria, eu já sabia que a geometria da água é angular, então eu meio que só coloquei o oxigênio, hidrogênio, puxei a ligação e coloquei hidrogênio, daí puxei a outra ligação e coloquei outro hidrogênio. Então eu acho que foi isso e eu também sabia que ela era polar porque ela tem densidade eletrônica, eu acho que é assim que se fala, quando sobra elétrons não preenche totalmente porque o oxigênio tem mais elétrons disponíveis na camada.

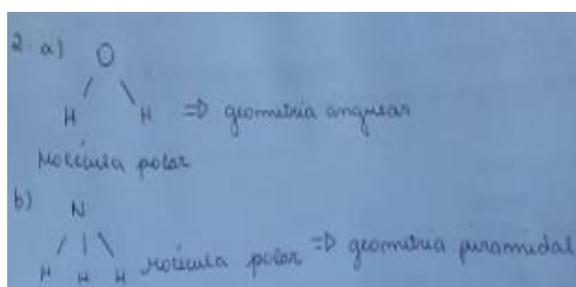
Percebemos no contexto acima a presença da mediação cultural por parte da estudante. Temos aqui a presença de *drivers* culturais de visualização molecular.

A figura abaixo ilustra as respostas da estudante durante o pré-teste e pós-teste.

Figura 21 - Representação da molécula da água e da amônia no pré-teste e pós-teste da aluna MT.



Pré-teste



Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

No que diz respeito às representações do pré-teste e do pós-teste, verificamos que a estudante utilizou *drivers* culturais, como: letra e palitos para a representação de átomos e ligações químicas.

Na figura abaixo a representação da imagem mental de parte da molécula da água.

Figura 22 - Sequência de gestos da aluna MT, representando parte da molécula da água.



Fonte: A pesquisa.

Na primeira imagem a estudante com a mão direita fechada na forma de esfera representa o átomo de oxigênio. Na segunda imagem com a mão direita parcialmente fechada em forma de concha, representa um átomo de hidrogênio [00:12:15].

Podemos observar a presença de um *driver* cultural, ou seja, a forma de concha para representar o átomo de oxigênio e hidrogênio. Nesse caso, como não questionamos a origem dos gestos, não podemos afirmar sobre a aquisição da mediação hipercultural. Acreditamos que de acordo com o contexto acima, a origem seja de natureza cultural.

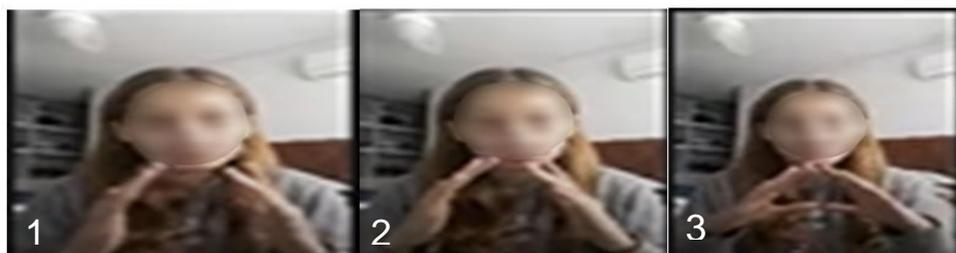
Mais adiante a aluna é questionada sobre a molécula da amônia, o que você imaginou para responder essa questão da amônia?

Tranquilo. Tá. Daí como a gente tinha feito no *software*, se você tivesse feito várias vezes você ia conseguir lembrar na hora que era o formato piramidal, geometria piramidal, se eu não me engano foi isso que eu respondi, eu acho que sim, porque eu olho ali e eu vejo um triângulo, eu relaciono a pirâmide, é basicamente isso. E polar porque sobra aqueles dois pares de elétron, no caso eu teria que ter colocado os dois pontinhos ali em cima do N que sobraram e porque é eletronegativo. Eu acho que foi mais ou menos isso que eu imaginei na hora.¹

Em 1 temos a aquisição de drivers hiperculturais em relação a visualização molecular.

Na figura abaixo a representação mental da geometria da molécula da amônia.

Figura 23 - Sequência de gestos da aluna MT, representando a geometria da molécula da amônia.



Fonte: A pesquisa.

Na primeira, segunda e terceira imagem a aluna com as duas mãos abertas e estendidas para cima representa uma pirâmide, relacionando com a geometria da molécula. A estudante faz analogia entre triângulo com pirâmide para mencionar a geometria da molécula [0:16:20].

Podemos observar a presença de dois *drivers* hiperculturais: o triângulo e a pirâmide, para representar a geometria da molécula.

Em nova entrevista, a estudante foi questionada em relação às imagens mentais, ou seja, o que você imaginava quando produzia os gestos:

P: O que você imaginava quando produzia os gestos?

MT: Eles vinham primeiramente de livros, e a estrutura, as moléculas em parte vinham do *software* de modelagem, o Arguslab. Os livros também têm esse conteúdo visual para a gente imaginar como seria mais ou menos na prática.

P: Então, o *software* foi útil para alguma coisa. O que trouxe de bom?

MT: Na minha opinião, eu acho que foi muito bom, porque a gente, geralmente, nos livros a molécula é em geometria plana. E o *software* possibilita a gente poder movimentar a molécula, conseguir visualizar melhor como que funciona os ângulos, e o formato dela, a estrutura que ela representa. Enfim, acredito que foi muito útil. [00:02:00 até 00:04:00 Vídeo 2].

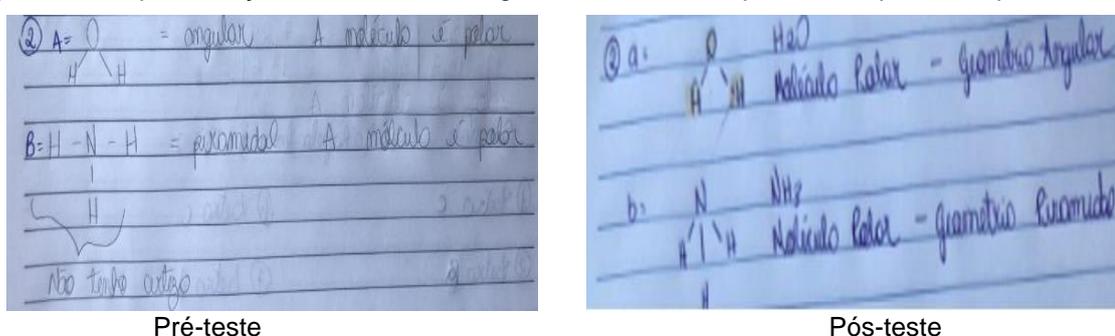
Em relação à linguagem gestual, percebemos uma mescla entre a mediação cultural e a hipercultural. Em relação ao *software*, a aluna afirma que o mesmo possibilita poder movimentar a molécula, conseguir visualizar melhor como que funciona os ângulos, e o formato dela, a estrutura que ela representa. Concluímos que a estudante tenha adquirido um ganho de visualização molecular e construção molecular após a passagem pela modelagem molecular. De acordo com o contexto acima, foi preciso o aporte da mediação hipercultural para a estudante poder obter ganhos na visualização molecular e no que diz respeito a modelagem molecular entre o pré-teste e o pós-teste. Nesse caso a habilidade visuoespacial foi modificada através da mediação com o *software*.

No que se refere aos conhecimentos sobre geometria e polaridade nas representações, a aluna acerta as respostas tanto no pré-teste e no pós-teste.

No que diz respeito a aluna JR quando questionada sobre a Geometria Molecular e Polaridade, ela comenta o seguinte:

No pré-teste, essa foi uma questão que me deixou bastante em dúvida, porque eu estava meio em dúvida ali sobre as geometrias, só que daí meu raciocínio foi, tanto é que eu coloquei nas duas a mesma resposta. O raciocínio foi assim, na molécula de água, a molécula de água tem três átomos, um de oxigênio e dois de hidrogênio, então como tem três átomos, para mim, na minha percepção, ela é angular, ou linear, só que entre essas duas eu fiquei com a angular, porque, enfim, fiquei com a angular.¹

Figura 24 - Representação da molécula da água e da amônia no pré-teste e pós-teste pela aluna JR.



Fonte: A pesquisa.

Em 1 não questionamos em relação à origem das mediações, portanto, podemos supor que foram adquiridos através da mediação cultural somente. A aluna fez o raciocínio com o número total de átomos diatômico e tri-atômico, típica representação verificada em alguns livros de ensino médio.

Podemos perceber a utilização de *drivers* culturais tanto no pré-teste como no pós-teste: a estudante utilizou letras e palitos para representar os átomos e as ligações químicas. Também podemos observar a diferença na representação da molécula da amônia no pré-teste e no pós-teste, ou seja, uma diferença significativa. Como não questionamos a estudante em relação a essa mudança de representação, fica muito difícil afirmar a aquisição de uma mediação hipercultural.

Mais adiante, no final da entrevista, quando o tema central era o que você entende por geometria molecular, foi solicitado para a aluna representar a molécula da água. A resposta em termos de linguagem verbal e gestual foi a seguinte: “vamos lá. Tem o oxigênio, duas moléculas de hidrogênio, onde fazem uma espécie de ângulo de 120 graus entre a molécula” [01:11:12].

A estudante mencionou um ângulo de 120° , o que consideramos apenas um engano por parte dela.

A aluna é questionada se não falta mais alguma coisa no átomo de oxigênio?

JR: Os elétrons livres.

P: Quantos pares de elétrons?

P: Livres dois.

Se eu não me engano, Sor, o meu raciocínio foi porque ela tem três átomos, e quando tem três átomos geralmente é angular. Tem casos que são lineares, mas no caso da água é angular. A gente já tinha visto alguma coisinha também sobre ângulos, então acredito que foi por isso que eu coloquei angular, Sor.

Figura 25 - Sequência de gestos da aluna JR, representando a molécula da água mencionando o ângulo de ligação e os pares de elétrons não ligantes sobre o átomo de oxigênio.



Fonte: A pesquisa.

Na primeira imagem com a mão direita em forma de concha a representação do átomo de oxigênio. Na segunda imagem com as duas mãos em forma de concha uma de frente para a outra a representação de dois átomos de hidrogênio. Na terceira e na quarta imagens com dedo indicador da mão direita em movimento a representação do ângulo de $104,5^\circ$ entre os átomos de oxigênio e hidrogênio. Na quinta imagem com dois dedos da mão direita a aluna menciona os dois pares de elétrons livre. [1:11:09].

No tocante aos *drivers* durante os gestos, podemos observar a presença de *drivers*, tais como: forma de concha para representar átomos; dedo em movimento para representar o ângulo e dois dedos, traços (palitos) para representar o par de elétrons livres. Como não foi questionado em relação a origem dos *drivers*, não podemos afirmar sobre a aquisição da mediação hipercultural, ou seja, simplesmente analisando os gestos não nos leva a certeza da aquisição hipercultural.

A estudante complementa o raciocínio:

Foi assim, na molécula de água, a molécula de água tem três átomos, um de oxigênio e dois de hidrogênio, então como tem três átomos, para mim, na minha percepção, ela é angular, ou linear, só que entre essas duas eu fiquei com a angular, porque, enfim, fiquei com a angular.

A estudante apresenta através da linguagem verbal os conteúdos encontrados na literatura, a relação entre a geometria da molécula com o número de átomos que constituem a molécula, tri-atômico, diatômico.

Segundo o contexto, apesar da representação da molécula da amônia na letra b do pós-teste ser semelhante ao *software*, percebemos a presença da mediação cultural por parte da estudante JR, não podemos concluir em relação à mediação hipercultural porque não questionamos eficazmente, ou seja, não fomos a fundo do porquê da diferença na representação na letra b do pós-teste.

Concluindo em relação aos conhecimentos verificamos que a aluna acerta as questões em relação à polaridade, mas representa equivocadamente a geometria da molécula da amônia no pré-teste e acerta no pós-teste. Há um ganho na visualização e na modelagem, mas em relação à aquisição da mediação hipercultural é inconclusiva.

No que diz respeito ao aluno GH quando questionado sobre a Geometria Molecular e Polaridade, ele comenta o seguinte:

Pensei de novo ali nas, nos átomos, montei a molécula, ali da água, os dois hidrogênios e o oxigênio [00:11:44].

A seguir o aluno gesticula e fala ao mesmo tempo. Daí, eu sei que a geometria dela, não é que eu sabia, mas eu pesquisei assim, e soube que a geometria dela é angular, porque ela é uma molécula tri-atômica né, não, é tri-atômica [00:11:57].

O professor-pesquisador pergunta, onde buscastes essas informações? “Isso na internet, e livros” [00:11:58].

No decorrer da entrevista o estudante através de gestos e fala representa a molécula da água:

Tá, primeiramente a da água, ela é polar pelo fato de eu vou explicar assim por ela ter polos. Tá, aqui em cima tá o oxigênio e aqui estão os hidrogênios né, essa linha de baixo são os hidrogênios e aqui é o oxigênio [00:18:54].

Figura 26 - Sequência de gestos do aluno GH, representando a molécula da água.



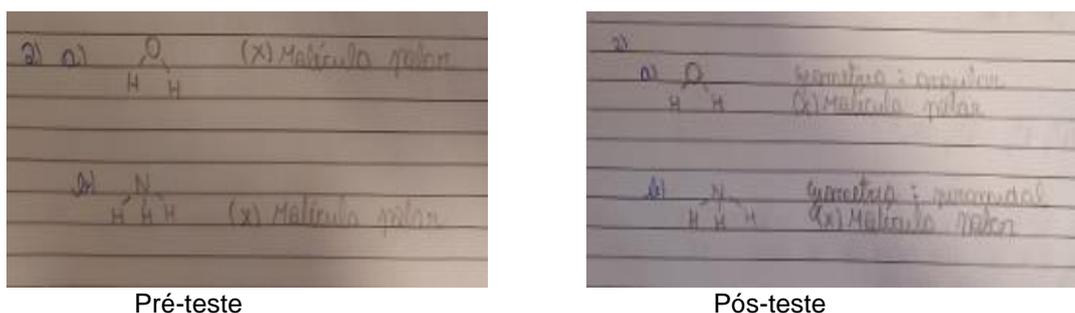
Fonte: A pesquisa.

Na primeira imagem o estudante com a mão direita em forma de concha representa o átomo de oxigênio na parte superior, e com a mão direita em forma de concha representa o átomo de hidrogênio. Na segunda imagem com a mão esquerda em forma de concha, leva a mão para a esquerda para representar outro átomo de hidrogênio [00:19:00].

Observamos a presença de um *driver* cultural, a forma de concha para representar o átomo.

A figura abaixo ilustra as respostas do pré-teste e pós-teste da molécula da água e da amônia.

Figura 27 - Representação da molécula da água e da amônia no pré-teste e pós-teste pelo aluno GH.



Fonte: A pesquisa.

Acerca das representações o aluno utiliza *drivers* culturais de letras e palitos para representar os átomos e as ligações químicas.

Em relação aos conhecimentos sobre a polaridade e a geometria das moléculas, tanto no pré-teste como no pós-teste, o estudante respondeu corretamente. Concluindo, conforme o contexto, é inconclusivo em relação à aquisição da mediação hipercultural por parte do aluno.

De acordo com o *expert*, ele teceu os seguintes comentários quando questionado sobre a Geometria Molecular e Polaridade:

A molécula da água e da amônia são moléculas básicas. Eu já tinha a imagem formada de tanto, tanto exercitar, mas estou ciente de que o oxigênio, ehh, ele precisa de fazer duas ligações para completar a camada de valência, o octeto. E o hidrogênio um elétron para completar o dueto, e aí formam-se duas ligações *sigma* entre o hidrogênio e o oxigênio. O oxigênio já tinha dois pares de elétrons completos e por conta disso a força repulsiva dos pares de elétrons na superfície do átomo de oxigênio vão conferir as ligações um ângulo de aproximadamente 105° , $109,5^\circ$ formando uma geometria angular no caso da molécula da água. E amônia é o mesmo caso que falei anteriormente, um par de elétrons livre no nitrogênio e ele forma três ligações *sigma* com o hidrogênio. O par de elétrons livres no nitrogênio vai fazer repulsões, forças repulsivas nas ligações *sigma*, fazendo com que ela (molécula de amônia), adquira um arranjo uma geometria trigonal plana [00:09:52].

Após o *expert* comenta e gesticula sobre a polaridade:

Quanto a polaridade é bem fácil, eu já, eu já de tanto pegar, eu já consegui entender muito bem polaridade. No caso da água por conta da geometria angular os três átomos da molécula estão postos num arranjo, não é uniforme, completamente uniforme, é um pouquinho acentuado e além disso, os átomos presentes na molécula da água apresentam uma eletronegatividade diferente. No caso ali, o oxigênio tem uma eletronegatividade muito maior do que o hidrogênio. Por conta disso, devido essa alta eletronegatividade, o oxigênio tem o poder de atrair muitos elétrons ao redor de si, o que aumenta a sua nuvem eletrônica, e os hidrogênios por sua vez perdem elétrons para o oxigênio, e por conta disso com uma maior concentração de elétrons no oxigênio, ocorre ali um polo parcial negativo. Enquanto que na região inferior onde estão os hidrogênios ocorre um polo parcial positivo com deficiência de elétrons. Logo, por conta disso, há formação de polos eletrônicos, e a molécula é polar [00:11:22].

Figura 28 - Sequência de gestos do expert M, representando a eletronegatividade na molécula da água.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 com a mão direita em forma de esfera a representação dos átomos de oxigênio e hidrogênio. Já na imagem 2 e 3 com as mãos em forma de concha, a representação da atração de muitos elétrons ao redor do átomo de oxigênio. Na imagem 4 com as duas mãos em forma de concha expelindo, ejetando os elétrons do hidrogênio para o oxigênio. Na imagem 5 com as mãos em forma de concha representando os átomos de hidrogênios na região inferior. Finalizando, na imagem 6 com as duas mãos na forma de plano a representação do polo, onde o aluno comenta que forma um polo parcial positivo com deficiência de elétrons. [00:11:08].

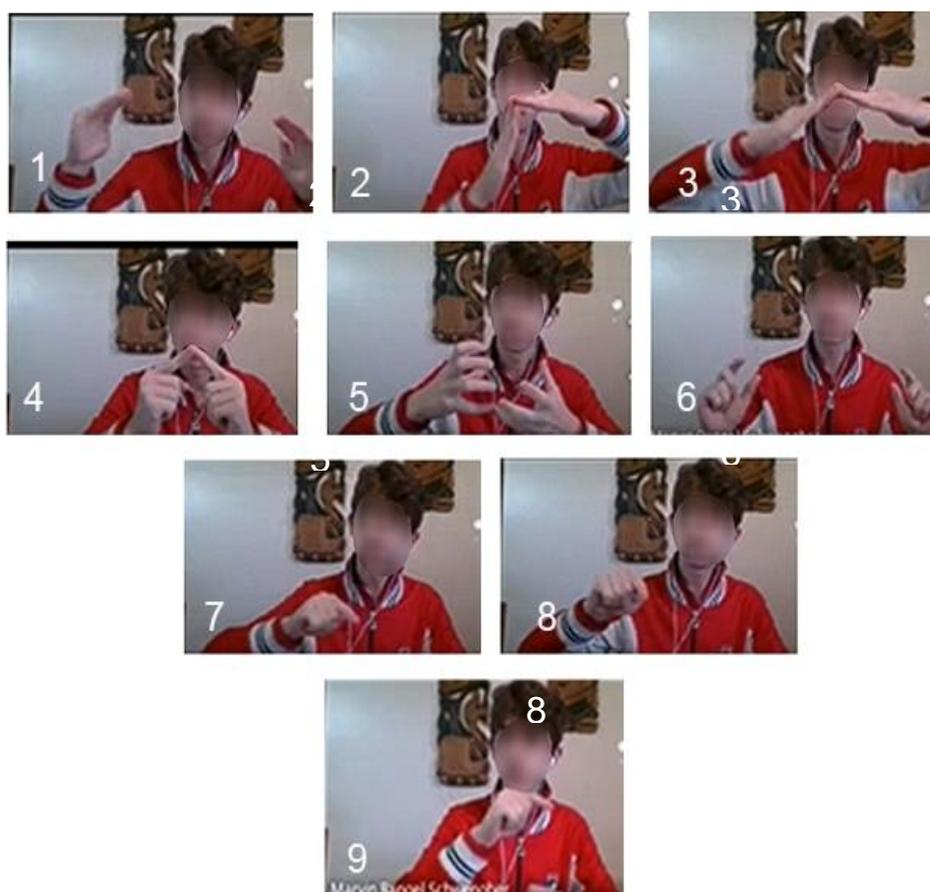
Constatamos que o *expert* se utiliza dos seguintes drivers culturais: forma de esfera para representar átomo de oxigênio e hidrogênio; forma de concha para representar átomo, oxigênio e elétrons; forma de plano para a representação de um polo.

No transcorrer da entrevista o aluno foi questionado, caso ele fosse representar a molécula para um colega, como tu farias? Tu não tens quadro e papel. Como tu farias para o colega entender essa molécula da água, por exemplo? Como tu explicarias, tu estás de frente para ele lá no corredor? [00:11:40]. Através da linguagem verbal e gesticulações, o expert expõe o seu raciocínio:

Primeiro eu perguntaria para ele se ele conseguiria imaginar um ângulo, o ângulo entre as duas retas, e se ele conseguisse imaginar um ângulo de 105° . Se ele responder que sim, um pouquinho maior que noventa, uma coisa aproximadamente assim. Eu peço, coloca no ponto de interseção entre as linhas, aí, tu imaginas o átomo de oxigênio que é um átomo grande, um pouco volumoso, e ao decorrer das duas linhas tu vai colocar um átomo de hidrogênio em cada linha formando uma ligação com oxigênio e que entre essa ligação existe um ângulo de ligação de 105° como eu havia explicado, e é isso [00:12:42].

A figura abaixo ilustra as gesticulações durante a entrevista entre o intervalo [00:11:08 até 00:13:38]:

Figura 29 - Sequência de gestos do *expert M*, representando a molécula da água mencionando o ângulo entre os átomos.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 com as duas mãos abertas na forma de contorno a representação da molécula. Na imagem 2 e 3 com as mãos em forma de V o ângulo de entre os átomos. Já na imagem 4 com os dedos indicadores unidos (forma de ponto) a representação do átomo de oxigênio. Na imagem 5 com as mãos em forma de concha a representação do átomo de oxigênio. Na imagem 6 com as mãos na

forma de esfera a representação dos átomos de hidrogênio. Na imagem 7 com o dedo indicador da mão direita a representação do átomo de oxigênio. Já na imagem 8 e 9 com o dedo indicador da mão direita e realizando um giro a representação do ângulo entre os átomos.

Analisando as imagens verificamos que o expert utilizou vários drivers culturais para a representação. Destacamos os seguintes: para representar a molécula utilizou a forma de contorno; para ângulo com os dedos (palitos) na forma de V; forma de ponto para átomos; forma de concha para átomos; forma de esferas para átomos; com dedo (palito) com giro, forma de ponto para representar ângulo.

O professor-pesquisador pergunta novamente se o aluno representaria com mais detalhes o expresso em relação à nuvem eletrônica e comprimento de ligação? O *expert* relata:

Eu poderia falar se eu quisesse explicar porque a molécula tem essa forma. De fato, se ele perguntasse porque, a molécula é assim, não é reta, eu iria explicar que o oxigênio já tem dois pares de elétrons que já estão emparelhados e que eles ficam dispostos na parte superior da molécula (depende do ponto de vista), e que esses dois pares de elétrons vão exercer repulsões sobre as ligações interatômicas que nada mais são que um par de elétrons compartilhados entre os átomos [00:13:38].

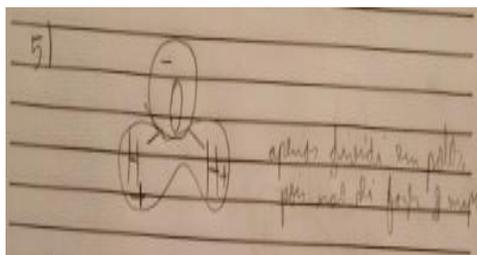
Em relação aos conhecimentos envolvidos nesta subcategoria, geometria molecular, densidade eletrônica e polaridade, e de acordo com a descrição do expert na apresentação do aluno, concluímos que a fonte dessas informações, são provenientes da literatura, ou seja, da mediação cultural. Reiteramos mais uma vez que de acordo com as declarações do expert, que o *software* Arguslab serviu apenas como um organizador prévio.

8.4 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA MAPA DE POTENCIAL ELETROSTÁTICO

8.4.1 Análise na Subcategoria Densidade Eletrônica

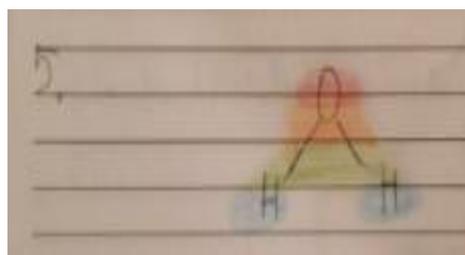
Na figura abaixo ilustramos as representações da molécula da água pelo aluno W no pré-teste e pós-teste.

Figura 30 - Representação da molécula da água pelo aluno W no pré-teste e pós-teste



Pré-teste

Fonte: A pesquisa.



Pós-teste

Podemos observar a diferença nas representações no pré-teste e no pós-teste. No pré-teste o aluno não representa a molécula com cores, mas no pós-teste já faz uso de cores. Tanto no pré-teste como no pós-teste o estudante representa os átomos na forma de letras e as ligações na forma de palitos, o seja, utilizou *drivers* culturais. O aluno não foi questionado a fundo em relação às diferenças entre a representação estrutural. Assim, não temos como justificar a razão entre elas. Importante salientar a representação de outro *driver* cultural através de um traço da carga negativa sobre o átomo de oxigênio. No pré-teste o estudante fez a representação da molécula mostrando através de cores o potencial eletrostático da molécula.

Concluimos que o estudante W obteve mais uma vez um ganho significativo em relação à visualização molecular, obtida através da mediação hipercultural, onde através do mapa de potencial eletrostático, conhecimento que o estudante não tinha antes, foi possível representar as regiões positivas e negativas da molécula. Podemos considerar também um ganho na modelagem molecular, quando analisamos as diferentes representações. Sendo que o segundo desenho é mais representativo, semelhante em relação ao *software*. Desse modo, verificamos que o estudante adquiriu *drivers* de visualização molecular e modelagem molecular devido à interação com o *software* de modelagem molecular.

Na categoria Mapa de Potencial Eletrostático o aluno W faz os seguintes comentários durante o transcorrer da entrevista:

Justamente isso que eu entendo como entender o potencial eletrostático para entender as reações enfim, como a molécula vai se comportar. Porque quando tu representas aquelas cores além de uma molécula polar, por exemplo, para mostrar onde está o lado negativo e conforme ela vai diminuindo a negatividade digamos assim, e vai indo para o positivo tu consegue visualizar isso vendo como realmente estão o potencial.¹ E a mesma forma no benzeno consegue ver aquele potencial, e quando tu

ligas lá tu vê o que é a eletronegatividade do radical que tu ligou ao benzeno faz trazendo uma forma diferente ali, ela realmente te trás essa ideia para conseguir visualizar melhor a utilidade desse potencial, justamente mexendo com o benzeno quando tu trocando o radical tu conseguia perceber uma diferença, onde justamente as possíveis outras ligações ocorreriam no *orto*, *para* e *meta*. Então, nesse sentido [00:36:33].

No Arguslab. Quando tu colocas o benzeno na parte de cima tu bota um radical um cloro, qualquer radical, e aí tu percebias que isso o potencial eletrostático mudava, muda todo potencial do benzeno e aí trazendo mais uma indicação que é justamente onde outras ligações futuras poderão entrar² [00:37:04].

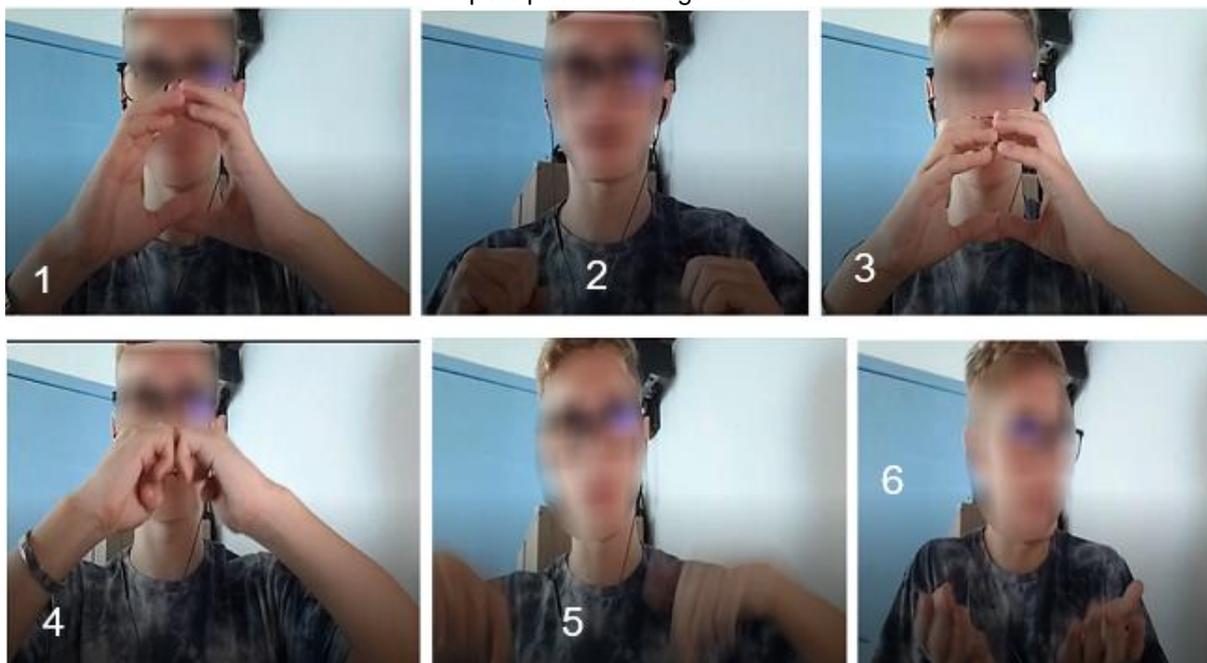
Eu comecei, já tinha escutado falar mas muito vagamente, mas procurei começar a entender mesmo a funcionalidade tudo, justamente quando fui começar a palpar começar a mexer no Arguslab, que aí ficou mais evidente o uso e começar a entender.³

No decorrer da entrevista o professor-pesquisador comenta em relação aos exercícios anteriores sobre a molécula da água, e questiona o estudante W em relação a representação a molécula da água, como tu imaginas a densidade eletrônica, como tu representarias. A resposta verbal com gesticulações por parte do aluno é a seguinte:

O oxigênio um pouco maior que os hidrogênios e os hidrogênios menores aqui embaixo... estão aqui justamente porque em cima do oxigênio existem elétrons livres que criam esse campo e que vai empurrar os hidrogênios para baixo fazendo essa forma e assim criando os polos, embaixo positivo e em cima negativo⁴ [00:39:12].

Porque justamente assim o oxigênio ele faz parte do polo negativo e o hidrogênio a parte o polo positivo. A minha visualização quanto mais próximo do polo positivo mais na ponta do polo positivo, mais positivo é o polo da molécula, e aí conforme ele vai subindo ele vai ficando menos positivo até chegar no meio que ele está mais ou menos neutro que é entre o verde e laranja, e o laranja começa a ficar negativo até o vermelho onde é a parte mais negativa da molécula⁵ [00:39:50].

Figura 31 - Sequência de gestos do aluno W, representando a molécula da água com a indicação do polo positivo e negativo.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 com as duas mãos na forma de bola, o estudante representa o átomo de oxigênio. Na imagem 2 com as duas mãos fechadas na forma de esferas a representação de dois átomos de hidrogênio. Já na imagem 3 com as mãos na forma de bola novamente a representação do átomo de oxigênio. Na imagem 4 com as duas mãos na forma de esfera, o aluno faz menção aos elétrons sobre o oxigênio. Na imagem 5 com as mãos direcionadas para baixo na forma de plano, o estudante representa o polo positivo e negativo da molécula. Concluindo na imagem 6 com as mãos espalmadas para cima a referência ao centro da molécula (meio) no mapa de potencial eletrostático o refere-se à neutralidade, citando entre as cores verde e laranja visualizadas no mapa de potencial eletrostático. [00:39:12].

Na imagem mental acima, podemos observar a presença dos seguintes *drivers* hiperculturais: forma de concha e esferas para representar átomos; forma de esfera para representar elétrons; forma de plano para representar polos e forma de mãos espalmadas para representar o centro da molécula. Em relação aos *drivers* hiperculturais concluímos a presença de visualização molecular no mapa de potencial, quando o estudante cita no centro da molécula, referindo-se à visualização entre as cores verde e laranja.

Após o aluno é questionado se na molécula do benzeno a distribuição de cores para as cargas positivas e negativas seria mais homogênea. O estudante através da linguagem verbal e gestual descreve a molécula:

O benzeno agente conseguiu ver nos exercícios propostos no Arguslab, que o benzeno tem essa fórmula, portanto como ela é polar ela tem uma cor mais parecida. Só que quando a gente coloca o radical em cima dos exercícios dá para perceber que ela cria um desativador ou ativador, ela cria como se fosse um triângulo que vai mudando e aí nisso ... se tu pedir para mim pintar, eu sei que ela vai mudar ela tem uma cor que vem de dentro para fora assim, mas eu não sei pintar do jeito que tu vai querer mas eu sei que quando a gente observa lá no Arguslab botando algum radical em cima tu consegue visualizar. E ali no meio cria um triângulo ou alguma outra forma dependendo de qual radical tu coloca em cima ele vai jogando a eletronegatividade para outro lado, sabe. E dessa forma assim o benzeno vai reagindo⁶ [00:33:44].

Os trechos de 1 a 6 são referentes a mediação hipercultural. Em 6 o aluno afirma que a molécula do benzeno é polar, e como ele não foi questionado sobre a sua resposta, não temos como saber se ele confundiu ou realmente é um erro conceitual.

Figura 32 - Sequência de gestos do aluno W, representando a molécula do benzeno



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 o estudante com as mãos em forma de plano (V virado) representa a parte superior da molécula do benzeno. Após com a palma da mão direita e esquerda estendida, representa os planos laterais da molécula. Na terceira imagem com a mão esquerda e direita em forma de plano representa a parte inferior da molécula. O estudante representa a molécula através de um losango [00:32:47].

Observamos que para esta imagem o aluno utilizou como *drivers* hiperculturais, planos para representar a molécula.

Em relação a molécula do benzeno o aluno faz os seguintes comentários: o estudante observa no Arguslab que no meio (centro da molécula do benzeno no

formato de triângulo ou dependendo do radical que é inserido) a eletronegatividade é jogada, ou seja, ocorre a alteração da mudança de coloração. Condição que é possível de visualização no mapa de potencial eletrostático.

Em relação a este item, o aluno relaciona a visualização da eletronegatividade da molécula com os radicais ativadores/desativadores proposto no estudo da Reação de SAE.

Concluimos que o estudante W obteve mais uma vez um ganho significativo em relação a visualização molecular, obtida através da mediação hipercultural, onde através do mapa de potencial eletrostático, conhecimento que o estudante não tinha antes, foi possível para o aluno visualizar a mudança da eletronegatividade pela alteração das cores com a inserção de diferentes radicais na molécula. Podemos considerar também um ganho na modelagem molecular, ou seja, nas diferentes representações através da inserção de distintos radicais na molécula.

De acordo com o contexto acima, foi preciso o aporte da mediação hipercultural para que o estudante pudesse obter ganhos na visualização, ou seja, como entender o potencial eletrostático para entender as reações, como a molécula vai se comportar. Desse modo, a habilidade visuoespacial foi modificada através da mediação com o *software*.

As considerações da aluna V quando questionada sobre o mapa de potencial eletrostático, são as seguintes:

Porque eu não fazia ideia porque eu fui ver isso mesmo agora nas aulas, pelo menos que eu me lembre não; daí a gente usou no Arguslab para montar o mapa de potencial, né? E daí foi dito que a interação das cargas positivas e densidade.¹ Então a primeira não sei qual é a minha linha de raciocínio, se foi chute ou que foi, porque eu não lembro de ter visto que tinha outro lugar a não ser nas aulas de modelagem.

A estudante é instigada a representar a molécula da água e esboçar o mapa de potencial eletrostático durante a entrevista pelo professor-pesquisador. A aluna V desenha o mapa de potencial eletrostático durante a entrevista, e comenta: “eu acredito que na parte do oxigênio seria uma cor mais forte, ele mais eletronegativo e na parte dos hidrogênios uma cor mais clara” [00:30:30].

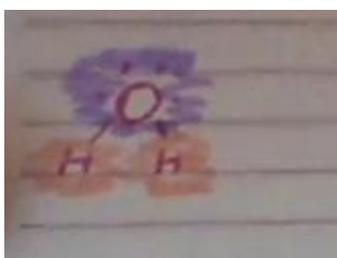
Em uma nova entrevista o estudante é questionado sobre a origem da representação:

P: Esse desenho do mapa de potencial eletrostático que você colocou, da água, quando você o fez, ele veio de onde? O que você estava imaginando?

V: Ajudou um pouco a parte didática com livros e aulas,² mas o Arguslab deixou mais fácil de interpretar parte do mapa de potencial. [...] Porque eu sou uma pessoa que aprende muito vendo, tanto que eu gosto de decorar bastante para chamar atenção e aquilo fixar na minha cabeça. Então o *software* de modelagem chamava aquela atenção, então eu aprendia através das cores. Ficou mais fácil para fixar o conteúdo em si.³ [00:04:00 até 00:06:00 Vídeo 2].

De acordo com a representação da estudante, a mesma utilizou *drivers* culturais para a representação de átomos e ligações químicas, ou seja, letras para átomos e palitos para as ligações. Outro *driver* cultural utilizado são quatro pontos acima do átomo de oxigênio para representar os dois pares de elétrons livres. Podemos evidenciar, segundo os relatos da aluna V, que o *software* de modelagem molecular chamava a sua atenção e ela aprendia através das cores. Desse modo, concluímos que a aluna V ao aprender através das cores adquiriu um ganho em relação à visualização molecular ao interagir com o *software* Arguslab, ou seja, um driver de visualização molecular.

Figura 33 - Representação do mapa de potencial eletrostático da molécula da água pela estudante V.

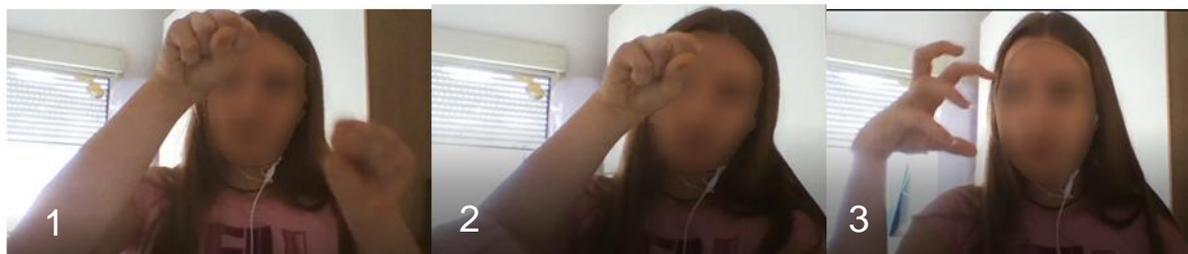


Fonte: A pesquisa.

Mais adiante, a aluna é instigada a representar a molécula da água com os respectivos ângulos, como se fosse representar para uma colega. A descrição verbal com gestos, é a seguinte:

Eu sei que é um oxigênio um hidrogênio e mais outro hidrogênio. O oxigênio é mais eletronegativo impulsionando, é uma repulsão, acontece uma repulsão porque o átomo de oxigênio é mais eletronegativo do que os outros dois hidrogênios.

Figura 34 - Sequência de gestos da aluna V, representando a molécula da água e a nuvem eletrônica.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem1 com as duas mãos em forma de esfera a representação do átomo de oxigênio e um de hidrogênio. Já na imagem 2 a estudante desloca a mão esquerda fechada na forma de esfera em direção à direita, representando o segundo átomo de hidrogênio. A estudante mantém a mão direita em forma de esfera, mantendo a representação do átomo de oxigênio. Na imagem 3 com a mão direita na parte superior e com os dedos afastados na forma de concha representa as forças repulsivas da nuvem eletrônica, os pares de elétrons mencionados [00:32:47].

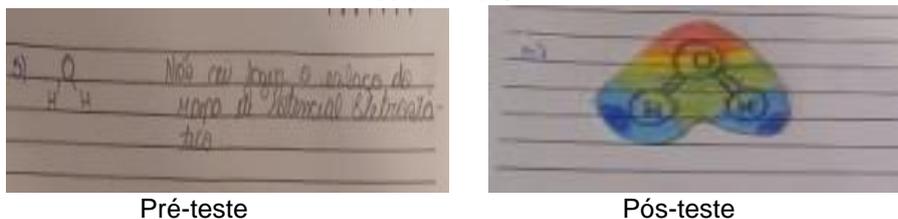
No que diz respeito a imagem mental acima, podemos observar que a estudante V utilizou os seguintes *drivers* hiperculturais: forma de esfera para a representação de átomos; forma de concha com os dedos afastados para representar pares de elétrons.

Em relação ao mapa de potencial eletrostático, quando a estudante comentou que aprendia através de cores, ficando assim mais fácil para fixar o conteúdo, podemos concluir que esse conhecimento a estudante não tinha antes da utilização do *software* de modelagem, ou seja, adquiriu esse conhecimento após passar pela modelagem molecular.

Em relação ao contexto acima, foi preciso o auxílio da mediação hipercultural para a estudante poder obter ganhos na visualização, ou seja, como entender os conteúdos em relação ao potencial eletrostático. Desse modo, a habilidade visuoespacial foi modificada através da mediação com o *software*.

As considerações do aluno GH quando questionado sobre mapa de potencial eletrostático, primeiro no pré-teste e após no pós-teste, foram as seguintes:

Figura 35 - Representação do mapa de potencial eletrostático da molécula da água pelo estudante GH.



Pré-teste

Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

Podemos observar uma diferença significativa nas representações do pré-teste e pós-teste. No pré-teste um desenho sem cores e no pós-teste com cores e com características do *software* Arguslab. De acordo com os comentários do aluno:

Essa questão aí, da distribuição, tridimensional, da molécula eu acho que eu criei uma noção nela do Arguslab, esses exercícios que a gente fez lá sobre o fenol, o clorobenzeno e nitrobenzeno. Eu acho que foi ali que eu peguei mais essa noção do que, que seria um mapa eletrostático.¹

Em uma segunda entrevista extra com o estudante GH, em relação a importância do *software* de modelagem molecular para confecção do mapa de potencial eletrostático da molécula da água, verificamos o seguinte:

GH: [...] O mapa me ajudou a imaginar como seria.

P: [...] No pré-teste você botou aqui: “*não sei fazer o esboço do mapa de potencial*”, e depois você desenhou o mapa. Você desenhou aquele mapa ali. Mas o que mais lhe ajudou a fazer esse mapa?

GH: Como eu falo ali no vídeo, o que facilitou essa compreensão dos mapas eletrostáticos foi a visualização no *software* Arguslab, em que eu conseguia ter uma noção. Porque eu acho que ali, na época, eu nem tinha visto muito sobre mapas eletrostáticos, e eu acredito ter sido ali com base no *software* e na explicação do senhor.²

P: [...] Porque tu fizeste a representação da molécula diferente?

GH: [...] Eu não sei. Ali, no caso, não é uma ligação dupla (ligação entre os átomos, semelhante ao *software* no pós-teste), mas eu acho que só por influência do *software* Arguslab. Porque eu lembro que ele era mais em 3D. então eu tentei representar uma molécula como se fosse mesmo.

P: Então, a influência da diferença da molécula do pré-teste para o pós-teste seria

GH: A utilização do Arguslab. [00:04:00 até 00:06:00 Vídeo 2].

Nos trechos 1 e 2 temos a comprovação da mediação hipercultural por parte do aluno em relação ao entendimento sobre o conhecimento mapa de potencial eletrostático.

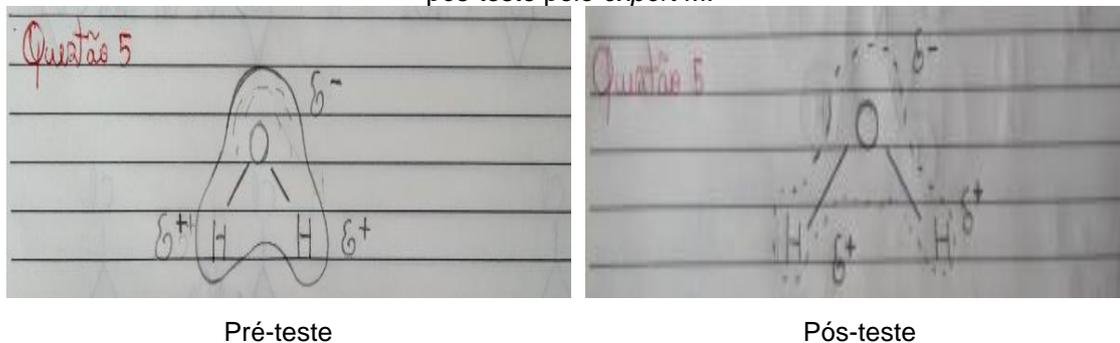
Concluimos que o estudante GH obteve um ganho significativo em relação à visualização molecular, obtida através da mediação hipercultural, onde através do

mapa de potencial eletrostático, conhecimento que o estudante não tinha antes, foi possível para o aluno visualizar a diferença de eletronegatividade. Podemos considerar também um ganho em relação à modelagem molecular na construção da molécula, ou seja, o aluno utilizou letras em bolas para representar átomos e palitos para representar as ligações químicas. Desse modo, o estudante utilizou *drivers* hiperculturais semelhantes ao *software* no pós-teste. Já no pré-teste o aluno utilizou letras para representar átomos e palitos para representar as ligações químicas, típicos *drivers* culturais.

Podemos observar, em relação ao contexto acima, que foi preciso o auxílio da mediação hipercultural para o estudante poder obter ganhos na visualização, ou seja, como entender os conteúdos sobre o mapa de potencial eletrostático. Assim sendo, concluímos que a habilidade visuoespacial foi modificada através da mediação com o *software* Arguslab.

De acordo com o expert, as representações no pré-teste e no pós-teste foram as seguintes:

Figura 36 - Representação do mapa de potencial eletrostático da molécula da água no pré-teste e no pós-teste pelo expert M.



Fonte: A pesquisa.

Observando os detalhes das representações percebemos desenhos semelhantes e sem a presença de cores.

O *expert M* utilizou típicos *drivers* culturais para representar as estruturas. Para representar átomos e ligações tanto no pré-teste e no pós-teste, ele usou letras para átomos e palitos para ligações químicas. Além, de traços para carga negativa e sinal de mais para as cargas positivas.

No transcorrer da entrevista o *expert* fez as considerações: “O mapa de potencial eletrostático serve para a gente ver a distribuição dos elétrons na molécula.

A partir disso a gente pode descobrir dados como polaridade, tendências de reações e outros dados.”

O aluno é questionado pelo professor-pesquisador em relação à coloração, se o mapa tinha cores?

Tinha cores, ele tinha coloração que eu acho padrão. Onde o vermelho representa a maior concentração de elétrons e o azul, cores mais azuladas representa a quase ausência de elétrons nessa região. No Arguslab tinha uma coloração um pouquinho diferente, mas não era difícil de interpretar. Tinha a legenda das cores ao lado da tela e as tendências eram iguais ao que eu já tinha em mente. O potencial eletrostático seria mais vermelhinho quanto maior a concentração de elétrons e quanto maior a concentração de elétrons maior, mais volumosa é essa região do espaço, e a ausência de elétrons seria uma cor branca como no Arguslab e menorzinho, menos volumosa.

Para construir o Mapa de Potencial Eletrostático eu atribuiria cores (o expert questionou se poderia ter utilizado cores no pré-teste e pós-teste?), ahh... eu podia ter usado. Eu coloriria de cor vermelha a região próxima do oxigênio que é maior, mais volumosa e à medida que vou me aproximando do hidrogênio eu iria utilizar cores mais frias partindo do amarelo, verde, azul e azul bem forte representando ali uma região próxima do hidrogênio que é bem menor que a região próxima ao redor do oxigênio que representaria uma menor concentração de elétrons. Com isso nós conseguimos descobrir a polaridade da molécula, ver visivelmente a formação dos polos, formação de cargas parciais negativas próximas ao oxigênio e positiva próximo aos hidrogênios [00:30:15].

No decorrer da entrevista, o aluno é questionado pelo professor-pesquisador sobre o mapa de potencial eletrostático do benzeno, como seria esse mapa, e a resposta verbal do expert:

Em relação ao mapa de potencial eletrostático do benzeno seria uniforme pela molécula inteira, com concentração nos átomos de carbono ao redor do anel. As extremidades onde estão os hidrogênios tem pouca concentração de elétrons. É um mapa bem pequenininho, enquanto que nos carbonos é maior. E é um pouquinho maior que o normal acredito quando comparado com um cicloalcano de mesmo número de carbonos por causa da ressonância das ligações duplas (π) dentro do anel. Já que elas estão em constante deslocamento e isso facilita a concentração de elétrons nos carbonos. Então eu imagino que o mapa de potencial eletrostático no benzeno assim como em outras moléculas aromática se concentra nos átomos do anel quando não existe a presença de átomos eletronegativos e ela é um pouquinho maior, pouquinho mais volumosa do que um cicloalcano por conta do deslocamento das ligações π .

Em relação aos conhecimentos sobre mapa de potencial eletrostático podemos concluir que não há diferenças significativas entre o pré-teste e o pós-teste. Apesar de representá-los em preto e branco nos testes, o aluno já tinha a ideia da

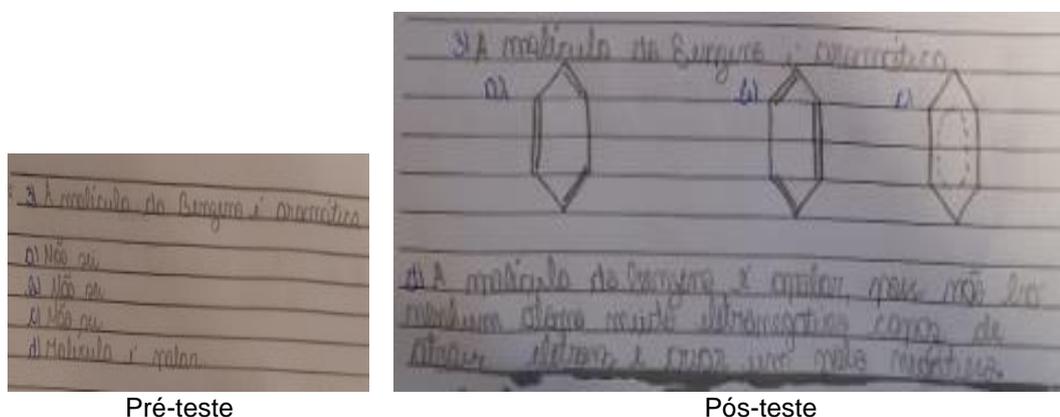
representação em cores e a respectiva interpretação. Como o *expert* declarou: todas essas informações eu já havia adquirido da literatura.

8.5 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA AROMATICIDADE

8.5.1 Análise na Subcategoria Ressonância

De acordo com o estudante GH, as representações no pré-teste e no pós-teste foram as seguintes:

Figura 37 - Representação da molécula do benzeno no pré-teste e no pós-teste pelo aluno GH.



Pré-teste

Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

Analisando as representações, podemos observar uma diferença significativa nas respostas. No pré-teste o aluno deixou em branco, e no pós-teste-teste observamos uma evolução na resposta.

Em uma nova entrevista o aluno é questionado em relação às representações acima.

P: No pré-teste, tu não respondeste, não sabia a resposta. Já no pós-teste, tu já fizeste uma grande modificação. Por que dessa melhora na representação do pós-teste?

GH: Eu acredito dos documentos que tenhas nos fornecido.

P: Bom, o que eu forneci foi o livro da Marta Reis.

GH: É esse aí.

P: Então, nós fizemos o pré-teste, iniciamos a modelagem molecular e durante a interação com a modelagem molecular tu chegaste a essa resposta?

GH: Isso, com as explicações e com a visualização no livro.

P: Concluindo, então inicialmente tu não tinhas conhecimento e depois tu vais para o livro? Salientamos quando o aluno fala no livro, devemos considerar antes da modelagem molecular.

GH: É isso. [...] Com as explicações e com a visualização do livro.
[00:03:00 até 00:04:00 Vídeo 3].

O aluno GH também foi questionado sobre aromaticidade, ele comenta o seguinte: “segundo a Lei de Huckel, seguindo aquela fórmula de $4n + 2$, todos os que dão números inteiros são aromáticos e os que dão números não inteiros, não são aromáticos”.

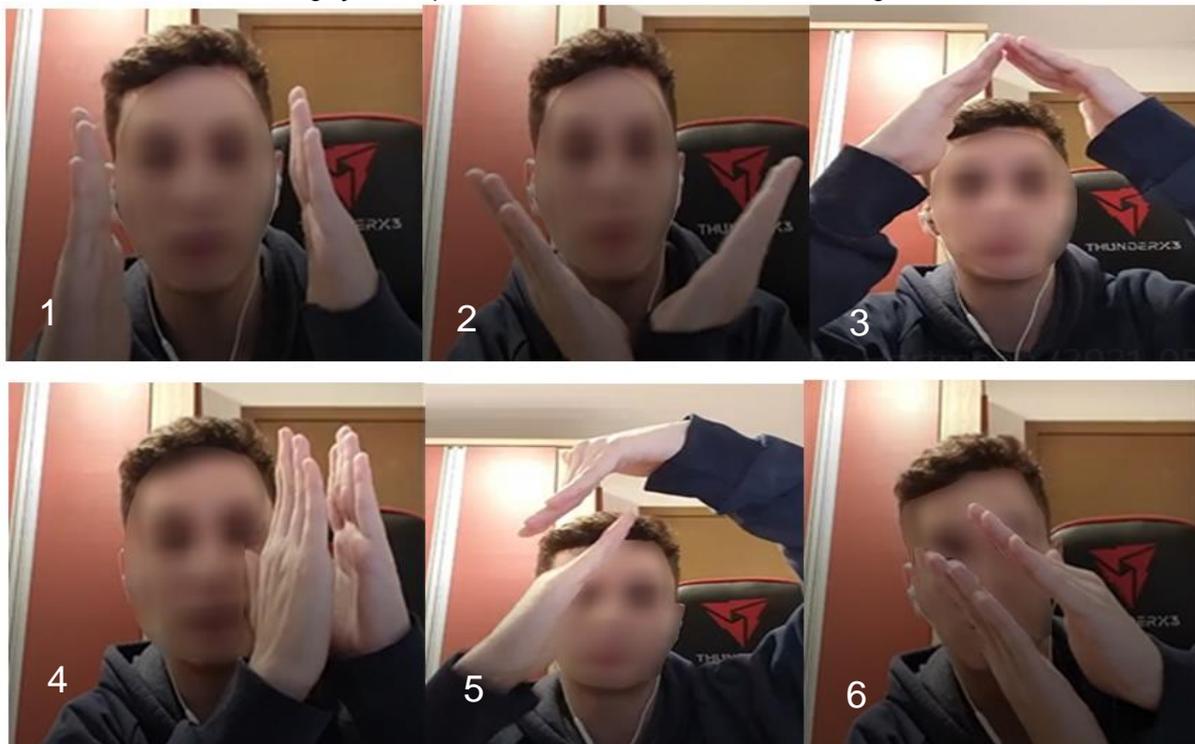
Verificamos que o aluno GH foi um dos poucos alunos que lembrou a Regra de Huckel, onde o aluno expressa corretamente a interpretação da mesma, esquecendo de mencionar na fórmula matemática os elétrons pi.

Podemos observar a presença de *drivers* culturais nas representações tanto no pré-teste como no pós-teste. O estudante representa as ligações simples com um traço e as ligações duplas com dois traços (palitos) no anel. O estudante representa a deslocalização das ligações pi em formato de círculo tracejado. Para átomos utilizou o ponto, representação cultural clássica.

No transcorrer da entrevista, o professor-pesquisador questiona o aluno GH sobre a molécula do benzeno. Como tu representarias a modelagem da molécula do benzeno? Abaixo a resposta de acordo com a linguagem verbal e gestual do estudante GH:

É um losango com dois lados a menos, né, formando uma linha reta. E duas embaixo aqui e duas em cima, eu tentaria mostrar assim com a mão pra ele. As ligações, no caso tem uma aqui, nessa parece aqui do, do anel, uma aqui nessa parte de cima aqui e a outra aqui embaixo. Tá. Eu pediria pra ele imaginar os dois ângulos sem dois dos lados. O losango, só que sem dois lados, com duas paredes assim, duas aqui, formando o benzeno e pediria pra ele botar as ligações conjugadas, que são uma ligação aqui, uma aqui e uma aqui [00:34:08].

Figura 38 - Sequência de gestos do aluno GH, representando parte da molécula do benzeno com as ligações duplas e citando o formato de um losango.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 o aluno representa os átomos e as ligações laterais com as duas mãos esticadas e paralelas. Na segunda imagem, com as mãos esticadas e paralela, representa os átomos, as ligações e o ângulo da parte inferior da molécula na forma de “V”. Na imagem 3 com as mãos novamente esticadas e paralelas, representa os átomos, as ligações e o ângulo parte superior da molécula na forma de “V” virado. Na quarta, quinta e sexta imagem o aluno representa os átomos e as ligações químicas (ligações duplas) com as mãos esticadas e paralelas ilustrando a posição das ligações na molécula. [00:34:08].

Podemos observar que o estudante utiliza *drivers* culturais para a representação das ligações químicas, ou seja, mãos esticadas e paralelas.

Em uma nova entrevista o aluno GH foi questionado sobre os gestos produzidos acima:

- P: [...] Tu disseste que querias representar um losango?
 GH: É um losango com dois lados a menos, formando uma linha reta, duas embaixo e duas em cima.
 P: E as ligações?
 GH: As ligações, no caso, têm uma aqui, dessa parede aqui do anel; uma aqui, nessa parte de cima; e a outra aqui embaixo.
 P: [...] Em relação às gesticulações, quando tu fizeste, você lembrou o quê? De onde saiu?

GH: Se eu não me engano, foi dos polígrafos que você nos encaminhou. Ou foi das atividades que a gente fez no Arguslab mesmo.

P: Então, é importante: foram os livros, o polígrafo ou o *software*?

GH: Livros e polígrafo. [00:01:37 até 00:04:00 Vídeo 2].

Desse modo, acreditamos que imagem mental acima tenha sido construída culturalmente. Podemos concluir que o estudante apresenta a forte presença da mediação cultural nas suas respostas. Em nenhum momento o aluno se referiu ao *software* de modelagem molecular, somente a literatura e eventualmente ao professor. Desse modo, observamos não haver evidências da aquisição de *drivers* hiperculturais.

De acordo com o expert M, ele teceu os seguintes comentários quando questionado sobre aromaticidade, ele comenta o seguinte:

No pré-teste e pós-teste eu fiz uma coisa muito semelhante. A molécula do benzeno é uma molécula orgânica de seis carbonos que formam ligações entre si, alternadas. No caso da representação, ligação conjugada, eu já sabia o que era não precisei pesquisar. Pelo que eu aprendi na literatura, ligações conjugadas são ligações alternadas, ligação simples ligação dupla, ligação simples ligação dupla. Isso eu já tinha aprendido, então na molécula do benzeno isso não foi difícil fazer. Era desenhar um hexágono colocar uma ligação dupla ali, aí pula uma ligação simples, aí outra ligação dupla, aí pula uma ligação simples e outra ligação dupla [00:20 01].

No caso do benzeno como ele realiza ressonância, essas ligações duplas não são fixas, elas não estão nessa posição o tempo todo, elas ficam alternando. Então por conta disso, existem duas formas possíveis de se formar essas ligações conjugadas, de dispor essas ligações conjugadas na molécula. Então uma agente coloca as ligações na direita e numa outra forma a gente coloca as ligações na esquerda. Tanto que no pós-teste eu coloquei uma flechinha entre as duas formas indicando que elas estão alternando, uma estrutura híbrida de ressonância. O aluno mencionou que na resposta C a ligação tracejada seria uma representação da aromaticidade do benzeno, da alternância de estruturas, que é algo fácil de representar [00:21:01]

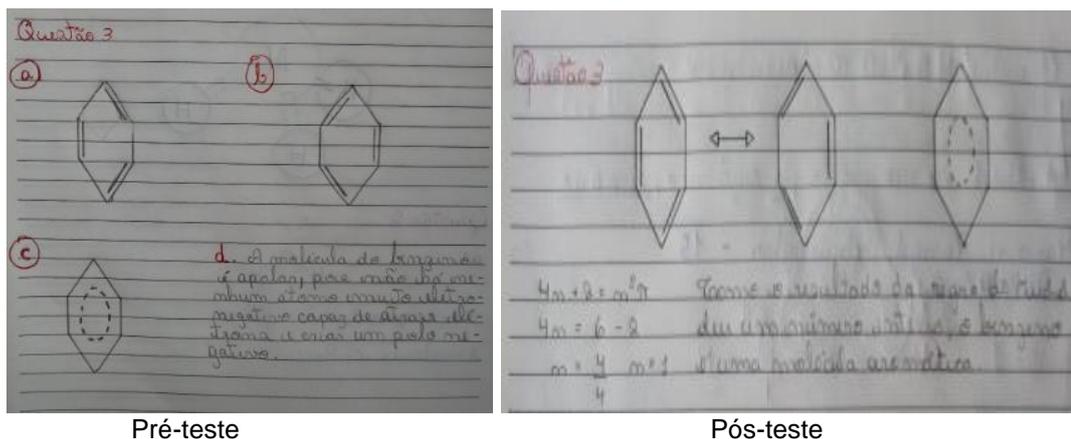
No decorrer da entrevista o aluno foi questionado quanto a polaridade, se a molécula do benzeno é apolar ou apolar, a resposta foi a seguinte:

Um dos critérios para polaridade é a existência, presença de átomos muito eletronegativos presentes na molécula. Entretanto como o benzeno apresenta uma estrutura como um hexágono perfeito, os meus hexágonos são hexágonos mais encurtados, mais fininhos, mas na realidade são hexágonos bem certinhos, formados somente por carbono e hidrogênio. São átomos que apresentam uma eletronegatividade muito parecida e também por conta da geometria da molécula, da forma de hexágono da molécula, as forças a eletronegatividade do carbono não consegue atrair nem empurrar elétrons pela molécula afim de formar polos. Então não ocorre a formação de polos positivos e negativos na molécula de benzeno porque o carbono não é um átomo eletronegativo, que não tem uma diferença de

eletronegatividade com o hidrogênio, e que por conta da geometria não existe a possibilidade de formar polos [00:23:19].

Após é questionado sobre a Regra de Huckel: “A fórmula de Huckel que o professor passou. A fórmula a lei de Huckel. O resultado deu n igual a 1. Por conta de gerar um número inteiro a molécula é aromática.”

Figura 39 - Representação da molécula do benzeno no pré-teste e no pós-teste pelo *expert M*.



Fonte: A pesquisa.

Em relação à categoria Aromaticidade, concluímos que o *expert* apresenta apenas a mediação cultural estudando através de livros, de acordo com a sua citação: “eu pesquisei na literatura”.

Podemos observar a presença de *drivers* culturais nas representações tanto no pré-teste como no pós-teste. O estudante representa as ligações simples com um traço e as ligações duplas com dois traços (palitos) no anel. Representa a deslocalização das ligações pi em formato de círculo tracejado. Para átomos usou o ponto, representação cultural clássica.

8.6 ANÁLISE DE RESULTADOS NA CATEGORIA REAÇÃO QUÍMICA

8.6.1 Análise na Subcategoria Eletrófilo

Na categoria Eletrófilo o aluno W, quando questionado sobre o que é um eletrófilo, faz as seguintes considerações:

Eu imaginei que era algo, na verdade entender bem o que são eletrófilos eu ainda não entendo, eu tenho uma noçãozinha. E aí na letra d quando eu coloquei eu imaginei eletrófilo... deve ter haver com eletronegatividade, como, cloro, hidroxila são bem eletronegativos então eletrófilos tem nome similar e eu vou marcar a letra d. Só que no pós-teste, eu pensei se eles são eletrófilos, então, talvez eles sejam aqueles lá que sejam o oposto disso. Então, eu só marquei a letra c eu não sei qual é que são, mas provavelmente vai ser algum, algumas que vai ter átomos ou moléculas que são o contrário disso. Pode ler para mim a letra c? [00:42:00].

No decorrer da entrevista, o professor-pesquisador questiona o aluno sobre o que caracteriza um eletrófilo. O aluno W comenta: “o fato de eles terem carga positiva”.

Após o professor-pesquisador pergunta se tu fosses desenhar, representar a molécula do NO_2 no papel, como tu representarias? A resposta do aluno é a seguinte:

“Ele tem cinco (consulta na tabela periódica), o nitrogênio tem cinco e vai se ligar com dois oxigênios, então faltará um elétron logo ele tem carga positiva. É isso?”

Figura 40 - Representação da molécula do eletrófilo NO_2^+ pelo aluno W.



Fonte: A pesquisa.

A imagem acima ilustra a representação da molécula do grupo (nitro) NO_2 . A estrutura da molécula, desenhada pelo aluno, com dois pares de elétrons sobre o átomo de nitrogênio. O aluno representa as ligações com o oxigênio e pinta de azul a parte do átomo de nitrogênio e de vermelho a parte dos átomos de oxigênio.

O estudante utilizou os seguintes *drivers* culturais para a representação da molécula: letras para a representação de átomos e palitos para representar as ligações químicas. Além dos pontos para representar os de elétrons livres sobre o átomo de nitrogênio. Em relação às cores, consideramos como *drivers* hiperculturais, oriundas do *software*.

Em outra entrevista o estudante é questionado de onde surgiram essas imagens, o que tu imaginavas?

W: Isso seria do *software*, da questão da polaridade, aí já traz a questão de onde é que é mais negativo, de onde é que é mais positivo e também ali no meio da ligação que é meio que não é nem um nem outro; ele vai ser uma zona neutra, no sentido de que é gradual. Vamos supor que aqui é oito, aqui é oitenta. Não vai ter um ponto que vai ser oito e logo depois oitenta.¹

W: Vai ter um meio termo também. Aí por isso usando as cores a gente consegue ter uma noção melhor ali da questão da polaridade, mas também vem do *software*, que ele apresenta assim, a gente consegue ativar a opção lá para aparecer as moléculas e ter essa coloração.²

P: Então, vem do *software* que te ajudou nessa visualização?

W: Ajuda. Ajuda até a compreensão porque ante ali dá para ver que eu tinha uma compreensão muito preto no branco, aqui é positivo aqui é negativo, mas depois fica mais claro que é assim, positivo e negativo, mas tem também uma gradualidade, não sei se vai ser oito ou oitenta.³ [00:19:00 até 00:20:00 Vídeo 2].

Em relação ao aluno W, podemos observar que após a interação com o *software* de modelagem molecular, o aluno tinha a percepção do mapa de potencial eletrostático da molécula em preto e branco (monocromático). Após passa a representá-lo com cores. Analisando os trechos 1, 2 3 percebemos claramente a mediação hipercultural através do *software*. Desse modo, o aluno W passa a ter um ganho significativo em relação à visualização molecular, ou seja, ao mapa de potencial eletrostático da molécula do eletrófilo. O estudante consegue definir através da visualização as diferentes regiões com carga positiva e negativa. Concluindo, o aluno passa há adquirir um *driver* hipercultural de visualização molecular e modelagem molecular.

Em relação ao contexto acima, foi preciso o auxílio da mediação hipercultural para o estudante poder obter ganhos na visualização e na modelagem molecular, ou seja, representa a molécula do eletrófilo e o seu respectivo mapa de potencial eletrostático. Desse modo, concluímos que a habilidade visuoespacial foi modificada através da mediação com o *software* Arguslab.

De acordo com o *expert*, ele teceu os seguintes comentários quando questionado sobre Reação Química, na Subcategoria Eletrófilo, ele comenta o seguinte:

A reação ocorre quando uma espécie tem normalmente carga positiva ou parcialmente positiva. Um eletrófilo é uma espécie deficiente de elétrons, ou seja, um ácido de Lewis. Então eu logo pensei que todas as espécies teriam carga positiva (seriam cátions). Todos os eletrófilos são espécies com carga momentânea positiva. Então eu tentei procurar todas as alternativas que teriam carga positiva. Então eu marquei a alternativa que continha as quatro espécies com carga positiva [00:37:17].

[...] na primeira vez foi em uma apostila de reações orgânicas no curso de Química. Eu precisei ler toda apostila para realizar a Olimpíada de Química. Caiu muitas questões de oxidação orgânica. Tinha substituição nucleofílica em aldeídos e cetonas. Reações de substituição eletrofílica aromática vi pela primeira vez na apostila. E posteriormente eu li no meu livro de Química Orgânica, e lá eu entendi mais aprofundadamente como um substituinte *orto*, *meta* e *para* dirigente ativador ou desativador interage no anel benzênico, desloca a concentração de elétrons em determinadas posições *orto*, *para* e *meta* que favorece o ataque eletrofílico. Eu entendi como ocorre o ataque eletrofílico, por exemplo uma molécula de boro, gás Boro; na verdade Bromo, Br₂. A molécula é geralmente neutra com uma ligação covalente entre os dois átomos de bromo e que na presença do anel aromático ocorre uma cisão heterolítica da ligação covalente, e a espécie positiva vai se ligar, vai formar um complexo ativado com o benzeno compartilhando uma ligação com o carbono juntamente com o outro hidrogênio, e depois da estabilização uma ligação do hidrogênio é cortada, o hidrogênio sofre uma cisão heterolítica e ganha uma carga positiva. O hidrogênio livre vai formar uma ligação com o boro, anteriormente livre no meio, e vai formar ácido bromídrico, e o Boro que se ligou com o benzeno vai formar ali, dependendo do substituinte presente no benzeno vai ligar no benzeno [00:40:05].

Concluindo em relação ao *expert M*, observamos apenas a mediação cultural. Como o *expert* afirma na sua apresentação: todas as informações eu adquiri através da literatura.

8.6.2 Análise na Subcategoria Reação em Anel Aromático

Na categoria Reação em Anel Aromático o aluno W expõe as seguintes considerações:

[...] então, essa é a parte primeiro ele perguntou a quem vai ser *meta* e depois o *para*. *Meta* e depois *orto* e *para*. E não, essa é a parte do conteúdo que eu mais fiquei em dúvida em relação ao que que faz um grupo ser ativador e um grupo ser desativador. [00:49:02]

[...] então, acabei entendendo ali que de alguma forma talvez a negatividade tivesse alguma ligação com ativar para ligar um eletrófilo.¹ Então eu coloquei na ordem b e a no pós-teste com essa ideia. No pré-teste eu tinha posto a e b, então eu inverti. Como eu te falei essa é área desse conteúdo que eu ainda tenho mais ... uma visão muito suscinta e por isso acho talvez não esteja tão conclusiva a minha resposta.¹ [00:49:38]

Agente comentou quando a gente estava falando dos anéis aromáticos em orgânica, né! Mas foi muito ... ao menos para mim de maneira muito por cima e eu não havia captado essa ideia e agora eu consigo entender.²

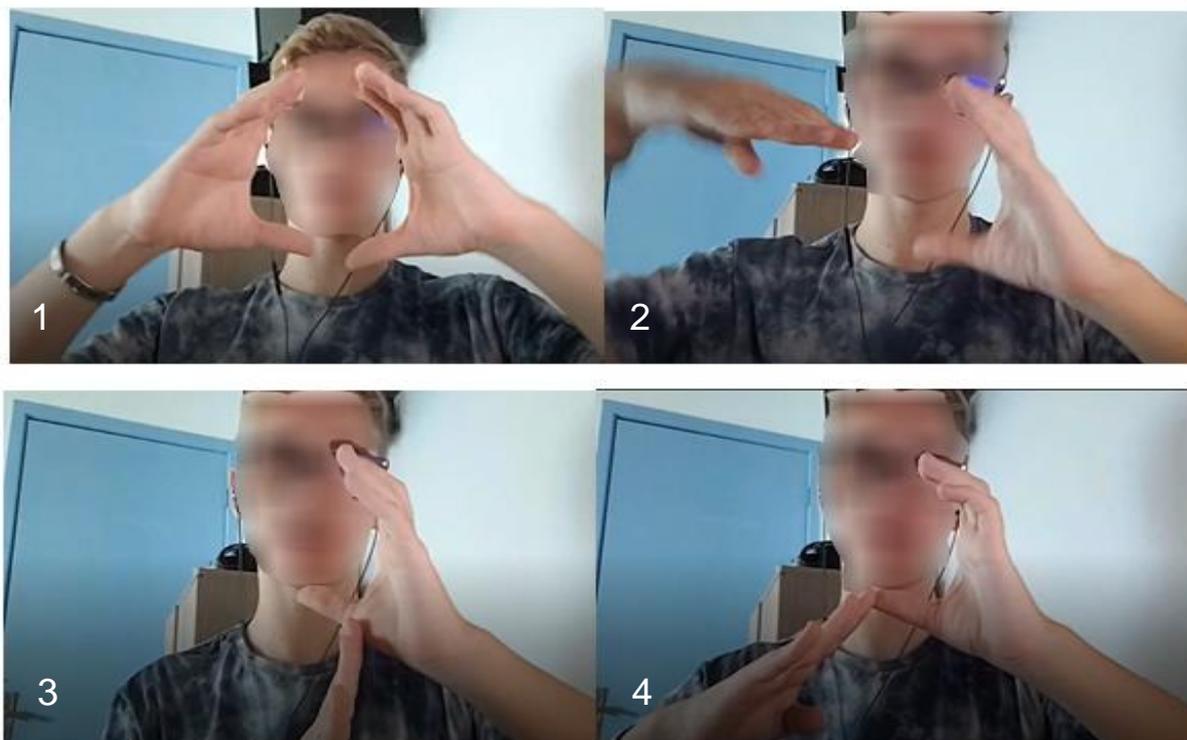
Ativar é quando tu vais orientar *orto* e *para*, e desativar é: aqui está o benzeno, tu vai trazer o eletrófilo para *orto* e *para* e quando tu vai desativar, tu vai trazer para *meta*. O que tem com que vai empurrar as ligações, de novo aquela ideia da eletronegatividade.³ [00:51:31]

O professor-pesquisador questiona o aluno W em relação ao termo orientador, grupo ativador, grupo desativador se o já tinha visto tais conceitos em algum momento, e onde?

O estudante W comenta e gesticula em relação a entrada do eletrófilo no anel aromático:

Nós a gente quando estava falando dos anéis aromáticos em orgânica, né! Mas foi muito... ao menos para mim de maneira muito por cima e eu não havia captado essa ideia e agora eu consigo entender. Ativar é quando tu vai orientar para *orto* e *para*, e desativar é: aqui está o benzeno, tu vai trazer o eletrófilo para *orto* e *para* e quando tu vai desativar, tu vai trazer para *meta*. Vai empurrar as ligações de novo aquela ideia de eletronegatividade.⁴ [00:51:31].

Figura 41 - Sequência de gestos do aluno W, representando a entrada do eletrófilo no anel aromático com a indicação das posições *orto*, *meta* e *para*.



Fonte: A pesquisa.

Na imagem 1 com as mãos na forma de bola, o aluno representa o anel aromático (molécula do benzeno). Na imagem 2 a indicação de entrada do eletrófilo na posição *orto* com a mão direita na forma de plano e a mão esquerda na forma de concha representando a molécula do benzeno. Na imagem 3 a indicação de entrada do eletrófilo na posição *para* com a mão direita na forma de plano e a mão esquerda na forma de concha representando a molécula do benzeno. Já na imagem 4 a orientação do eletrófilo na posição *meta* com a mão direita na forma de plano e novamente a mão esquerda na forma de concha representando a molécula do benzeno [00:50:16].

Em termos de representação cultural e hipercultural, a única forma de realizar a categorização é através da entrevista, em que o aluno verbaliza se resolveu a questão com base no seu conhecimento adquirido nas aulas e/ou livros, ou no conhecimento adquirido com o manuseio do *software*.

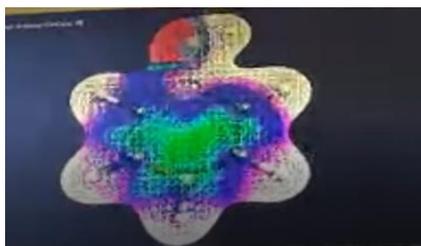
No transcorrer da entrevista o professor-pesquisador comentar sobre as reações de Substituição Aromática Eletrofílica entre o eletrófilo NO_2^+ com o fenol, nitrobenzeno e clorobenzeno. A resposta foi a seguinte:

Essa aqui eu acho.... justamente eu vou falar o meu palpite que eu errei no NO_2 bem ... eu acho que a eletronegatividade dele vai fazer com que oriente para *meta*. Mas no momento do pós-teste eu tive a sensação que ligaria para *orto* e *para*. Então nesse sentido eu acho que devo ter errado, mas eu reagi como se fosse ativante, mas na verdade o nitrobenzeno é desativante. Certo?

No *meta*, eu me dei conta disso depois que... porque justamente como eu te falei é a parte que eu ainda tenho algumas dúvidas que é na questão do que ativa e o que desativa. Porque eu tento pensar no que vai ser lá dentro onde a eletronegatividade empurra. Isso fica meio confuso, mas agente conversando mais eu consigo entender que a ... por ele ser um eletrófilo ele automaticamente vai fazer com que o eletrófilo. é, isso eu tentei até pesquisar enquanto a gente estava fazendo as coisas no Arguslab, mas justamente essa ideia de que o... a eletronegatividade vai empurrando onde o eletrófilo entra, eu consegui visualizar no Arguslab, mas entender como isso funciona ainda é difícil para mim.⁵ [01:04:07].

O aluno W é questionado sobre o mapa de potencial eletrostático do fenol, se o aluno lembra das características do mapa. O objetivo da pergunta era que o estudante fizesse uma correlação com a densidade eletrônica O estudante apresenta o mapa de potencial desenvolvido nas unidades didáticas na tela.

Figura 42 - Representação do mapa de potencial eletrostático do fenol pelo aluno W.



Fonte: A pesquisa.

[...] aqui tu consegue ver a luz (no meio da molécula no anel) digamos assim, a parte mais clara ela aparece mais aqui fazendo esse triângulo mostrando que ela é mais ... *orto*. O *meta* não está com essa cor clara (aluno aproxima o mapa com zoom). Então eu consigo concluir que a hidroxila acima no fenol orienta por esse potencial eletrostático ele me mostra que aqui no *meta* não tem a cor que vai fazer com que ele a ligação vai entrar aqui. Então eu consigo concluir que o fenol não é desativante ele ativador, né? Então eu vejo *orto* e *para* ⁶ [01:10:53].

[...] quando a gente estava fazendo os exercícios eu conseguia ... se a molécula era ativante ou desativante justamente visualizando pelo Arguslab. Mas sem a ferramenta do Arguslab para abrir e dar zoom ali e em função da ligação não consigo dizer exatamente é ativante ou desativante. Justamente porque essa percepção que tem ali no Arguslab eu não consigo ter no papel ⁷ [01:11:32].

A imagem acima ilustra a representação da molécula do fenol e o seu respectivo mapa de potencial eletrostático. O aluno descreve o interior da molécula indicando que na posição *meta*, de acordo com a legenda, o verde representa maior carga negativa, e a posição *meta* está com o azul, que representa uma carga positiva maior do que negativa. O aluno também analisa as posições *orto* e *para* onde há a predominância da cor verde nos respectivos carbonos. Assim, o estudante W conclui que o fenol, o grupo OH⁻ (hidroxila), é um orientador *orto* e *para* dirigente. [01:09:48].

Em outra entrevista o aluno W é questionado em relação aos gestos produzidos na imagem mental acima:

P: W quando tu fizeste aqueles gestos, mas de onde, como surgem aqueles gestos. O que tu lembraste no momento para fazer isso?

W: Primeiro eu quis representar um hexágono, o benzeno. [...] Depois eu estava gesticulando ali mostrando dentro do hexágono do benzeno, como fica a questão do campo eletrostático. [...] Como ele fica com cada radical, aí muda a forma das cores ali, a sequência de cores que tem no centro da molécula do benzeno, para a gente conseguir ver se é um ativador ou desativador.

W: Imagina ali o anel benzênico, o hexágono, dentro do hexágono ali, tipo por fora, é uma molécula apolar, ela fica mais esbranquiçada, e por dentro ela vai ganhando cor. Ela (a molécula) fica baseada (sentido de fundamentada) se for ativador ou desativador, vai se orientando para tu ter a

noção de onde é que vai se conectar uma ramificação, se é na posição *orto*, *para* ou *meta* baseado no radical.

P: Na verdade tu estás descrevendo o mapa de potencial eletrostático do benzeno?

W: É, aquele mapa coloridinho aí que fica para a gente ter essa orientação, de se o radical que tu colocaste é um ativador ou desativador que consegue se orientar por esse mapa.

P: Então, esse mapa, te ajudou bastante?

W: Sim. Até porque, assim, se não for fazer assim, tem que decorar mesmo né. Ainda não entendi outra forma sem decorar ou consultar no *software*.

P: Então, (isso tudo), a modelagem te ajudou foi bastante útil?

W: É, essa eu acho que tenha sido bastante coisa do *software* foi bastante útil. Mas essa, acho que foi a coisa que foi mais necessária, assim, para tu explicar, sem o *software* fica bem mais puxado. Para se ter essa concepção de um radical vai mudar o comportamento da molécula com uma ramificação, sabe. Assim, eu acho que com o *software*, talvez das aplicações que a gente tem usado, todas foram boas, não é? Mas essa eu acho que seja a que o *software* seja mais fundamental para conseguir entender o conteúdo. Ele é relevante mesmo.⁸ [00:24:37 até 00:28:32 Vídeo 3].

De acordo com os trechos acima, em 1 o aluno comenta que talvez a negatividade (se referia provavelmente a eletronegatividade) tivesse alguma ligação com o eletrófilo. Em 2 o estudante W comenta que quando ele estava falando dos anéis aromáticos em Química Orgânica ele entendeu muito superficialmente (aqui os *drivers* culturais não foram suficientes). Já em 3 e 4 o aluno coloca novamente a ideia de eletronegatividade, segundo ele, “*que vai empurrando as ligações*”. Em 5 o aluno cita que tentou pesquisar enquanto estava fazendo os exercícios no Arguslab, mas somente conseguiu visualizar através do *software*. Em 6 o aluno consegue concluir que o fenol não é desativador, ele é ativador, devido a hidroxila acima na molécula do fenol orienta por esse potencial eletrostático:

Ele entra aqui na posição meta, e não tem a cor que vai fazer com que ele a ligação vai entrar aqui.” Já em 7 o aluno comenta: “sem a ferramenta do Arguslab para abrir e dar zoom ali, eu não consigo dizer exatamente se é ativante ou desativante, justamente porque essa percepção que tem ali no Arguslab, eu não consigo ter no papel”. Por fim, em 8 a confirmação do estudante onde cita que o *software* foi fundamental, relevante para entender esse conteúdo.

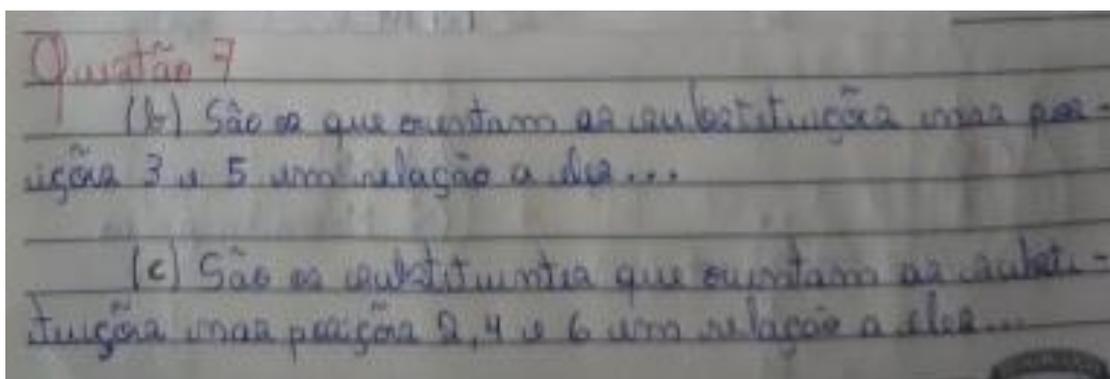
Percebemos no contexto que o estudante W adquiriu um ganho significativo em relação à competência representacional. Isso o estudante não tinha antes da modelagem molecular. A melhora na capacidade de visualização molecular e modelagem molecular foi adquirida com a modelagem através do *software* Arguslab.

Concluindo, o aluno W adquiriu *drivers* hiperculturais de visualização molecular e modelagem molecular.

Em relação ao contexto acima, foi preciso o novamente o aporte da mediação hipercultural para o estudante poder obter ganhos na visualização e na modelagem molecular através do mapa de potencial eletrostático em relação à orientação do eletrófilo na Reação de Substituição Aromática Eletrofílica. Concluímos que os *drivers* culturais não foram suficientes. Desse modo, observamos que a habilidade visuoespacial do estudante W foi modificada através da mediação com o *software* Arguslab.

De acordo com o *expert M*, quando questionado sobre Reação Química, na subcategoria Reação em Anel Aromático, na questão relacione as colunas para grupo ativador (orientador *orto* e *para*) e grupo desativador (orientador *meta*), o aluno comenta o seguinte:

Figura 43 - Resposta da questão sete no pós-teste pelo *expert M*.



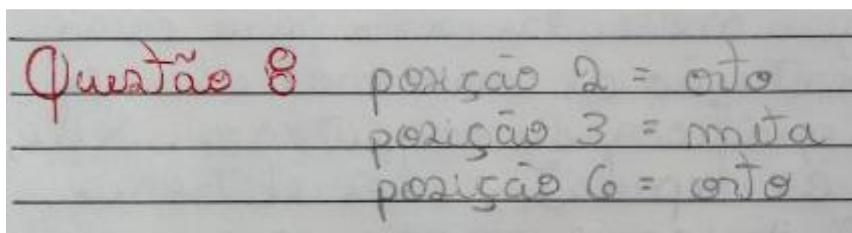
Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

O substituinte ativador vai orientar para as posições *orto* e *para* por conta da ressonância, das formas alternativas, da disposição das ligações eletrônicas que vão formar um polo mais negativo nas posições *orto* e *para*. Numa molécula de benzeno como ele é tridimensional existem três posições possíveis: duas *orto*, uma em cada lado da molécula e uma *para* que esta diretamente abaixo do grupo ativador (orientador). Sabendo são três posições possíveis, e para um desativador são duas posições possíveis uma em cada lado do anel, assim podemos descobrir a alternativa, as alternativas colocadas ali a que apresentar três posições como 2, 4 e 6 e seria ativador. E a que apresentar duas posições seria *meta* seria um desativador na posição 3 e 5 [00:46:00].

Mais adiante quando questionado sobre a molécula do fenol, qual o nome da posição nos Carbonos 2, 3 e 6 o estudante responde o seguinte:

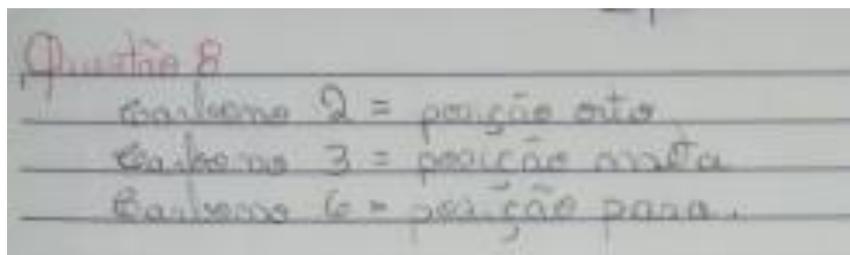
Figura 44 - Resposta da questão oito no pré-teste pelo *expert M.*



Pré-teste

Fonte: A pesquisa.

Figura 45 - Resposta da questão oito no pós-teste pelo *expert M.*



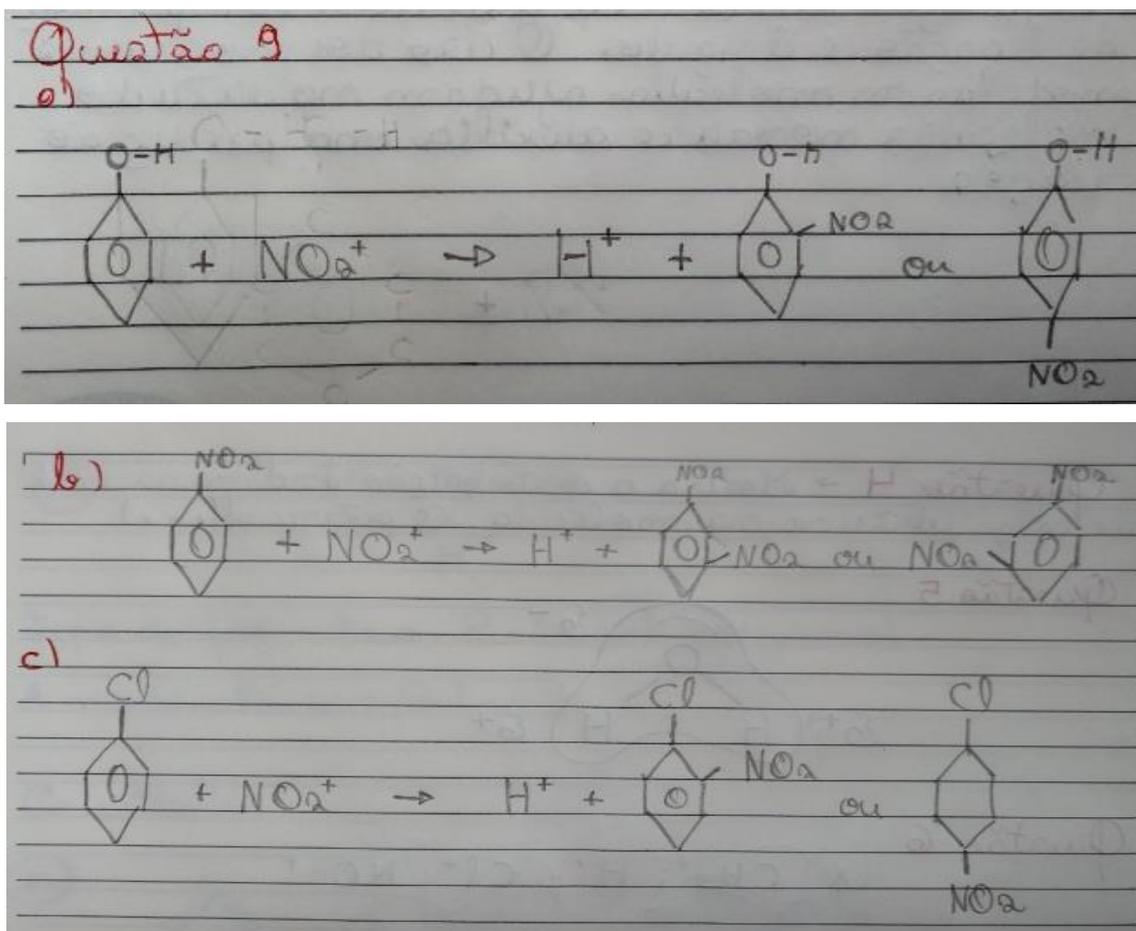
Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

[...] analisando a minha resposta eu vi que na posição 6 eu respondi duas respostas diferentes. Eu acho que posso ter me confundido porque essa geometria (imagem) foi tirada do Arguslab. Eu me lembrava que no Arguslab o número de carbonos (referia-se à numeração dos átomos de Carbono) não é uniforme, não segue uma ordem no sentido horário, eu me confundi. O expert pesquisa na molécula do fenol e comenta: o fenol tem o grupo hidroxila que é um grupo ativador. O carbono 2 é a posição *orto* que está exatamente ao lado do grupo substituinte (o aluno queria dizer grupo orientador); o carbono 3 é a posição *meta* e o carbono 6 que está diretamente abaixo do grupo orientador é o carbono para. No pré-teste eu errei porque imaginei o carbono 6 como o último que fecharia o anel [00:51:19].

No decorrer da entrevista, o aluno é instigado a representar a reação entre o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro) com os seguintes compostos: fenol, nitrobenzeno e clorobenzeno, e fornecer as estruturas dos reagentes, o eletrófilo e o(s) produtos da reação. O aluno responde assim:

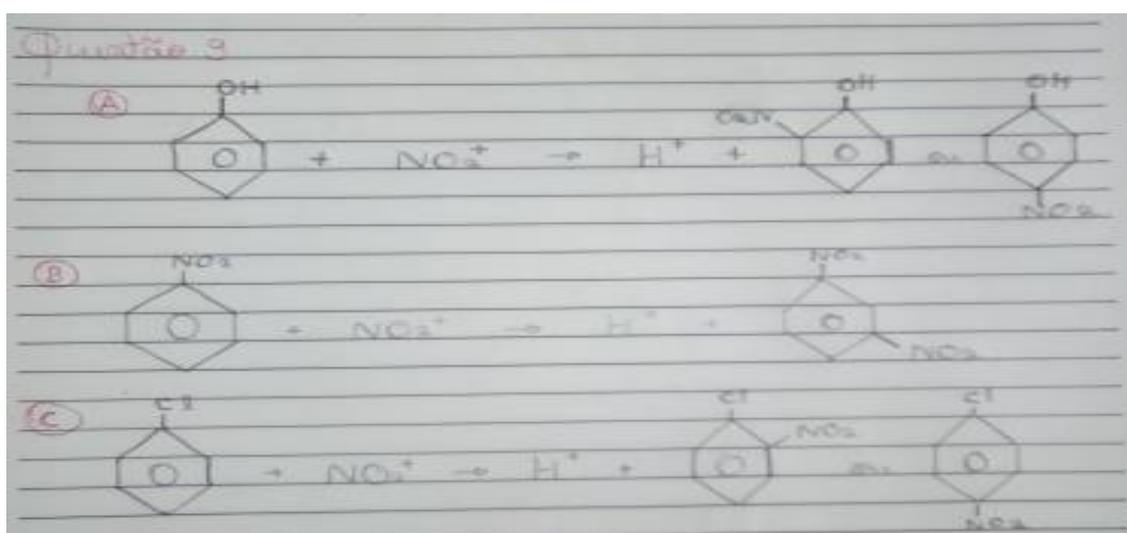
Figura 46 - Resposta da questão nove no pré-teste pelo expert M.



Pré-teste

Fonte: A pesquisa.

Figura 47 - Resposta da questão nove no pós-teste pelo expert M.



Pós-teste

Fonte: A pesquisa.

As figuras acima ilustram as respostas do aluno sobre a questão nove no pré-teste e pós-teste. O *expert* comenta:

As respostas foram as mesmas no pré-teste e pós-teste. Não tive muita dificuldade. O fenol apresenta o grupo hidroxila como substituinte, o grupo hidroxila é um *orto*, para orientador é um grupo ativador. Por conta disso ele vai fazer que as regiões *orto*, *para* sejam preferíveis para sofrer o ataque eletrofílico do eletrófilo. O grupo nitro pode entrar tanto na posição *orto* como *para*, também vai depender de outros fatores probabilísticos, e durante essa reação de substituição será liberado um átomo de H.

No nitrobenzeno é uma outra situação porque o grupo nitro é um grupo *meta* dirigente, é um grupo desativador porque o oxigênio é mais eletronegativo que o nitrogênio e os oxigênios estão ligados ao nitrogênio que por sua vez esse está ligado ao anel e vai ocorrer uma diminuição na nuvem eletrônica nas posições *orto* e *para*, fazendo com que a região *meta* tenha maior concentração de elétrons e seja mais favorável para sofrer o ataque eletrofílico de uma espécie eletrofílica. Então quando vai reagir com o NO_2^+ vai reagir na posição *meta*. Eu poderia ter representado nos testes apenas uma fórmula porque o grupo nitro tanto na esquerda como na direita é a mesma coisa e ocorre a liberação de H^+ .

Para o clorobenzeno o cloro é um átomo eletronegativo ele agir como um substituinte *orto*, *para* e quando o clorobenzeno for reagir com o NO_2^+ o grupo nitro vai realizar um ataque eletrofílico nas posições *orto* e *para* que é o que eu representei ali e também ocorre a troca pelo hidrogênio que fica como H^+ [00:54:43].

Podemos observar a presença de *drivers* culturais nas representações tanto no pré-teste como no pós-teste. O *expert* representa as ligações simples com um traço e as ligações duplas com dois traços (palitos) no anel. Para demonstrar a deslocalização das ligações, pi utilizou o formato de círculo tracejado. Para átomos usou o ponto. Além disso, representou a carga positiva sobre os átomos com o sinal de mais (+). Desse modo, utilizou representações culturais clássicas.

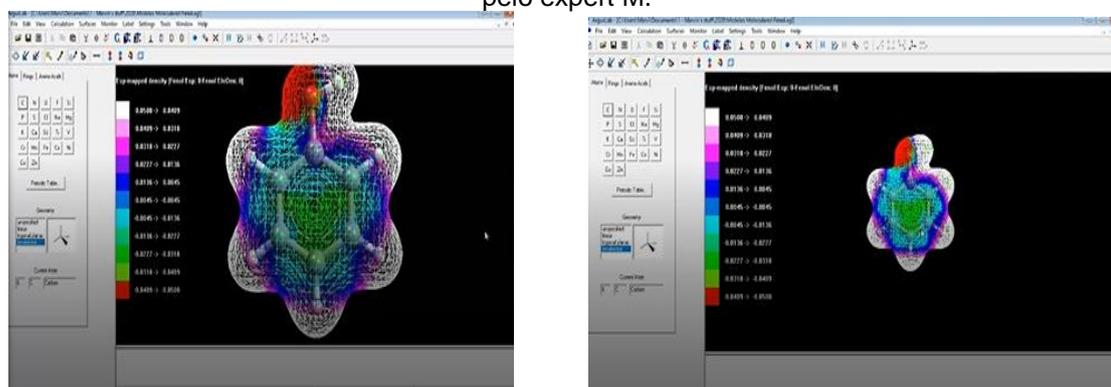
O professor-pesquisador questiona sobre a fonte dessas informações, e a resposta é a seguinte: “*Tudo isso eu já tinha lido na apostila e no livro de Química*”.

Após o pesquisador questiona se o aluno poderia colocar a molécula do fenol e o respectivo mapa de potencial eletrostático na tela (atividade realizada pelo aluno no decorrer do curso de modelagem). A resposta foi: “*Sim. Eu gosto bastante de ver essa representação porque representa bem legal o que eu acabei de falar*”.

O aluno é questionado se os exercícios de modelagem no *Software Arguslab*, com a confecção do Mapa de Potencial Eletrostático, foram interessantes? O *expert* responde: “*Muito interessante*”. O que eu aprendi na literatura eu vi aqui” [00:55:31].

O aluno apresenta a molécula do fenol e o juntamente com o mapa de potencial eletrostático modelados no *Software* Arguslab na tela, e comenta:

Figura 48 - Molécula do fenol e o mapa de potencial eletrostático modelados no *software* Arguslab pelo expert M.



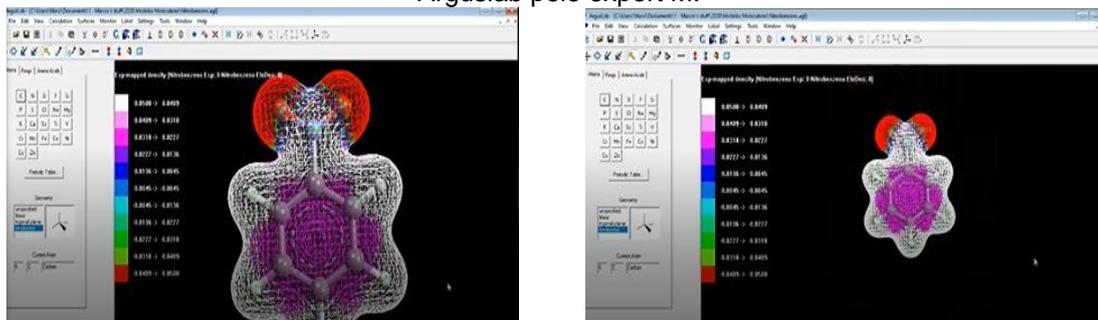
Fonte: A pesquisa.

A imagem acima ilustra a modelagem da molécula do fenol com o seu respectivo mapa de potencial eletrostático. Esse exercício foi realizado no *software* Arguslab pelo *expert*. O estudante faz os seguintes comentários [00:56:02]:

Por exemplo, eu aprendi na literatura que um grupo *orto*, *para* vai ocorrer uma série de alternâncias de estruturas de ressonância que numa posição um par de elétrons do oxigênio vai formar uma ligação dupla, um carbono vai adquirir uma ligação dupla, um par de elétrons e vai indo e se deslocando. É bem difícil de compreender no início, mas depois eu consegui me adaptar e compreender. E o resultado é que quando um grupo ativador entra no benzeno ele vai ativar as posições *orto* e *para*. Eu gosto muito dessa imagem (referia-se ao mapa de potencial eletrostático) que representa bem legal. Aqui nós temos o carbono 4 na posição *orto* e carbono 2 também na posição *orto*. E o carbono 6 na posição *para*. O grupo OH (hidroxila) é ativador porque aumenta o potencial eletrostático justamente nessas posições *orto* e *para*. Como podemos ver com a cor verde que se estende assim num formato de y justamente nessas posições aumenta a concentração de elétrons nas posições *orto* e *para*, favorecendo o ataque eletrofílico nessas posições. E o oxigênio como esperado por ser um átomo muito eletronegativo tem um potencial eletrostático bem vermelho [00:57:24].

Mais adiante o professor-pesquisador pergunta se o aluno poderia apresentar a molécula do nitrobenzeno. O estudante abre o seu arquivo onde realizou os exercícios de modelagem e apresenta a molécula:

Figura 49 - Molécula do nitrobenzeno e o mapa de potencial eletrostático modelados no *software* Arguslab pelo expert M.



Fonte: A pesquisa.

A imagem acima ilustra o movimento do mapa de potencial, o aluno afasta, reduz o tamanho da imagem para verificar a tendência e comenta:

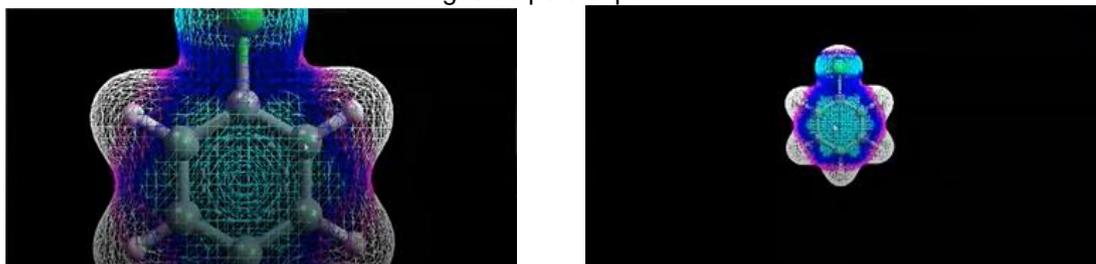
Fica visível que nos carbonos *meta* eles estão com mais coloração lilás, enquanto nos carbonos *orto* e *para* estão mais brancos. Comparando a coloração com a legenda verifica-se que os carbonos *meta* são mais eletronegativos, favorecendo o ataque eletrofílico [00:57:34].

O *expert* ainda enfatiza:

O nitrobenzeno tem dois átomos de oxigênio e um átomo de nitrogênio e ambos os átomos são bem eletronegativos, e por conta disso, a região da molécula no anel benzênico fica muito desprovida de elétrons. Verifica-se através das (legenda na tela do *software*) as cores lilás e branca no anel. Mas tem uma tendência que é característica do substituinte, o grupo nitro. O grupo nitro é um grupo *meta* dirigente, favorece o ataque eletrofílico na posição *meta*. Se eu afastar um pouquinho vai ficar visível que no carbono nas regiões *meta* ele está mais lilás. Enquanto os carbonos das regiões *orto* e *para* estão mais brancos. Com isso vemos que os carbonos da região *meta* por conta de terem um potencial eletrostático lilás, eles vão ter uma concentração de elétrons maior do que os carbonos na região *orto* e *para* que são brancos e tem uma concentração de elétrons muito pequena. E por conta disso o grupo desativador (desativador significa que ele desativa as regiões *orto* e *para* tornando as regiões *meta* as únicas disponíveis para sofrer um ataque eletrofílico. Então quando ocorrer um ataque eletrofílico vai ocorrer nas regiões *meta* [00:59:22].

No decorrer da entrevista, o pesquisador pergunta ao aluno se ele havia modelado a molécula do clorobenzeno, o estudante diz que sim, então, o professor-pesquisador solicita ao aluno para apresentar a molécula do clorobenzeno.

Figura 50 - Molécula do clorobenzeno e o mapa de potencial eletrostático modelados no *software* Arguslab pelo expert M.



Fonte A pesquisa.

A imagem acima ilustra o movimento do mapa de potencial, o aluno afasta, reduz o tamanho da imagem para verificar a tendência: o aluno fica confuso com as colorações e não consegue confirmar a tendência na orientação nos carbonos *orto* e *para* [00:59:34].

O cloro é um átomo eletronegativo não tão eletronegativo como o oxigênio, por isso não apresenta a coloração avermelhada. Mas como o cloro é eletronegativo ele é um orientador *orto* e *para* dirigente. Isso se prova quando a gente analisa às posições *orto* e *para* aqui no anel. Se nós analisarmos com bastante cuidado nós conseguimos interpretar aqui que as regiões 4, 2 e 6 do carbono regiões *orto* e *para* apresentam uma coloração um pouquinho mais azul forte do que as regiões *meta*. Pois é aqui na geometria (mapa de potencial) eu não estou conseguindo visualizar direitinho. Mas a tendência era essa de ter uma concentração de elétrons maior na região *orto* e *para* maior do que as regiões *meta*, e por conta disso, ocorrer um ataque eletrofílico nas regiões *orto* e *para* [01:01:34].

O professor-pesquisador questiona o estudante:

P: eu não me lembro se fui tu que apresentou na aula a molécula e fez a pesquisa no relatório do *software* da carga dos carbonos. Lembra tinha no projeto. P professor pergunta para o *expert M* se ele havia colocado as cargas nos átomos [01:01:56].

Expert M: resposta do aluno: deixa eu conferir.

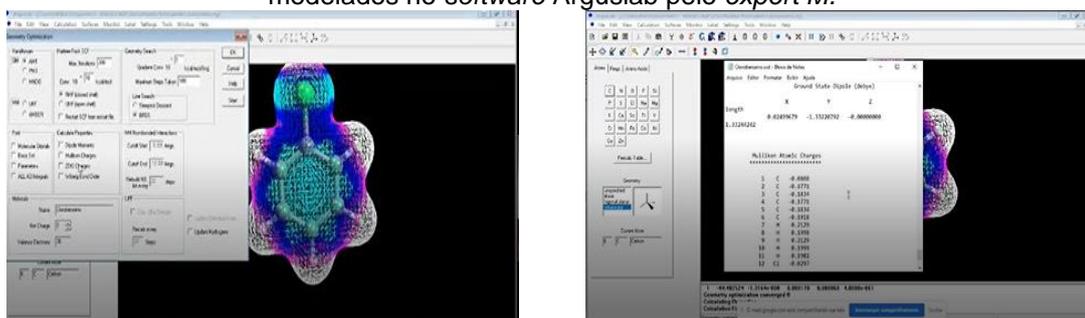
Expert M: eu não coloquei as cargas naquela atividadezinha que tu pediu e que tinha na folha. Tinha as lacunas para escrever as cargas, mas eu me lembro que eu não coloquei.

Expert M: mas eu pesquisei as cargas eu fiz os procedimentos para abrir as coisas. Eu posso dar uma olhada rapidinho.

Expert M: deixa eu compartilhar a tela enquanto eu clico em cima desse bloco de notas aqui com as cargas.

Exper M: Prepara o programa para o cálculo e ajusta os dados.

Figura 51 - Molécula do clorobenzeno com o mapa de potencial eletrostático e as cargas de Muliken modelados no *software* Arguslab pelo *expert M*.



Fonte: A pesquisa.

A imagem acima ilustra o aluno pesquisando as cargas de Muliken no relatório do *software* Arguslab, e após analisa que o carbono *meta* é mais eletronegativo que o carbono *orto*. E o carbono *para* é o mais eletronegativo de todos. Abaixo o diálogo entre o professor-pesquisador e o *expert M*:

Expert M: aqui o carbono da posição *meta* apresenta uma carga mais eletronegativa do que os carbonos da posição *orto*. Era para ser assim?

P: O carbono *para* é mais eletronegativo?

Expert M: aqui está mostrando que o *para* é o mais eletronegativo de todos

P: e o *meta* apresenta uma carga um pouco mais eletronegativa do que o carbono *orto*?

Expert M: isso é estranho

P: se tu fosse responder à questão através das cargas pesquisadas tu manteria a tua posição/resposta?

Expert M: sim, *orto* e *para*

Expert M: e ocorre assim no cloro?

P: procura relembrar em relação aos teus estudos no livro do Peter Atkins

P: questiona o *expert*: depois de tu lembrar do livro de Química Orgânica tu consegue formular uma resposta para a questão do clorobenzeno? [00:02:42 no vídeo B].

Expert M: “o átomo de cloro é eletronegativo, mas também é muito volumoso, é volumoso que o grupo hidroxila e o grupo nitro. Por conta de ser mais volumoso ele (átomo de Cl) exerce um efeito estérico sobre as posições *orto*. Por conta disso, um agente eletrofílico teria dificuldade de atacar as posições *orto*. O que me deixou um pouco surpreso porque as posições *orto*, não é tão eletronegativa quanto as posições *meta* e *para*. Daí entendi agora que por conta do efeito estérico que o cloro exerce sobre a molécula, deixaria as posições *orto* menos disponível para o ataque eletrofílico. E a posição *para* que está distante do cloro teria tendência normal do efeito ativador do cloro e teria maior carga negativa. E a posição *para* seria a maior probabilidade do ataque eletrofílico”. [03:28:00 vídeo 2].

O *expert M* cita que o carbono da posição *meta* apresenta uma carga mais eletronegativa do que os carbonos da posição *orto*, e questiona, era *para* ser assim? O *expert* comenta: “aqui está mostrando que o *para* é o mais eletronegativo de todos

e o *meta* apresenta uma carga um pouco mais eletronegativa do que o carbono *orto*, isso é estranho”.

Quando o *expert* foi questionado sobre a atividade de inserir as cargas de Mulliken na molécula do clorobenzeno, ele respondeu que não havia colocado no momento, mas mais tarde havia realizado conforme o procedimento.

O professor-pesquisador questiona, se tu fosses responder à questão através das cargas pesquisadas, tu manterias a tua resposta? Então, o *expert* respondeu: “*sim, orto e para*”.

O *expert* relaciona o efeito estéreo do átomo de cloro como uma menor probabilidade para entrada do grupo nitro no carbono *orto*, dizendo que o cloro é mais volumoso, e a eletronegatividade do cloro como justificativa para a entrada desses substituintes no carbono *orto*.

De acordo com a literatura, o efeito indutivo é a polarização de uma ligação adjacente. Quando os elétrons são cedidos ocorre a estabilização por efeito indutivo positivo (grupo ativador). Quando ocorre a retirada de elétrons ocorre a desestabilização por ressonância por efeito indutivo negativo (grupo desativador). Em relação aos halogênios, os mesmos diminuem a reatividade por efeito indutivo negativo retirando elétrons do anel. Desse modo, orientam o eletrófilo nas posições *orto/para* através de doação de elétrons por ressonância (McMURRY, 2008, v. 2, p. 543). Em se tratando da probabilidade de ataque nos átomos de carbono *orto* 35%, *meta* 1% e *para* 64% o *expert* acertou, apesar da sua resposta não estar correta, ou seja, a argumentação do efeito estéreo do átomo de cloro.

Concluindo em relação ao *expert M*, observamos apenas a mediação cultural. Como o *expert* afirma na sua apresentação: todas as informações eu adquiri através da literatura e o *software* Arguslab serviu apenas como um organizador prévio.

8.7 RESUMO DAS MEDIAÇÕES E CONCEITOS NO PRÉ-TESTE E NO PÓS-TESTE

A tabela abaixo tem por finalidade a verificação da evolução com o uso *software* por parte dos sujeitos antes no pré-teste e no pós-teste, em relação a cada um dos conceitos envolvidos, ilustrando se houve ou não houve a mediação cultural, hipercultural. Acreditamos que com o contexto em cada subcategoria, considerando as representações, análise gestual e a linguagem verbal.

Tabela 7 - Resumos das mediações envolvendo o contexto em cada subcategoria

Aluno	Conceito Pré-teste	Mediação Pré-teste	Conceito Pós-teste	Mediação Pós-teste	Localização
W	Estrutura 3D da molécula da amônia	Cultural	Estrutura 3D da molécula da amônia	Hipercultural	<p>Eu liguei para o expert compartilhei a tela e o expert ia me explicando. Após ele abriu o Arguslab dele e compartilhou a tela e aí eu vendo a explicação e a modelagem do expert eu consegui ter essa noção de entender a molécula em três dimensões. pagina 105</p> <p>Na questão da polaridade foi com o expert M. Quando a gente estava fazendo os exercícios eu perguntei a importância da geometria. Por que eu não podia representar de uma outra forma se tivesse a mesma quantidade de átomos. Tem um nitrogênio e três hidrogênios e por que eu não posso colocar em outro lugar e ele me explicou que as forças fazem com que fique sempre da mesma forma a amônia e que estando todos os hidrogênios abaixo e o nitrogênio acima cria um campo de polo positivo e negativo. Então a molécula vai ser polar porque está bem definido onde vai ser positivo e negativo os polos da molécula. Página 114</p>
W	Geometria molecular e polaridade (molécula da amônia)	Cultural	Geometria molecular e polaridade (molécula da amônia)	Hipercultural	<p>É, no <i>software</i>. Tu tens a molécula, eu não lembro onde é que era que tu clicavas, faz tempo que eu não abro o <i>software</i>. Mas tem um lugar que tu apertavas lá no <i>software</i> que ele tinha cores. Daí tu consegue ver bem direitinho que na parte dos hidrogênios ele tem uma cor, e na parte dos nitrogênios tem outra cor. Página 117</p> <p>É isso. Consegue-se visualizar os campos. Onde é positivo e negativo para ter uma percepção mais espacial de cada um dos polos. Para mim na minha concepção ajudou muito, ficou mais claro, sabe. Do que era apolar e polar.¹² Página 118</p>
W	Densidade eletrônica	Cultural	Densidade eletrônica	Hipercultural	<p>No Arguslab. Quando tu colocas o benzeno na parte de cima tu bota um radical um cloro, qualquer radical, e aí tu percebias que isso o potencial eletrostático mudava, muda todo potencial do benzeno e aí trazendo mais uma indicação que é justamente onde outras ligações futuras poderão entrar. Página 131</p> <p>Eu comecei, já tinha escutado falar mas muito vagamente, mas procurei começar a entender mesmo a funcionalidade tudo, justamente quando fui começar a palpar começar a mexer no Arguslab, que aí ficou mais evidente o uso e começar a entender. Página 132</p>
W	Eletrófilo	Não sabia	Eletrófilo	Hipercultural	<p>Ajuda. Ajuda até a compreensão porque ante ali dá para ver que eu tinha uma compreensão muito preto no branco, aqui é positivo aqui é negativo, mas depois fica mais claro que é assim, positivo e negativo, mas tem também uma gradualidade, não sei se vai ser oito ou oitenta.³ Página 147</p>

Tabela 7 - Resumos das mediações envolvendo o contexto em cada subcategoria (cont.)

Aluno	Conceito Pré-teste	Mediação Pré-teste	Conceito Pós-teste	Mediação Pós-teste	Localização
W	Reação em anel aromático	Não sabia	Reação em anel aromático	Hipercultural	<p>W: É, aquele mapa coloridinho aí que fica para a gente ter essa orientação, de se o radical que tu colocaste é um ativador ou desativador que consegue se orientar por esse mapa.⁶</p> <p>P: Então, esse mapa, te ajudou bastante?</p> <p>W: Sim. Até porque, assim, se não for fazer assim, tem que decorar mesmo né. Ainda não entendi outra forma sem decorar ou consultar no <i>software</i>.</p> <p>P: Então, (isso tudo), a modelagem te ajudou foi bastante útil?</p> <p>W: É, essa eu acho que tenha sido bastante coisa do <i>software</i> foi bastante útil. Mas essa, acho que foi a coisa que foi mais necessária, assim, para tu explicar, sem o <i>software</i> fica bem mais puxado. Para se ter essa concepção de um radical vai mudar o comportamento da molécula com uma ramificação, sabe. Assim, eu acho que com o <i>software</i>, talvez das aplicações que a gente tem usado, todas foram boas, não é? Mas essa eu acho que seja a que o <i>software</i> seja mais fundamental para conseguir entender o conteúdo. Ele é relevante mesmo.</p> <p>Página 152</p>
V	Estrutura 3D da molécula da amônia	Cultural	Estrutura 3D da molécula da amônia	Inconclusiva para a mediação hipercultural	<p>Então eu não sei se eu representei 100% certo. Porque eu estava pesquisando, e depois teria o nitrogênio na parte superior, ele teria os pares isolados em cima, eles faziam uma repulsão, seria essa fórmula repulsão?"³</p> <p>Página 106</p>
V	Densidade eletrônica (Mapa de potencial eletrostático)	Não sabia	Densidade eletrônica (Mapa de potencial eletrostático)	Hipercultural	<p>o Arguslab deixou mais fácil de interpretar parte do mapa de potencial. [...] Porque eu sou uma pessoa que aprende muito vendo, tanto que eu gosto de decorar bastante para chamar atenção e aquilo fixar na minha cabeça. Então o <i>software</i> de modelagem chamava aquela atenção, então eu aprendia através das cores. Ficou mais fácil para fixar o conteúdo em si.</p> <p>página 135</p>
MT	Estrutura 3D da molécula da amônia	Não respondeu	Estrutura 3D da molécula da amônia	Hipercultural	<p>[...] daí no pós-teste a gente já estava trabalhando com o <i>software</i>, a gente fez a molécula da amônia e da água, então eu imaginei que para fazer em uma folha em 3D a gente teria que fazer as bolinhas e as ligações, não é? Claro que não ficaria igual se a gente fizesse no <i>software</i>, mas eu acho que foi mais ou menos isso que eu pensei em colocar no papel.</p> <p>Página 108</p> <p>P: O que você imaginava quando produzia os gestos?</p> <p>MT: Eles vinham primeiramente de livros, e a estrutura, as moléculas em parte vinham do <i>software</i> de modelagem, o Arguslab. Os livros também têm esse conteúdo visual para a gente imaginar como seria mais ou menos na prática.</p> <p>P: Então, o <i>software</i> foi útil para alguma coisa. O que trouxe de bom?</p> <p>MT: Na minha opinião, eu acho que foi muito bom, porque a gente, geralmente, nos livros a molécula é em geometria plana. E o <i>software</i> possibilita a gente poder movimentar a molécula, conseguir visualizar melhor como que funciona os ângulos, e o formato dela, a estrutura que ela representa. Enfim, acredito que foi muito útil.</p> <p>Página 121 e 122</p>
MT	Geometria molecular e polaridade (molécula da amônia)	Cultural	Geometria molecular e polaridade (molécula da amônia)	Hipercultural	

Tabela 7 - Resumos das mediações envolvendo o contexto em cada subcategoria (cont.)

Aluno	Conceito Pré-teste	Mediação Pré-teste	Conceito Pós-teste	Mediação Pós-teste	Localização
CB	Estrutura 3D da molécula da amônia	Não sabia	Estrutura 3D da molécula da amônia	Hipercultural	[...] a B da 1, eu não fiz porque, quando a gente ainda não tinha mexido no Arguslab, daí eu não tinha noção de como é que era o 3D. [...] aí, na B, do pós-teste eu imaginei como se fosse fazer no Arguslab lá com as moléculas tudo com as bolinhas certinho e as ligações e a o a molécula normal ali do, da amônia, no primeiro nono ano eu aprendi a fazer; e a representação letra b Página 111
JR	Geometria molecular e polaridade (molécula da água e da amônia)	Cultural	Geometria molecular da molécula da água (molécula da água e da amônia)	Inconclusiva para a mediação hipercultural	Se eu não me engano, Sor, o meu raciocínio foi porque ela tem três átomos, e quando tem três átomos geralmente é angular. Tem casos que são lineares, mas no caso da água é angular. A gente já tinha visto alguma coisinha também sobre ângulos, então acredito que foi por isso que eu coloquei angular, Sor. Página 122 e 123
GH	Estrutura 3D da molécula da amônia Geometria molecular e	Cultural	Estrutura 3D da molécula da amônia Geometria molecular e	Hipercultural	Acho mais pela representação 3D, eu tentei mudar, pelo que eu vi no Arguslab, representar de uma maneira mais correta, talvez. Página 110
GH	polaridade (molécula da água e da amônia)	Cultural	polaridade (molécula da água e da amônia)	Inconclusiva para a mediação hipercultural	"Daí, eu sei que a geometria dela, não é que eu sabia, mas eu pesquisei assim, e soube que a geometria dela é angular, porque ela é uma molécula tri-atômica né, não, é tri-atômica" Página 125
GH	Densidade eletrônica (Mapa de potencial eletrostático)	Não sabia	Densidade eletrônica (Mapa de potencial eletrostático)	Hipercultural	o que facilitou essa compreensão dos mapas eletrostáticos foi a visualização no <i>software</i> Arguslab, em que eu conseguia ter uma noção. Porque eu acho que ali, na época, eu nem tinha visto muito sobre mapas eletrostáticos, e eu acredito ter sido ali com base no <i>software</i> e na explicação do senhor. ² Página 132
GH	Ressonância molécula do benzeno	Não sabia	Ressonância molécula do benzeno	Cultural	Então, nós fizemos o pré-teste, iniciamos a modelagem molecular e durante a interação com a modelagem molecular tu chegaste a essa resposta? Isso, com as explicações e com a visualização no livro. P: Concluindo, então inicialmente tu não tinhas conhecimento e depois tu vais para o livro? É isso. [...] Com as explicações e com a visualização do livro. Página 141
expert	Estrutura 3D da molécula da amônia Geometria molecular e	Cultural	Estrutura 3D da molécula da amônia Geometria molecular e	Cultural	O <i>software</i> Arguslab serviu apenas como um organizador prévio Página 82
expert	polaridade (molécula da água e da amônia)	Cultural	polaridade (molécula da água e da amônia)	Cultural	O <i>software</i> Arguslab serviu apenas como um organizador prévio
expert	Densidade eletrônica (Mapa de potencial eletrostático)	Cultural	Densidade eletrônica (Mapa de potencial eletrostático)	Cultural	O <i>software</i> Arguslab serviu apenas como um organizador prévio

Tabela 7 - Resumos das mediações envolvendo o contexto em cada subcategoria (cont.)

Aluno	Conceito Pré-teste	Mediação Pré-teste	Conceito Pós-teste	Mediação Pós-teste	Localização
expert	Ressonância molécula do benzeno	Cultural	Ressonância molécula do benzeno	Cultural	O <i>software</i> Arguslab serviu apenas como um organizador prévio
expert	Eletrófilo	Cultural	Eletrófilo	Cultural	O <i>software</i> Arguslab serviu apenas como um organizador prévio
expert	Reação em anel aromático	Cultural	Reação em anel aromático	Cultural	O <i>software</i> Arguslab serviu apenas como um organizador prévio

Fonte: A pesquisa

Na subcategoria Estrutura 2D e 3D, em relação ao entendimento da estrutura em 3D da molécula da amônia, podemos observar que o aluno W inicialmente com a mediação cultural passa a adquirir a mediação hipercultural, ou seja, a mediação cultural não foi suficiente. Em relação à habilidade visuoespacial do estudante, concluímos que a mesma foi modificada através da mediação com o *software* de modelagem molecular. Já o aluno GH, também inicialmente com a mediação cultural, passa a adquirir a mediação hipercultural com a modificação da habilidade visuoespacial. Já as alunas CB e MT inicialmente não sabiam representar a estrutura em 3D da molécula da amônia, e após a modelagem obtém a mediação hipercultural com a melhora na habilidade visuoespacial. No que diz respeito a aluna V, observamos que de uma mediação cultural inicial no pré-teste não conseguimos concluir em relação à mediação hipercultural. Concluindo, para o *expert*, somente a presença da mediação cultural.

Já na subcategoria Geometria Molecular e Polaridade, o aluno W e a aluna MT com a mediação cultural inicial passa a adquirir a mediação hipercultural após a modelagem, e a sua habilidade visuoespacial é modificada. Em se tratando da aluna JR e do aluno GH, observamos a mediação cultural inicialmente e a condição de inconclusiva para a mediação hipercultural. Finalizando, em relação ao *expert* somente presença da mediação cultural.

Na subcategoria Densidade Eletrônica, o aluno W inicialmente com a mediação cultural passa a adquirir a mediação hipercultural com consequente mudança na habilidade visuoespacial. Em se tratando da aluna V e do aluno GH, os mesmos inicialmente não tinham (sabiam) sobre o mapa de potencial eletrostático, e após a mediação com o *software* de modelagem molecular passaram a ter ganhos em relação à habilidade visuoespacial. Por fim, o *expert*, somente com a mediação cultural no pré-teste e no pós-teste.

Na subcategoria Ressonância (molécula do benzeno), podemos observar apenas a presença da mediação cultural por parte do aluno GH e do expert.

Já na subcategoria Eletrófilo, verificamos que inicialmente o aluno W não tinha conhecimento, e após passar pela modelagem molecular passa a adquirir a mediação hipercultural, e com ganhos na habilidade visuoespacial. Finalizando, com o *expert*, apenas a presença da mediação cultural.

Por fim, na subcategoria Reação em Anel Aromático, o aluno W não sabia o que era um eletrófilo, e após passar pela modelagem molecular adquiriu a mediação hipercultural, obtendo ganhos significativos em relação à habilidade visuoespacial. Em se tratando do *expert*, apenas a mediação cultural.

9 RELAÇÕES ENTRE OS RESULTADOS DA DISSERTAÇÃO VERSUS RESULTADOS DA PESQUISADORA ADRIANA RAMOS

O objetivo deste capítulo é ilustrar as semelhanças entre as diferentes representações propostas pelos estudantes quando faziam a representação de átomos, ligações químicas, moléculas e nuvem eletrônica.

9.1 REPRESENTAÇÃO DE ÁTOMOS

A figura 52 foi retirada da tese da pesquisadora Adriana Ramos 2015, e a descrição segundo a autora é a seguinte:

As imagens 15(A) e (B) mostra 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 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 (RAMOS, 2015, p. 117).

Figura 52 - Gesto produzido por todos os estudantes para representar átomos.



Fonte: Ramos (2015)

Abaixo apresentamos a figura 53 retirada da nossa pesquisa, onde os estudantes produziram gestos para representar átomos.

Figura 53 - Gestos produzidos pelos estudantes para representar átomos.



Fonte: A Pesquisa

Na imagem 1 o estudante W, faz a representação com as mãos na forma de bola. Na imagem 2, a estudante JR com a mão direita em forma de concha, e na imagem 3 o aluno GH com a mão direita na forma de concha. Ao longo da entrevista os alunos representavam na maior parte dos gestos o átomo em forma de bola, ponto, e de concha, representação semelhante encontrada no trabalho da pesquisadora Adriana Ramos.

9.2 REPRESENTAÇÃO DE LIGAÇÕES QUÍMICAS

A figura 54 foi retirada da tese da pesquisadora Adriana Ramos 2015, e a descrição segundo a autora é a seguinte:

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. 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 (RAMOS, 2015, p. 120).

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 RAMOS, 2015, p. 120).

Figura 54 - Gestos produzidos por todos os estudantes para representar as ligações químicas.



Fonte: Ramos (2015).

Abaixo apresentamos a figura 55 retirada da nossa pesquisa, onde o estudante representou as ligações duplas na molécula do benzeno.

Figura 55 - Gestos produzidos pelo estudante GH para representar as ligações químicas na molécula do benzeno.



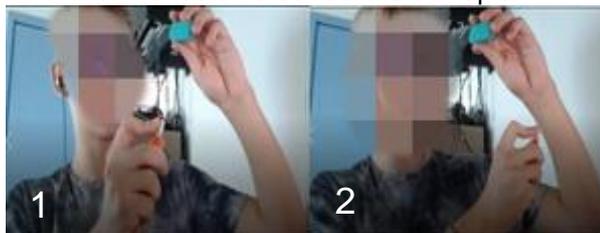
Fonte: A pesquisa.

Na primeira, segunda e terceira imagem o aluno representa os átomos e as ligações químicas (ligações duplas) com as mãos esticadas e paralelas, ilustrando a posição das ligações na molécula.

Essa representação não é semelhante à representação encontrada no trabalho de Ramos (2015). Os gestos produzidos pelos estudantes quando se referiam às ligações químicas eram, por norma, de cunho cultural, pois a maioria dos gestos remeteu à representação de palitos. Na nossa pesquisa a maioria das representações das ligações químicas foram à forma de palito.

Na figura abaixo temos a representação pelo aluno W, do átomo em forma de borracha, um lápis, sendo o lápis utilizado tanto para representar um átomo e uma ligação química.

Figura 56 - Gestos produzidos pelo estudante W para representar o átomo e a ligação química, utilizando uma borracha e um lápis.



Fonte: A pesquisa.

O estudante ergue a borracha com a mão direita para identificar o átomo de nitrogênio, e com a mão direita o aluno identifica com um lápis o átomo de hidrogênio e as ligações químicas. Após volta o lápis com a mão direita para o seu lado esquerdo, representando outro átomo de hidrogênio. O aluno explicou que a geometria da molécula tem a forma uma pirâmide como se fosse um tripé que ele fosse capaz de deixar em pé.

9.3 REPRESENTAÇÃO DE MOLÉCULAS

A figura 57 foi retirada da tese da pesquisadora Adriana Ramos (2015), e a descrição segundo a autora é a seguinte:

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 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 (RAMOS, 2015, p. 123).

De acordo com a pesquisadora, 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° 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 (RAMOS, 2015, p. 123).

Figura 57 - Gestos produzidos pelos estudantes para representar planos e partes da molécula.



Fonte: Ramos (2015).

Figura 58 - Sequência de gestos produzidos pelo aluno GH, representando a molécula do benzeno com as ligações duplas e citando o formato de um losango.



Fonte: A pesquisa.

A figura 58 foi retirada da nossa pesquisa, e a descrição é a seguinte: na imagem 1 o aluno representa os átomos e as ligações laterais com as mãos esticadas e paralelas. Na segunda imagem, com as mãos esticadas, representa os átomos, as ligações e o ângulo da parte inferior da molécula na forma de “V”. Na imagem 3 com as mãos esticadas, representa os átomos, as ligações e o ângulo parte superior da molécula na forma de “V” virado.

Percebemos nas figuras acima, que a representação de parte de uma molécula seguiu a mesma lógica de representação gestual de átomos e ligações, conforme a descrição de Ramos (2015). Já na nossa pesquisa obtivemos a representação com as mãos esticadas e paralelas, na forma de bola e de contorno.

9.4 REPRESENTAÇÃO DA NUVEM ELETRÔNICA

A figura 59 foi retirada da tese da pesquisadora Adriana Ramos (2015).

De acordo com a descrição da autora, o estudante P mostrou a polarizabilidade da nuvem eletrônica entre os átomos de nitrogênio e hidrogênio na molécula da amônia. Conforme a pesquisadora, 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. Outro fato importante salientado pela pesquisadora foi a resposta que o estudante produziu quando perguntado se ele tivesse que pensar a respeito desse fenômeno (RAMOS, 2015, p. 137). A resposta foi a seguinte:

[...] sabe aqueles abajures, que tem um tipo de um ninho dentro que tem um óleo? Se tu ver, conforme o óleo vai subindo, daí ele fica uma bolinha e fica uma pontinha. [...] A parte gorda que está subindo seria mais eletronegativa, a que está puxando, e a parte fininha embaixo seria uma parte positiva (RAMOS, 2015, p. 138).

Já o estudante D fez um gesto com a mão direita fechada, como se estivesse segurando e puxando algo para si. De acordo com a pesquisadora, com esse gesto, o estudante demonstrou para que lado a ligação química, os elétrons estavam deslocados. Segundo Ramos, quando a tarefa era montar a molécula da amônia, o estudante imaginava o par de elétrons do nitrogênio primeiramente como dois pontos, uma representação provavelmente sociocultural, conforme a descrição do estudante (RAMOS, 2015, p. 138):

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 (RAMOS, 2015, p. 138).

Em relação a estudante N, de acordo a pesquisadora, a mesma 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 (RAMOS, 2015, p. 138).

Figura 59 – Gestos produzidos pelos estudantes para representar polaridade e nuvem eletrônica.



Fonte: Ramos (2015).

A figura 60 também foi retirada da tese da pesquisadora Adriana Ramos 2015. Nela a pesquisadora Adriana Ramos apresenta os gestos produzidos pelo aluno L para explicar como montava as moléculas e de que forma enxergava a distribuição de cargas de cada molécula.

Conforme relatos da pesquisadora, na imagem A, o estudante L, 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 (RAMOS, 2015, p. 140).

Já na imagem B, o *expert* mostrou com ambas as mãos a distribuição homogênea de cargas na molécula do CO₂, afirmando o seguinte em relação à molécula: “que a molécula vai estar balanceada pela presença de dois átomos mais eletronegativos em cada extremidade” (RAMOS, 2015, p. 140).

Por fim, na imagem C, o estudante L 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 (RAMOS, 2015, p. 140).

Figura 60 - Gestos produzidos pelo estudante L para representar polaridade e nuvem eletrônica.



Fonte: Ramos (2015).

A figura 61 abaixo faz parte da dissertação, e ilustra os gestos produzidos pelos alunos para representar polaridade e nuvem eletrônica.

Figura 61 - Gestos produzidos pelos alunos para representar polaridade e nuvem eletrônica.



Fonte: A Pesquisa.

Na imagem 1 com os dedos polegar e indicador da mão esquerda e direita e afastados a representação dos dois pares de elétrons livres na forma de ponto. Já na imagem 2 com as duas mãos fechadas em forma de esfera os dois pares de elétrons livres. Na imagem 3 com dois dedos da mão direita, a aluna menciona os dois pares de elétrons livres. Na imagem 4 com a mão direita na parte superior e com os dedos afastados na forma de concha representa os pares de elétrons livres.

Em relação aos gestos produzidos para representar a polaridade e a nuvem eletrônica, observamos no trabalho da pesquisadora Adriana Ramos que os alunos mencionaram as expressões elétrons livres, elétrons deslocados. Na maior parte das representações para elétrons livres, os estudantes utilizaram a representação na forma de dois pontos, e com ambas as mãos para mostrar a distribuição homogênea das cargas. Já na nossa pesquisa os alunos alguns alunos também utilizaram a representação de ponto, o formato das duas mãos na forma de esfera, a representação com dois dedos e na forma de concha com os dedos mais afastados.

CONSIDERAÇÕES

O presente estudo iniciou-se visando investigar o aprendizado de conceitos químicos após uso de *software* de modelagem molecular na modelagem de Reações de Substituição Aromática Eletrofílica. Desse modo, buscou-se a produção de imagens mentais dos participantes ao longo das entrevistas, originária de diferentes mecanismos externos.

Para alcançar tais propósitos, buscou-se encontrar respostas para a seguinte questão norteadora da pesquisa: a utilização de *software* de modelagem molecular, por meio de um experimento didático, consegue promover a aprendizagem de representações e *drivers* pertinentes à resolução de problemas de Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica? Assim, a condução da investigação converge e culmina na tentativa de relacionar as imagens mentais e *drivers* com a sua origem.

A técnica da Análise de Conteúdo de Bardin, possibilitou analisar tanto o material escrito desenvolvido pelos participantes quanto a transcrição da entrevista realizada. Dentre as técnicas de Análise de Conteúdo optamos pela Análise Categorical.

A metodologia utilizada, por meio da escolha da técnica *Report Aloud*, juntamente com a utilização da Análise Gestual Descritiva (CLEMENT, 1994; CLEMENT; STEINBERG, 2002; MONAGHAN; CLEMENT, 1999; STEPHENS; CLEMENT, 2010, 2015) nas entrevistas, possibilitou caracterizar os gestos descritivos realizados pelos estudantes. Assim como detectar as imagens mentais, existentes na estrutura cognitiva dos participantes (ao explicar um assunto), oriundas de diferentes mediações.

Em relação ao problema de pesquisa, percebemos que o estudante W adquiriu um ganho significativo em relação à competência representacional. Fato é, que isso o estudante não tinha antes da modelagem molecular. A melhora na capacidade de visualização molecular e modelagem molecular foi adquirida com a modelagem através do *software* Arguslab. O aluno W adquiriu *drivers* hiperculturais de visualização molecular e modelagem molecular. Para isso, foi preciso o aporte da mediação hipercultural para o estudante poder obter tais ganhos na visualização e na modelagem molecular através do mapa de potencial eletrostático em relação à orientação do eletrófilo na Reação de Substituição Aromática Eletrofílica. A conclusão

que chegamos, é que os *drivers* culturais não foram suficientes, e desse modo, observamos que a habilidade visuoespacial do estudante W foi modificada através da mediação com o *software* Arguslab. Então, dentre os 12 alunos participantes, excluindo o *expert*, o aluno W foi o único que obteve a aprendizagem e adquiriu *drivers* hiperculturais especificamente, em relação à reação de SAE.

No que diz respeito ao objetivo geral, investigar o aprendizado de conceitos químicos após uso de *software* de modelagem molecular na modelagem de reações de Substituição Aromática Eletrofílica, acreditamos que o mesmo foi atingido, conforme os dados da tabela 7. Dentre os conceitos estrutura 3D da molécula da amônia, geometria molecular e polaridade, densidade eletrônica, mapa de potencial eletrostático, eletrófilo e reação em anel aromático os alunos inicialmente tinham a mediação cultural ou em alguns casos não sabiam/não responderam, e após a modelagem passaram a adquirir a mediação hipercultural.

Acerca dos objetivos específicos, foram criados os roteiros para aplicação do experimento didático e para a modelagem específica da reação a ser empregada. A interpretação da produção de gestos descritivos combinados ao discurso verbal dos estudantes de modo a obter as imagens mentais oriundas de diferentes mediações durante a resolução de problemas propostos foi atingida.

De acordo com a análise da tabela 7, podemos observar que a identificação das mediações predominantes nas categorias analisadas, também foram alcançadas. Excluindo o *expert*, no pré-teste os alunos tinham a mediação cultural e após no pós-teste a maioria adquiriu a mediação hipercultural. Conforme a tabela, tivemos apenas um caso de mediação cultural no pós-teste e três casos de inconclusivo para a aquisição da mediação hipercultural. Entendemos que importância da habilidade visuoespacial foi fortemente justificada nesta pesquisa. Ela é o ponto de partida do estudante, ao permitir a formação de imagens mentais, produzidas pela criação de *drivers* específicos que podem ser construídos pelas mediações, ou pela mescla destas (RAMOS, 2015). As imagens mentais são necessárias e, fundamentais para a compreensão dos fenômenos estudados, visto que não é possível a resolução de problemas sem que o estudante consiga construir imagens mentais (RAMOS, 2015). O ganho de competência representacional foi marcante na nossa pesquisa. Muitos estudantes adquiriram essa competência. Após a modelagem muitos estudantes passaram a usar um raciocínio diferente, ou seja, mais próximos do conceito científico. Conforme Ramos (2015), também entendemos que o domínio de um determinado

conceito ou campo conceitual é algo que requer tempo. Um curso de modelagem de 10 horas não é suficiente para contribuir para que esses estudantes possam adquirir domínio em relação aos conceitos abordados. Mas de acordo com Ramos (2015), é possível fazer com que esses estudantes tomem conhecimento de que existem diferentes formas de resolver problemas químicos, assim como, representações diferentes que podem ser usadas quando necessário. Nesse contexto de aprendizagem, novos *drivers* de natureza hipercultural foram desenvolvidos para permitir esse processo de mediação e, com isso, a estrutura cognitiva dos estudantes foi modificada. De acordo com a TMC, a aquisição de conhecimentos ocorre quando novos *drivers* são criados, a partir de um processo piagetiano de equilíbrio (SOUZA, 2004). Já para Ramos (2015), a aprendizagem se dá pelo ganho de competência representacional que permite a resolução de problemas. Conforme Ramos (2015), os estudantes partiram dos seus conhecimentos tácitos e construíram um ganho de competência por meio da aquisição de novas representações e *drivers*.

No que se refere a investigação de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem podemos citar em um primeiro plano o aluno W com ganhos de visualização e modelagem molecular na estrutura 3D da molécula da amônia, na geometria molecular e polaridade na molécula da amônia. Além, do entendimento do tópico mapa de potencial eletrostático quando o aluno cita: “essa acho que seja a que o software, seja mais fundamental para conseguir entender o conteúdo. Ele é relevante mesmo.” O aluno se referia a concepção de como um radical (eletrófilo) mudará o comportamento da molécula na reação da SAE. Os alunos GH, CB e MT com ganhos na visualização e na modelagem molecular na representação 3D da molécula da amônia. Já na geometria molecular e polaridade os alunos GH e MT. Em se tratando da aluna V e do aluno GH, os mesmos inicialmente não tinham (sabiam) sobre o mapa de potencial eletrostático, e após a mediação com o *software* de modelagem molecular passaram a ter ganhos em relação à habilidade visuoespacial. Por fim, o *expert*, somente com a mediação cultural no pré-teste e no pós-teste em todas as categorias. Desse modo, concluímos que o objetivo geral, os específicos foram atingidos, e o problema de pesquisa alcançado por um aluno, ou seja, o aluno W.

Em relação às semelhanças encontradas como os alunos enxergam o átomo, ligações químicas, parte de uma molécula e planos e nuvem eletrônica, obtivemos resultados semelhantes à pesquisa de Ramos (2015). No quesito átomo, os alunos

enxergaram o átomo em forma de concha e bola. Uma exceção foi a representação do átomo por uma borracha e uma caneta. No que se refere as ligações químicas, os gestos eram, por norma, de cunho cultural, pois a maioria dos gestos remeteu à representação de palitos. Já 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 os estudantes precisaram descrever partes da molécula e a existência de planos, os estudantes utilizaram as mesmas gesticulações descritivos que utilizaram para descrever os átomos e as ligações. De modo geral, os estudantes preferem utilizar representações mais simples para átomos, ou seja, símbolos químicos. A representação de bolas e palitos, de fato, caracteriza-se como mais complexas de ser utilizada, pois esta representação requer utilizar 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 (RAMOS, 2015). Em relação aos gestos produzidos para representar a polaridade e a nuvem eletrônica, observamos que no trabalho da pesquisadora Adriana Ramos na maior parte das representações para elétrons livres os estudantes utilizaram a representação na forma de dois pontos, e com ambas as mãos para mostrar a distribuição homogênea das cargas. Já na nossa pesquisa os alunos alguns alunos também utilizaram a representação de ponto, o formato das duas mãos na forma de esfera, a representação com dois dedos e na forma de concha com os dedos mais afastados.

Desse modo, após dois anos imersos nessa pesquisa, é chegada a hora de tentarmos contribuir com o debate da área de Educação Química, isto é, 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 por alguns alunos, e, por fim, a possibilidade de desenvolvimento de processos de pensamento de ordem mais elevada, ou seja, as atividades de modelagem molecular, por exemplo, o conteúdo geometria molecular, têm a mediação cultural muito forte, ou seja, são atividades corriqueiras e o aluno se vê confrontado com esses conteúdos muito cedo, e as demais categorias não são tão corriqueiras, exigindo aulas mais elaboradas por parte do professor e tempo adequado para a explanação do conteúdo, como, por exemplo, o conteúdo sobre

Mapa de Potencial Eletrostático. No entanto, existem alguns problemas que igualmente apontamos, como, por exemplo: questões relativas às dificuldades de transposição didática por parte dos docentes; o desenvolvimento de objetos de aprendizagem (roteiros de modelagem) que deem conta dos objetivos didáticos; o manuseio e capacidade de utilização do *software* de modelagem por parte do docente, e por fim, questões técnicas, tais como, aquisição de licenças, e infraestrutura de informática. Em relação ao *software* Arguslab, podemos citar a sua eficiência em termos de visualização e modelagem, de acordo a colocação do aluno

W:

W:[...] “É, aquele mapa coloridinho aí que fica para a gente ter essa orientação, de se o radical que tu colocaste é um ativador ou desativador que consegue se orientar por esse mapa.

P: Então, esse mapa, te ajudou bastante?

W: Sim. Até porque, assim, se não for fazer assim, tem que decorar mesmo né. Ainda não entendi outra forma sem decorar ou consultar no *software*.

P: Então, (isso tudo), a modelagem te ajudou foi bastante útil?

W: [...] “essa eu acho que tenha sido bastante coisa do *software* foi bastante útil. Mas essa, acho que foi a coisa que foi mais necessária, assim, para tu explicar, sem o *software* fica bem mais puxado. Para se ter essa concepção de um radical vai mudar o comportamento da molécula com uma ramificação, sabe. Assim, eu acho que com o *software*, talvez das aplicações que a gente tem usado, todas foram boas, não é? Mas essa eu acho que seja a que o *software* seja mais fundamental para conseguir entender o conteúdo. Ele é relevante mesmo.”

Entretanto, salientamos que tivemos dificuldades iniciais no que se refere ao manuseio de alguns comandos. Professores e alunos podem utilizar o *software*, sendo de relevante importância o conhecimento e domínio sobre suas ferramentas para poder ser manuseado da melhor maneira possível. Para o nosso estudo de modelagem molecular, o *software* foi de suma importância para a pesquisa e consideramos que a sua utilização plenamente satisfatória.

Importante salientar que tanto os alunos do experimento piloto quanto os do experimento definitivo tiveram problemas nas aulas curriculares em relação ao currículo não cumprido, tempo reduzido, aprendizado em duas dimensões, e na condição curricular atual não há uma proposta que gere aos alunos o desenvolvimento de habilidades visuoespaciais. Desse modo, com base nos experimentos que realizamos com os estudantes do nível da educação básica, constatamos que os resultados mostraram que esses estudantes conseguiram interagir com as informações apresentadas na interface gráfica do programa a ponto de terem

conseguido produzir conhecimento por mediação com a interação computacional. Sendo assim, os estudantes interagindo com essa poderosa ferramenta, criaram representações mentais que os comunicam adequadamente com essa ferramenta, os mesmos estão amadurecendo tanto em competência representacional quanto na competência do uso dessa ferramenta.

Concluindo, acreditamos que a nossa proposta envolvendo a utilização do *software* Arguslab por meio de um experimento didático proporcionou aos alunos o desenvolvimento de habilidades visuoespaciais. Dessa maneira, defendemos sua inserção em um ambiente de aprendizagem porque possui grandes potencialidades para o ensino na área de Ciência da Natureza. A importância do uso dessas ferramentas no aprendizado dos estudantes já está comprovada de forma inequívoca. O que nos cabe agora, enquanto pesquisadores da área e entendendo haver dificuldades dos professores em lidar com tecnologias, é apresentar soluções e proposta de unidades didáticas, por exemplo, para o ensino de tópicos específicos. Sendo assim, essa é a nossa tarefa. Muitas pesquisas já mostraram as potencialidades, ou seja, que é possível, e agora, precisamos mostrar como fazer para tentar tirar os professores de sua zona de conforto. Acreditamos que a sequência desse trabalho pode ser o estudo e apresentação de unidades didáticas.

REFERENCIAIS

ALLINGER, N. et al. **Química Orgânica**. 2.ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1996.

ANJOS, J.; SERRANO, A. Desenvolvimento e aplicações de um espectrofotômetro de baixo custo para o ensino de física. **4º Encontro ULBRA de bolsistas CNPq e FAPERGS**. Canoas, 2018. Disponível em: <<http://www.eventos.ulbra.br/index.php/eucf/eucf4/paper/viewFile/3548/1916>>. Acesso em: 7 out. 2020.

ANJOS, R. J. **Utilização de atividades investigativas para o ensino de conceitos de luz e cor em Física**. 163 f. Dissertação (Mestrado) - Ensino de Ciências e Matemática, Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2022.

ARELLANO, C. R. TOWNS, M. H. Students understanding of alkyl halide reactions in undergraduate organic chemistry. **Chemistry Education Research and Practice**, 15(4): 2014.

BARDIN, Laurence. **Análise de conteúdo**. 1.ed. Lisboa: Edições 70, 2015.

BATISTA, C. G.; LIMA, R. A.; CRISÓTOMO, S. C. L. et al. *Software* Para o Ensino de Química. **Chemsketch um Poderoso Recurso Didático**, 5(1): nov. 2016.

BATISTA, C. G.; MARINHO, M. E.; MARINHO, M. M. et. al. Avogadro no Ensino de Química: Um Avançado Editor Molecular de Visualização de Um Grande Potencial Pedagógico. **XXIII Seminário Internacional de Educação, Tecnologia e Sociedade. Faccat**, Taquara, 2018. Disponível em: <<https://www2.faccat.br/portal/?q=node/3775>>. Acesso em: 2 mai. 2020.

BATISTA, G. C.; MARINHO E. S.; MARINHO M. M. *Software* Arguslab: um recurso didático para o ensino de química. **Revista Redin**, 6 (1): 1-11, 2017.

BEST, K. T., LI, D.; HEIM, E. D. Molecular Modeling of an Electrophilic Addition Reaction with “unexpected” Regiochemistry. **Journal of Chemical Education**, 94 (7): 936-40, 2017.

BOX, V. G. S. Computer Assisted Molecular Modeling Exercises for Undergraduates. **Journal of Chemical Education**, 70 (10): 236-7, 1993.

BRASIL. **Parâmetros Curriculares Nacionais**. Ciências da Natureza e Matemática e suas Tecnologias. Brasília: MEC, 2000.

BRIAN, J. E.; BLOCK, B. S. VSEPR-Plus: Correct Molecular and Electronic Structures Can Lead to Better Student Conceptual Models. **Journal of Chemical Education**, 96 (1): 75-81, 2018.

CASANOVA, J. Computer-based Molecular Modeling in the Curriculum. **Journal of Chemical Education**, 70 (11): 904-9, 1993.

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

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

CLEMENT, J. J.; STEPHENS, A. L. Documenting the use of expert scientific reasoning process by high school physics students. **Physics Education Research**, 6 (2): 20122-1-20122-15, 2010.

CLIFFORD, M., DANIEL, P. J., DAVIS, E. L., HOOVIS, P. T., HAMMOND, A. K., McDOUGAL, WARNER, D. L. Modeling SN2 and E2 Reaction Pathways and Other Computational Exercises in the Undergraduate Organic Chemistry Laboratory. **Journal Chemical Education**. V. 90, n.9, p. 1235 – 1238, 2013.

CORRADI, D.; ELEN, J.; CLAREBOUT, G. Understanding and Enhancing the Use of Multiple External Representations in Chemistry Education. **Journal of Science Education and Technology**, 21: 780-95, 2012.

DASS, K.; HEAD, M. L.; RUHSNTON, G. T. Building an Understanding of How Model-Based Inquiry Is Implemented in the High School Chemistry Classroom. **Journal Chemical Education**, 92 (8): 1306-14, 2015.

DE SÁ FILHO, P.; CASTIONI, R. Smartphones no processo educacional: Propondo possibilidades. **Informática na Educação: teoria e prática**, 24 (2): 2021.

DISPONÍVEL em:

http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab_files/arguslab.zip.

DISPONÍVEL em: <<https://avogadro.cc/>>. Acesso em: 28 jan. 2020.

_____: <http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html>. Acesso em: 20 jan. 2020.

ERICKSON, F. Qualitative Methods in Research on Teaching. In: WITTROCK, M. C. Handbook of Research on Teaching. **Macmillan Publishing Company**, (3): 119-61, 1986.

FERREIRA, C. R.; ARROIO, A. O uso de visualizações no Ensino de Química: a formação inicial do professor de Química. **Revista Brasileira de Ensino de Química**, 4 (2): 31-42, 2009 (a).

_____; _____. Teacher's educational and the use of visualization in chemistry instruction. **Problems of Education in the 21st Century**, 16: 48-53, 2009 (b).

FERREIRA, C.; ARROIO, A.; REZENDE, B. D. Uso de Modelagem Molecular no Estudo dos Conceitos de Nucleofilicidade e Basicidade. **Revista Química Nova**, 34 (9): 1661-1665, 2011.

FILGUEIRAS, C. A Espectroscopia e a Química. **Química Nova na Escola**, 1996.

FONSECA, M. R. M. **Química (Ensino Médio)**. São Paulo: Ática, 2013.

FREITAS, L. C. G. Prêmio Nobel de Química 1998. **Química Nova na Escola**, 1 (8): 3-6, 1998.

FREITAS, S. A. **Um estudo da utilização didática de ferramentas de cognição extra cerebrais por estudantes do ensino fundamental do modelo do átomo de Bohr**. 162 f. Dissertação (Mestrado) - Ensino de Ciências e Matemática, Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2019.

GIL, A. C. **Métodos e Técnicas de Pesquisa Social**. 7.ed. São Paulo: Atlas, 2019.

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

GOMES, M. S. S. O.; FILHO, J. D. M. L. Simulações e modelos computacionais aplicados ao ensino de química. **VII Congresso Norte Nordeste de Pesquisa e Inovação**, 19 a 21 de outubro de 2012.

GRASEL, S. F. **Investigação da Interação de Ligantes Fluorescentes Derivados de Benzazóis Com B-DNA Por Docking e Dinâmica Molecular**. 102 f. Tese (Doutorado) – Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2013.

HOLMES, J. L. Molecular Modeling. **Journal of Chemical Education**, 76 (6): 871-2, 1999.

JONHSTONE, A. H. Why is Science difficult to learn? Things are seldom what they seem. **Journal of Computer Assisted Learning**, 7: 701-3, 1991.

LEVY, D. How Dynamic Visualization Technology can Support Molecular Reasoning. **Journal of Science Education and Technology**, 22: 702-17, 2012.

MANTOVANI, L. V. **Visualização e Modelagem no Ensino de Química Orgânica: a visão de professores em um curso de formação continuada**. 148 f. (Dissertação) – Mestrado – Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química, Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

MARTIN, C. B.; VANDEHOEF, C.; COOK, A. The Use of Molecular Modeling as “Pseudoexperimental” Data for Teaching VSEPR as a Hands-On General Chemistry Activity. **Journal of Chemical Education**, 92(8): 1364-68, 2015.

MATHEWSON, J. H. **Visual-Spatial Thinking: Na Aspecto f Science Overlooked by Educators**. Hoboken, Science Education, v. 83, n.1, p. 33-54, 1998.

Mc MURRY, J. **Química Orgânica**. 6.ed. São Paulo: Cengage Learning, 2005.

MIORELLI, J.; CASTER, A.; EBERHART, M. E. Using computational visualizations of the charge density to guide first-year chemistry students through the chemical bond. **Journal of Chemical Education**, 94 (1): 67-71, 2017.

MONAGHAN, J. M.; CLEMENT, J. Use of a computer simulation to develop mental simulations for understanding relative motion concepts. **International Journal of Science Education**, 21 (9): 921-44, 1999.

MONTEIRO, K. V. N.; FIRME, C. L. Teaching Thermodynamic, Geometric and Electronic Aspects of Diels – Alder Cycloadditions by Using Computational Chemistry – An Undergraduate Experiment. **World Journal of Chemical Education**, 3 (6): 141-9, 2015.

MOREIRA, M. A. **Teorias de Aprendizagem**. São Paulo: E.P.U, 2015.

_____. **Unidades de ensino potencialmente significativos** – UEPS Porto Alegre, Instituto de Física da UFRGS, 2011.

MORGON, N. H. Computação em Química Teórica: informações técnicas. **Química Nova**, 24 (5): 676, 2001.

_____; COUTINHO, C. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. São Paulo: Livraria da Física, 2007.

MORRISON, R.; BOYD, R. **Química Orgânica**. 13.ed. Lisboa: Calouste, 1996.

O'DWYER, A.; CHILDS, P. Organic chemistry in action! developing an intervention program for introductory organic chemistry to improve learners understanding, interest, and attitudes. **Journal Chemical Education**, 9 (7): 987-93, 2014.

OCHTERSKI, J. W. Using Computational Chemistry Activities To Promote Learning and Retention in a Secondary School General Chemistry Setting. **Journal Chemical Education**, 91 (6): 817-22, 2014.

PESSOA JÚNIOR, O. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, n. 7, dez. 2007.

RAMOS, A. F.; SERRANO, A. Uma proposta para o ensino de estereoquímica cis/trans a partir de uma Unidade Potencialmente Significativa (UEPS) e do uso de Modelagem Molecular. **Experiência em Ensino de Ciências**, 10 (3), 94-106, 2015.

_____. **Estudo da influência da utilização de software de modelagem molecular no processo de aprendizagem de conceitos químicos por estudantes do Ensino Médio e Superior**. 2015. 207 f. Tese (Doutorado em Ensino de Ciências e Matemática), Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2015.

_____. **Estudo do Processo de Internalização de Conceitos de Química Utilizando Software de Modelagem Molecular: Uma proposta para o ensino médio e superior**. 2015. 230 f. Tese (Doutorado - Ensino de Ciências e Matemática), Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2015.

_____; ANDRADE NETO, A. S. 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, 2013.

RAUPP, D.; MOREIRA, M. A.; SERRANO, A. Desenvolvendo Habilidades Visuoespaciais: uso de *software* de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica em química. **Experiências em Ensino de Ciências**, 4 (1): 65–78, 2009.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em química. **Rev. Liberato**, 9 (12): 13-22, 2008.

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.

RAYAN, B.; RAYAN, A. Avogadro Program for Chemistry Education: To What Extent can Molecular Visualization and Three-dimensional Simulations Enhance. **World Journal of Chemical Education**, 5 (4): 136-41, 2017.

ROCHA, William. Interações Intermoleculares. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, n. 4, mai. 2001.

RODENBOUGH, P. P.; MANYILIZU, M. C. Developing and Piloting Culturally Relevant Chemistry Pedagogy: Computer-Based VSEPR and Unit Cell Lesson Plans from Collaborative Exchange in East Africa. **Journal of Chemical Education**, 96 (6): 1273-77, 2019.

RODRIGUES, C. R. Modelagem Molecular. Química Nova na Escola. **Cadernos Temáticos**, n. 3, mai. 2001.

RODRIGUES, R. B. **Novas Tecnologias da Informação e da Comunicação**. Recife: IFPE, 2016.

RUDDICK, K. R.; PARRILL, A. L.; PETERSEN, R. L. Introductory molecular orbital theory: An honors general chemistry computational lab as implemented using three-dimensional modeling *software*. **Journal of Chemical Education**, 89 (11): 1358-63, 2012.

SANTOS, D. O.; WARTHA, E. J.; FILHO, J. C. S. *Softwares* educativos livres para o Ensino de Química: Análise e Categorização. **XV Encontro Nacional de Ensino de Química (XV ENEQ)**, Brasília, 21 a 24 de julho de 2010.

SANTOS, F. H. O Conceito de Modelagem Molecular. **Cadernos temáticos de Química Nova na Escola**, n. 4, mai. 2001.

SEABRA, R.; SANTOS, E. Proposta de desenvolvimento da habilidade de visualização espacial através de sistemas estereópicos. 4º Congresso Nacional y Iro. Internacional Rosario, Argentina – octubre de 2004.

SILVEIRA, Gustavo Pozza. **IQ UFRGS – Adição Eletrofílica Aromática**. Disponível em: <<http://web.iq.ufrgs.br/biolab/images/courses/Aula-02-Nivelamento---SEAr.pdf>>.

SMETANA, L. K.; BELL, R. L. Which setting to choose: Comparison of whole-class vs. small-group computer simulation use. **Journal of Science Education and Technology**, 23 (4): 481-95, 2013.

SOLOMONS, T. W. G. **Química Orgânica**. 7.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.

SOUZA, B. C. **A Teoria da Mediação Cognitiva**. Recife: Editora da UFPE, 2006.

SOUZA, B. C. **A Teoria da Mediação Cognitiva: os impactos cognitivos da Hipercultura e da mediação digital**. 2004. 282 f. Tese (Doutorado em Psicologia), Centro de Filosofia e Ciências Humanas, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2004.

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.

SOUZA, M. G. Das transformações de Galileu a Lorentz: compreendendo as simulações mentais e concepções de estudantes do ensino médio sobre relatividade especial. **Dissertação** (Mestrado - Ensino de Ciências e Matemática), Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2015.

SOUZA, M. P.; SANTOS, N.; MERÇON, F.; et al. Desenvolvimento e Aplicação de um *Software* como Ferramenta Motivadora no Processo Ensino-Aprendizagem de Química. In: XV Simpósio Brasileiro de Informática na Educação. **Anais** Manaus, 2004.

SPRINGER, M. T. Improving students' understanding of molecular structure through broad-based use of computer models in the undergraduate organic chemistry lecture. **Journal Chemical Education**, 91(8): 1162-68, 2014.

STEPHENS, A. L.; CLEMENT, J. J. Use of physics simulations in whole class and small group settings: Comparative case studies. **Computers & Education**, 86 (86): 137-56, 2015.

STEPHENS, A. L.; CLMENT, J. J. Documenting the use of expert scientific reasoning process by high school physics students. **Physics Education Research**, 6, (2): 20122– 1-20122–15, 2010.

TREVISAN, R. **Um Estudo da Relação entre as Imagens Mentais Utilizadas por Estudantes de Mecânica Quântica e seu Perfil Epistemológico: uma investigação pela metodologia Report Aloud**. 2016, 170 f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática), Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2016.

_____; ANDRADE NETO, A. S. Uma construção do Perfil Epistemológico de licenciandos em Física acerca da dualidade onda-partícula em Mecânica Quântica, após o uso de bancadas virtuais: um estudo a partir do discurso gestual e verbal. **RENOTE: Revista Novas Tecnologias na Educação**, 14: 1, 2016.

_____ ; SERRANO, A. Investigating the Drivers and Mental Representations of the Private Interpretations of Students of Quantum Mechanics. **Acta Scientiae**, 20 (4): 2018.

_____ ; _____ ; WOLFF, J. F. S. et al. Peeking into their mental imagery: The Report Aloud technique in science education research. **Ciência e Educação**, 25 (3): 647-64, 2019.

WOLFF, J. F. S. **As modificações de *drivers* prévios através da utilização de simulações computacionais: aprendizagem significativa dos conceitos de colisões verificadas através da análise das imagens mentais de estudantes universitários**. 2015. 260 f. Tese (Doutorado em Ensino de Ciências e Matemática), Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, Universidade Luterana do Brasil, Canoas, 2015.

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: The Official Journal of the National Association for Research in Science Teaching**, 38 (7): 821-42, 2001.

ZDANOVSKAIA, M. A.; SCHWARCZ, C. E., HABIB, A. D.; Hill, J. N. Access to Computational Chemistry for Community Colleges via WebMO. **Journal of Chemical Education**, 95 (11): 1960-65, 2018.

APÊNDICES

APÊNDICE A - Pré-teste e Pós-teste Experimento Piloto 1



Questões do Pré-teste e Pós-teste

Objetivo: Validação do roteiro

Assunto: Reação de Substituição Eletrofilica Aromática

Data:

Nome do aluno:

Observação: responda às questões sem consultar qualquer material, e caso não saiba responder coloque o motivo. Por exemplo: não tive este conteúdo e não sei responder; tive o conteúdo e não lembro mais como responder.

1) Qual ou quais grupos abaixo são eletrófilos?

() NH_4^+ ; Cl^- ; NO_2^+ ; Br^+

() Br^+ ; OH^- ; H^+ ; CH_3^+

() CH_3^+ ; H^+ ; Cl^+ ; NO_2^+

() Cl^- ; Br^- ; OH^- ; I^-

2) Relacione as colunas para grupo ativador (orientador *meta* e *para*) e grupo desativador (orientador *meta*)?

a) NH_3 ; $-\text{CH}_3$; $-\text{OCH}_3$; $-\text{OH}$

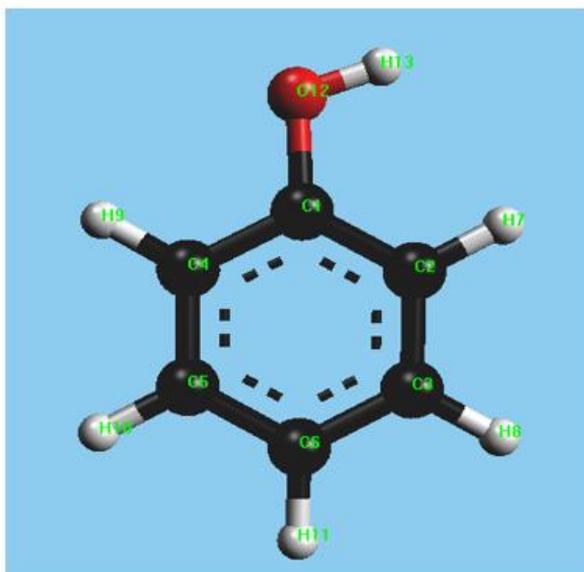
b) $-\text{CO}$; $-\text{CN}$; $-\text{NO}_2$; $-\text{COOH}$

() São os que orientam as substituições nas posições 3 e 5 em relação a eles, posição conhecida como *meta*

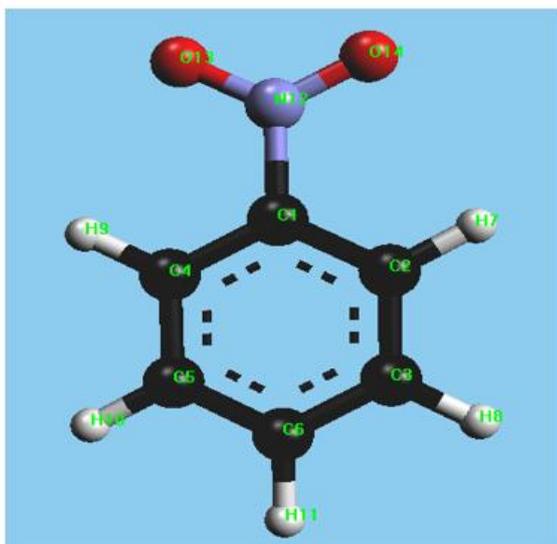
() São os substituintes que orientam as substituições nas posições 2, 4 e 6 em relação a eles, conhecidas como posições *orto* e *para*.

3) Considere uma molécula com anel aromático (Benzeno) e um grupo genérico ligado ao anel. Ao reagir à molécula com um eletrófilo (E^+), qual às orientações possíveis do eletrófilo no anel? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.

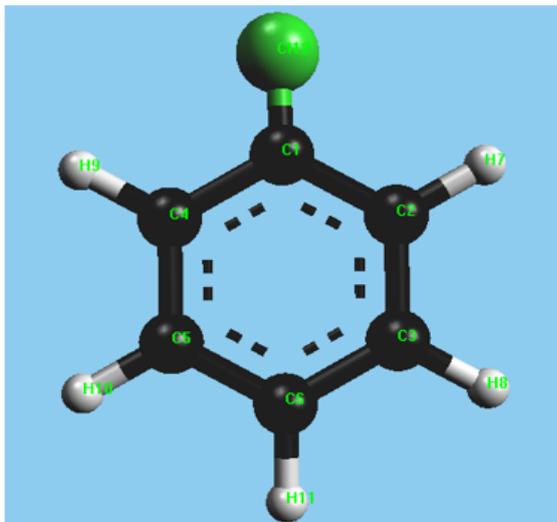
- 4) Com relação à molécula do Fenol, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.



- 5) Com relação à molécula do Nitrobenzeno, ao reagir com o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.



- 6) Com relação à molécula do Clorobenzeno, ao reagir com o eletrófilo NO^+_2 (grupo nitro), qual a(s) possíveis orientações do grupo nitro no anel aromático? Identifique as posições abaixo escrevendo os seus nomes.



- 7) Em relação ao Mapa de Potencial Eletrostático de uma Molécula, marque a alternativa correta:
-) Mostra a distribuição tridimensional de carga elétrica na molécula
 -) Mostra a distribuição dos átomos na molécula
 -) Através do Mapa de Potencial Eletrostático podemos definir se uma molécula é neutra ou negativa
 -) Mostra a geometria molecular da molécula
- 8) Qual a finalidade do Potencial Eletrostático de uma molécula?
-) O Potencial Eletrostático mede a interação das ligações entre os átomos na molécula
 -) O Potencial Eletrostático mede a interação de uma carga positiva com núcleos e elétrons de uma molécula ao longo de uma superfície de densidade eletrônica
 -) O Potencial Eletrostático mede a interação núcleo – núcleo entre os átomos de uma molécula bem como a sua densidade eletrônica
 -) O Potencial Eletrostático mede a interação entre elétrons em uma molécula

APÊNDICE B - Pré-teste e Pós-teste Experimento Definitivo 2



Nome:

Data:

Observação: responda as questões sem consultar qualquer material, e caso não saiba responder deixe em branco.

1) Faça o desenho da molécula da amônia usando a representação 2D e 3D?

a) Representação 2D

b) Representação 3D

2) Represente a molécula da água e da amônia nas suas respectivas geometrias e responda se a molécula é polar ou apolar?

a) Representação da molécula da água



Tipo de geometria:

A molécula é:

() Molécula apolar

() Molécula polar

b) Representação da molécula da amônia



Tipo de Geometria:

A molécula é:

() Molécula apolar

() Molécula polar

3) Represente a molécula do Benzeno desenhando as duas representações com as ligações conjugadas e um desenho com as ligações duplas tracejadas. A molécula do Benzeno é aromática ou não-aromática?

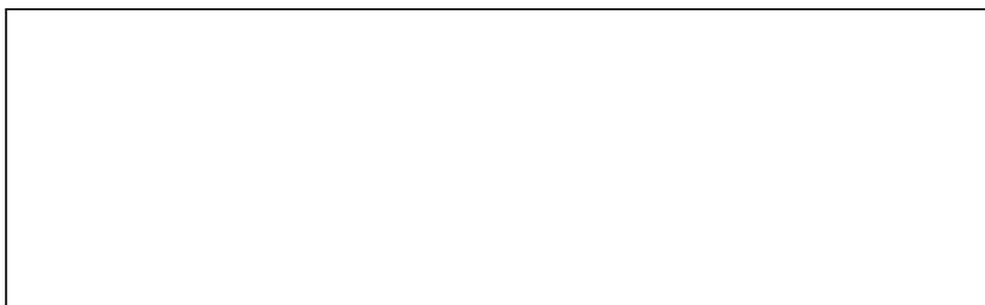
a) Ligações duplas conjugadas



b) Ligações duplas conjugadas



c) Ligação tracejada



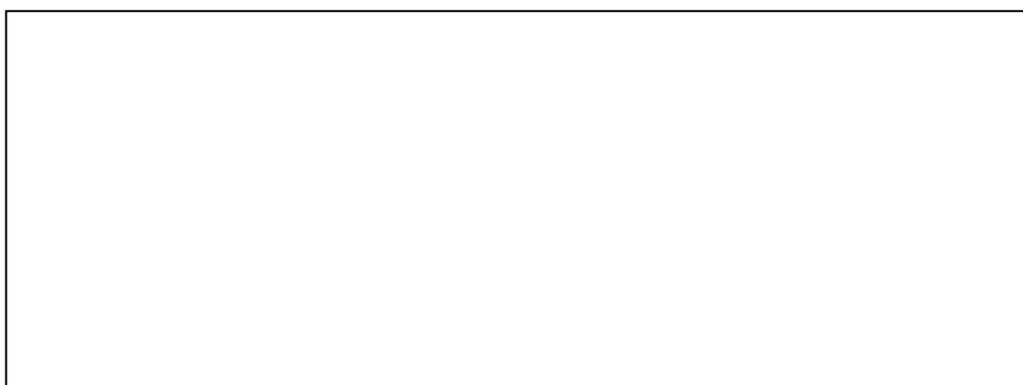
d) Molécula apolar ou polar? Justifique?



4) Qual a finalidade do Potencial Eletrostático de uma molécula?

- () O Mapa de Potencial Eletrostático mede a interação das ligações entre os átomos na molécula.
- () Mostra a distribuição tridimensional de carga elétrica na molécula. O potencial eletrostático mede a interação de uma carga positiva com núcleos e elétrons de uma molécula ao longo de uma superfície de densidade eletrônica.
- () Define a geometria molecular da molécula.

5) Represente a molécula da água e esboce o Mapa de Potencial Eletrostático?



6) Qual dos grupos abaixo são eletrófilos?

- () NH_4^+ ; Cl^- ; NO_2^+ ; Br^+
 () Br^+ ; OH^- ; H^+ ; CH_3^+
 () CH_3^+ ; H^+ ; Cl^+ ; NO_2^+
 () Cl^- ; Br^- ; OH^- ; I^-

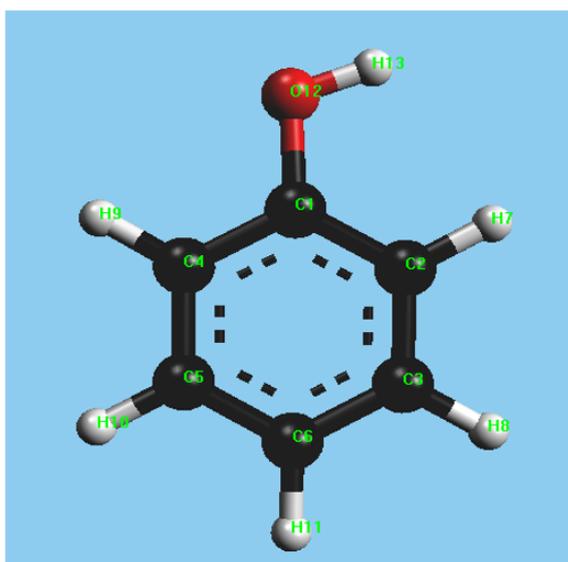
7) Relacione as colunas para grupo ativador (orientador *meta* e *para*) e grupo desativador (orientador *meta*)?

a) NH_3 ; $-\text{CH}_3$; $-\text{OCH}_3$; $-\text{OH}$

b) $-\text{CO}$; $-\text{CN}$; $-\text{NO}_2$; $-\text{COOH}$

- () São os que orientam as substituições nas posições 3 e 5 em relação a eles, posição conhecida como *meta*
 () São os substituintes que orientam as substituições nas posições 2, 4 e 6 em relação a eles, conhecidas como posições *orto* e *para*.

8) Com relação à molécula do Fenol, qual o nome da posição nos Carbonos 2, 3 e 6? Escreva o nome nos retângulos abaixo.



9) Represente a reação entre o eletrófilo NO_2^+ (grupo nitro) com os seguintes compostos: Fenol, Nitrobenzeno e Clorobenzeno. Forneça as estruturas dos reagentes, o eletrófilo e o(s) produtos da reação.

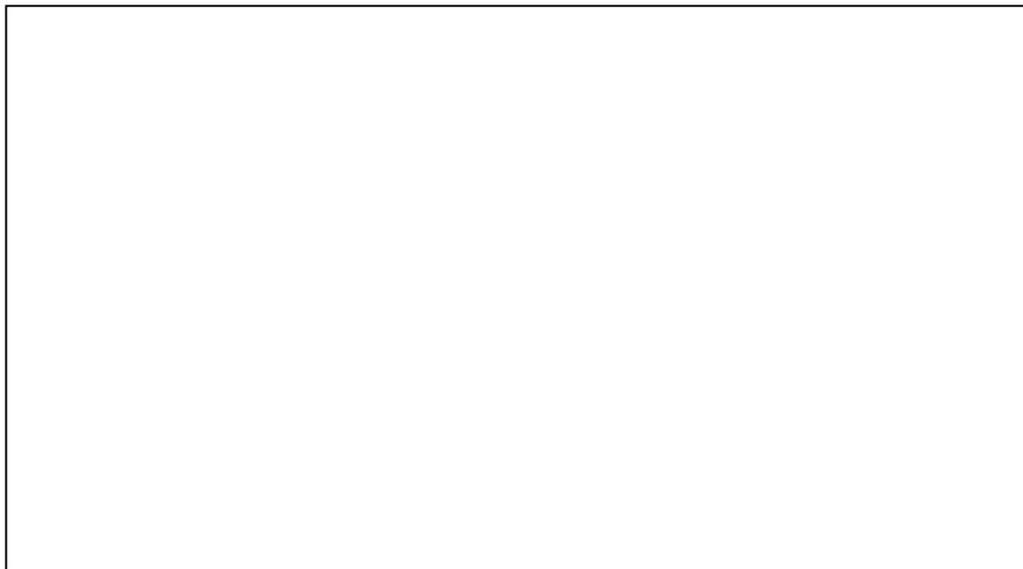
a) Fenol mais grupo nitro



b) Nitrobenzeno mais grupo nitro



c) Clorobenzeno mais grupo nitro



10) Escreva, no espaço abaixo, tudo que você sabe sobre modelagem molecular, como se estivesse explicando para um colega. Para tanto, utilize gráficos, tabelas, imagens, equações, tudo que você desejar.

APÊNDICE C - Iniciando Arguslab 3



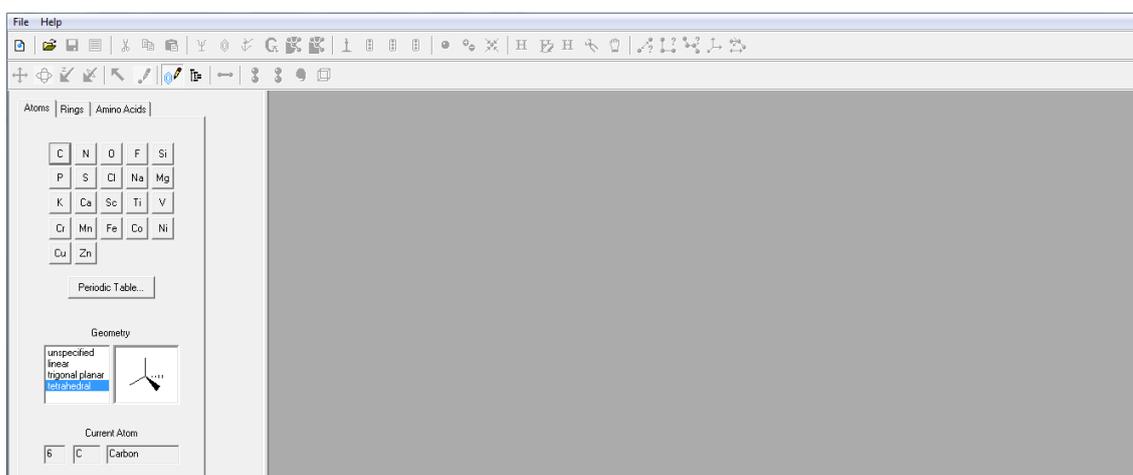
Nome:

Data:

Exercício 1

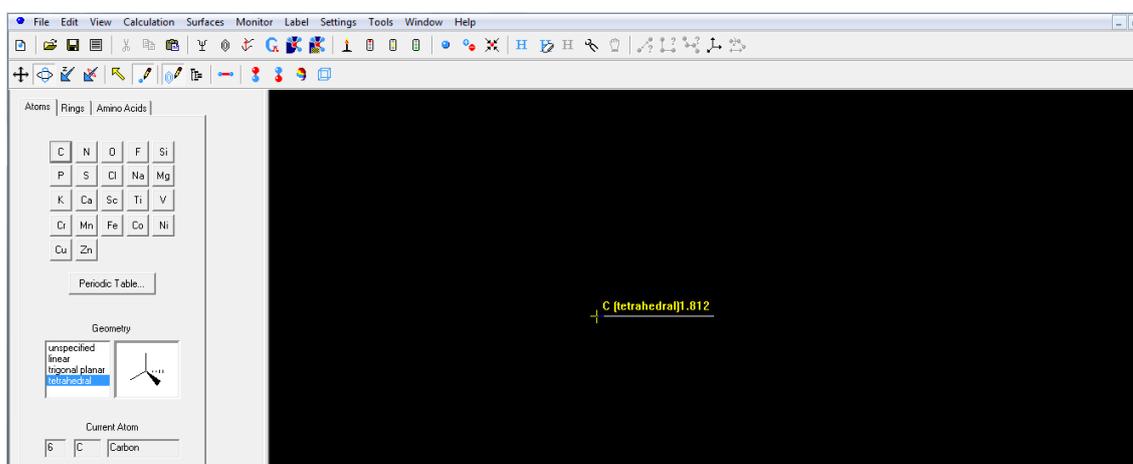
Iniciando o Arguslab

1) Tela inicial do Arguslab



2) Clicar na opção File na Barra de Menus

3) Clicar na opção New na Barra de Menus



4) Iniciar a construção da molécula.

Exercício 2

Como salvar um arquivo no Arguslab

- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Save As (salvar como)
- 2) Dê um nome para o arquivo, por exemplo, Água.agl
- 3) Escolha a pasta
- 4) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):

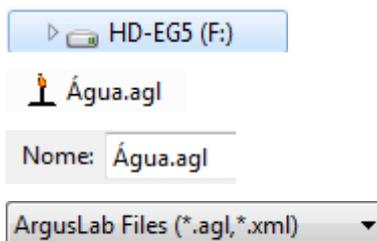
Nome:

Tipo:

Exercício 3

Como abrir um arquivo no Arguslab

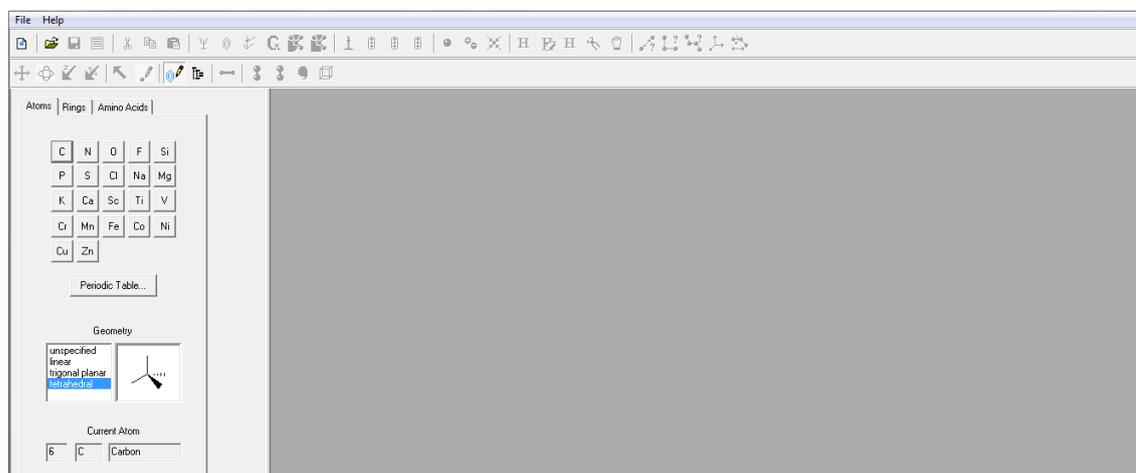
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open (abrir)
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



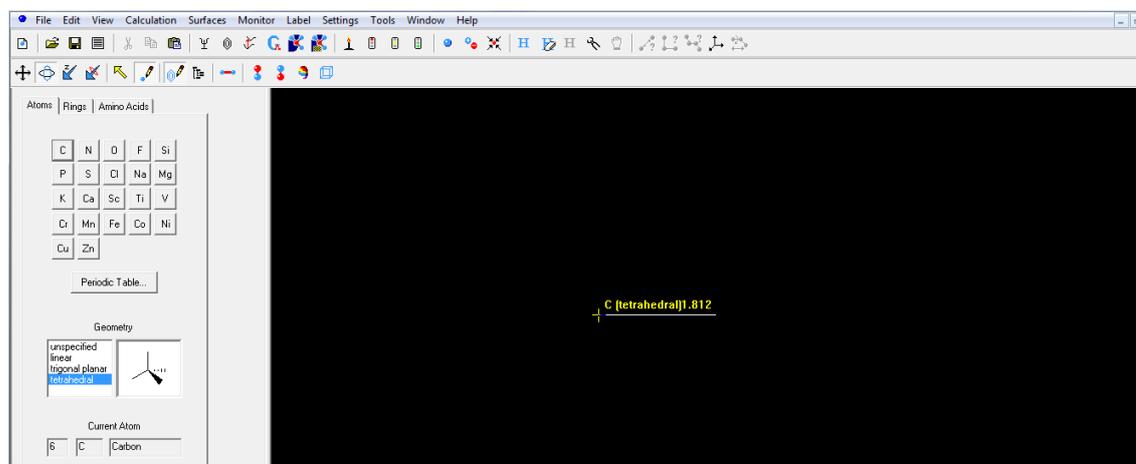
Exercício 4

Construindo a molécula da água no Arguslab

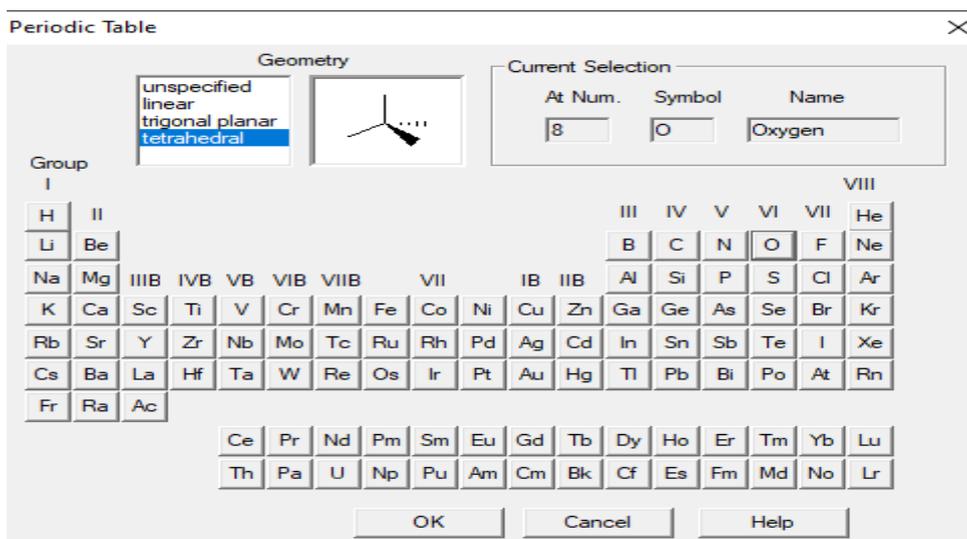
1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:



2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

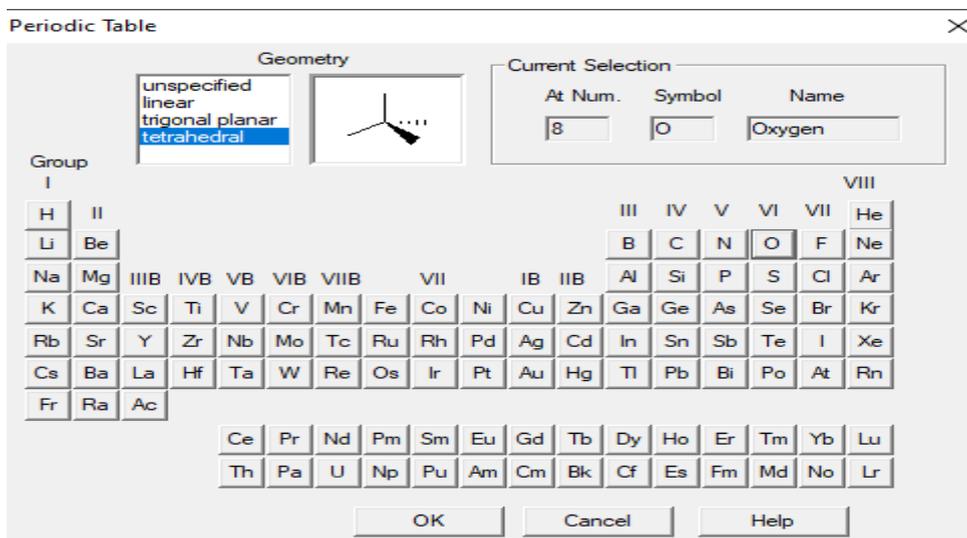


3) Clicar na opção Tabela Periódica:

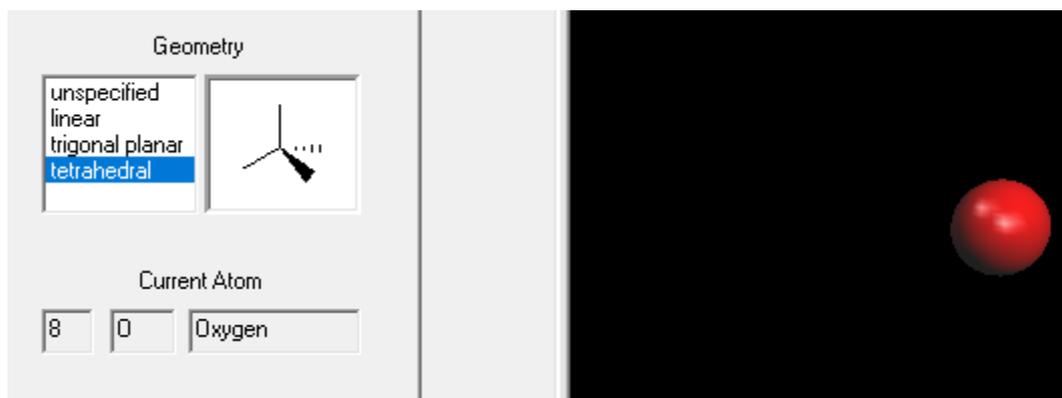


4) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas ou selecione Modo de Seleção no menu Editar. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

5) Na Tabela Periódica selecione o átomo de Oxigênio:



6) Clique em OK e após com o botão direito do mouse clique na tela:



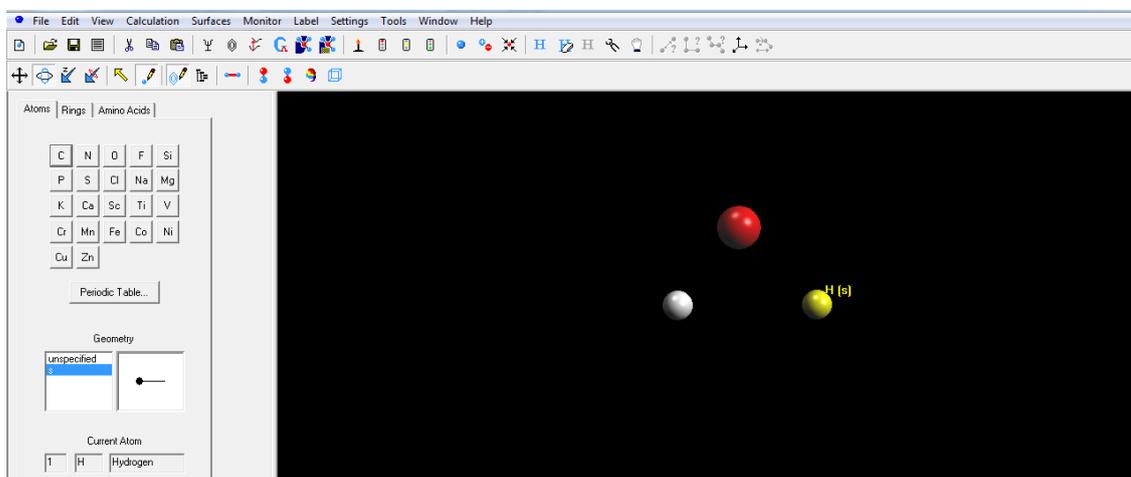
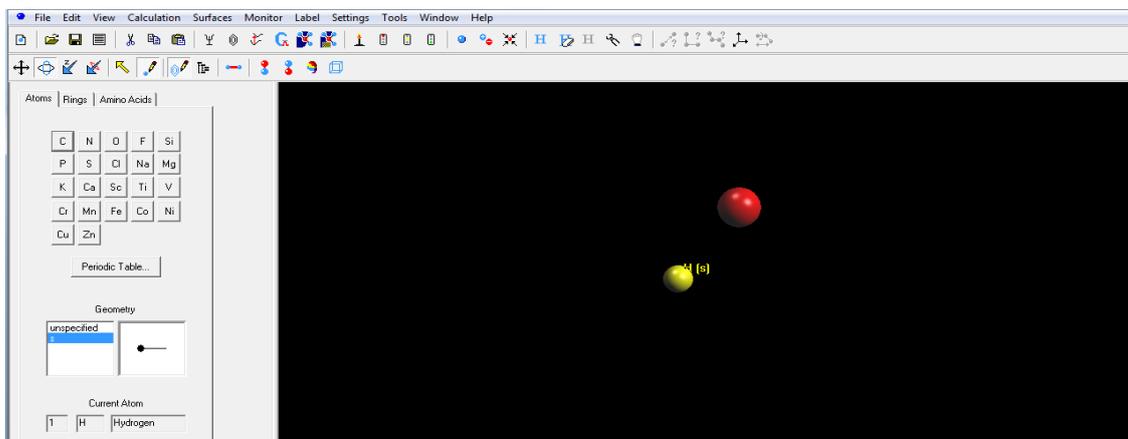
7) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas

8) Selecionar a Tabela Periódica

9) Selecionar o átomo de Hidrogênio

10) Clicar em OK

11) Com o botão direito do mouse e clique duas vezes na tela:

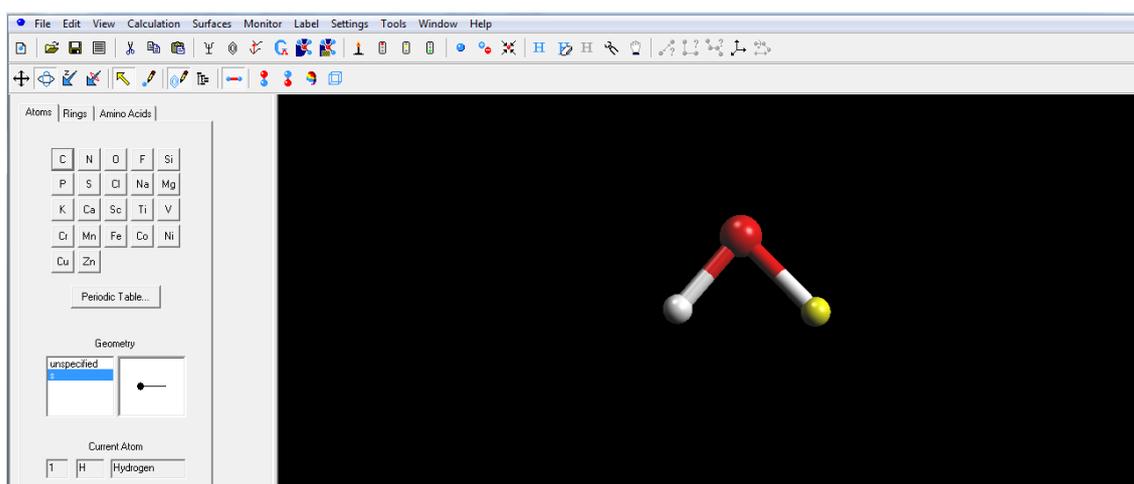
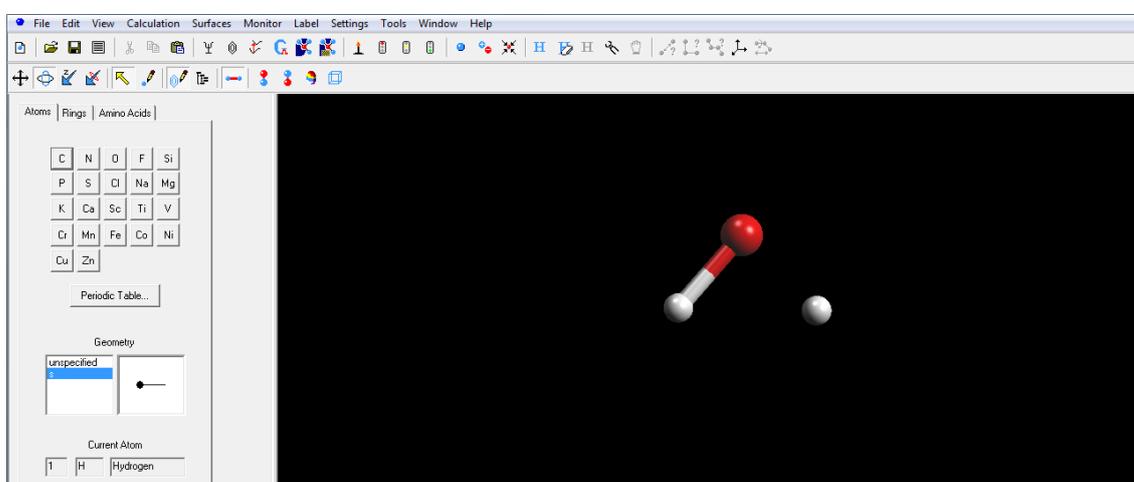


12) Assim temos os átomos que formam a molécula da água, um Oxigênio e dois Hidrogênios

13) Próximo passo é a adição das ligações químicas

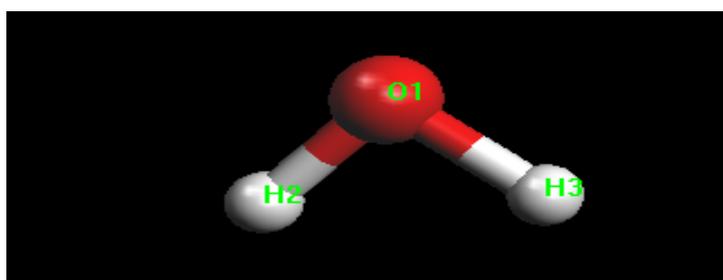
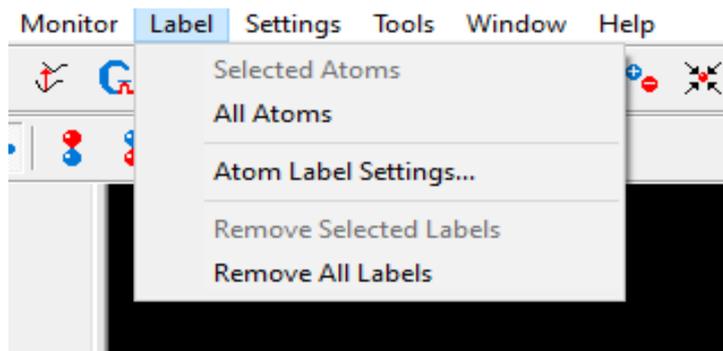
14) Adicionando Ligações Químicas com o botão esquerdo do mouse: clicar

com o botão esquerdo no átomo de Hidrogênio, selecionar a opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas e depois com o botão esquerdo clicar no átomo de Oxigênio. Após repetir o processo para o segundo átomo de Hidrogênio:

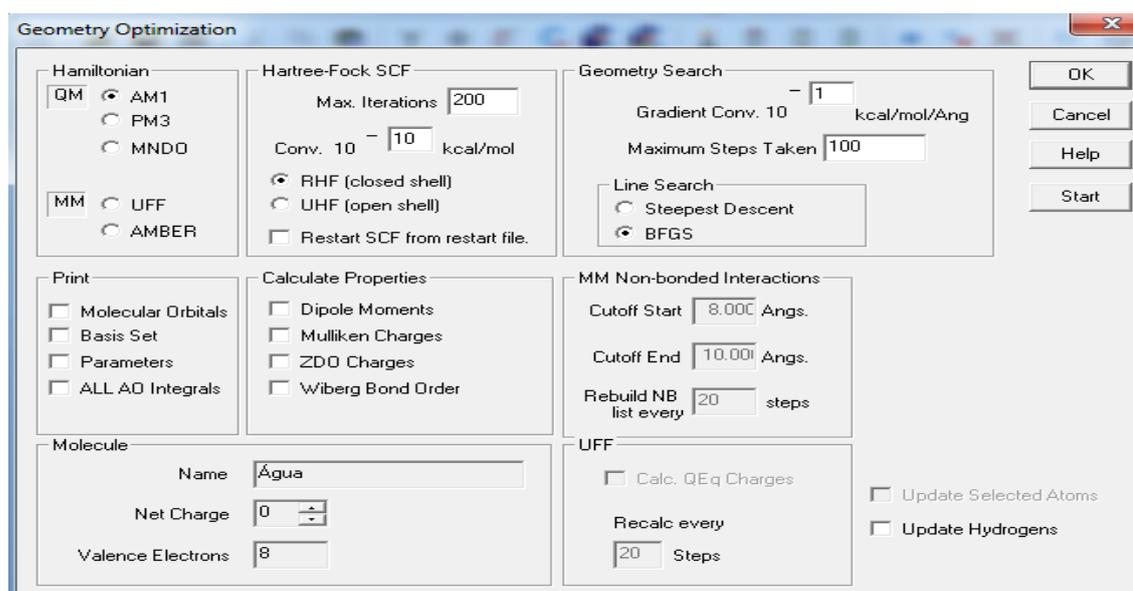


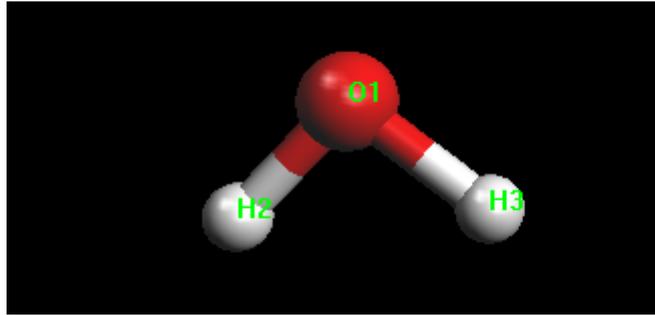
15) Salve o arquivo.

16) Selecione a opção Label no menu e clique em All Atoms:



- 17) Clique no botão otimizar geometria na Barra de Ferramentas  ou no menu Calculation. Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria:
- 18) Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1
- 19) Após clique em OK





20) Salve o arquivo.

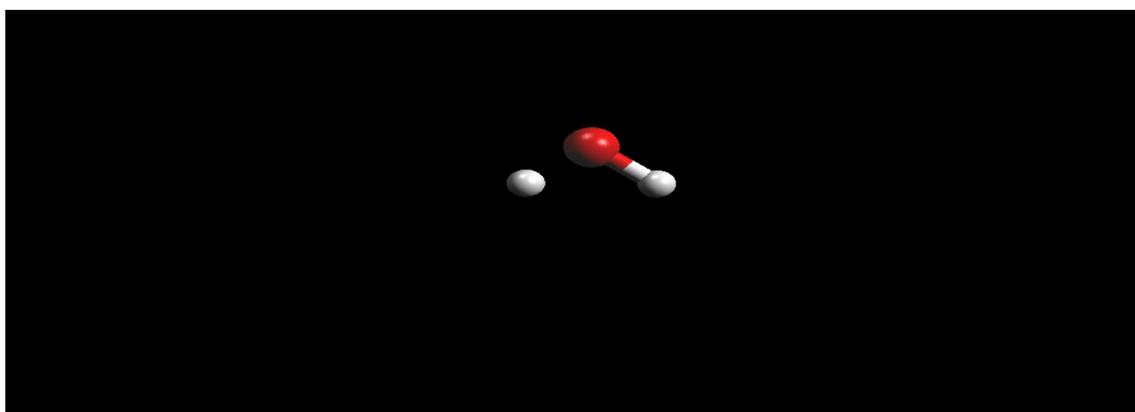
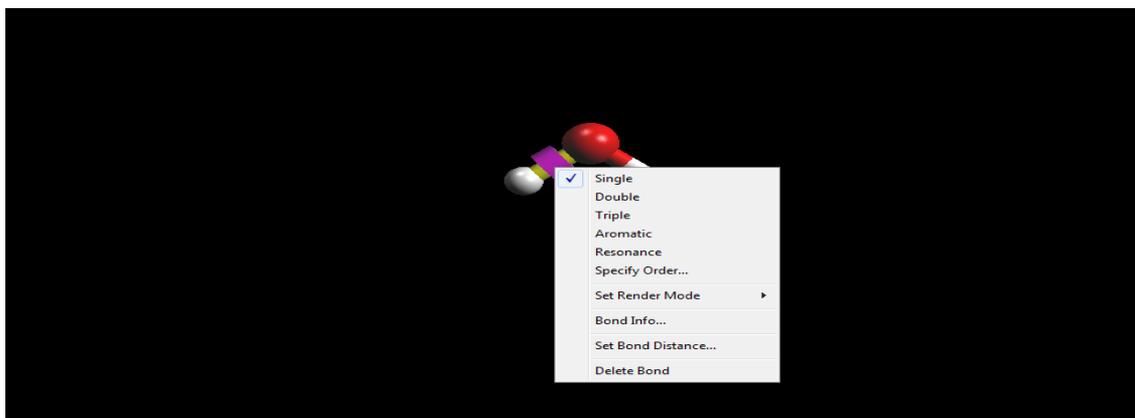
Exercício 5

Como deletar ligações no Arguslab

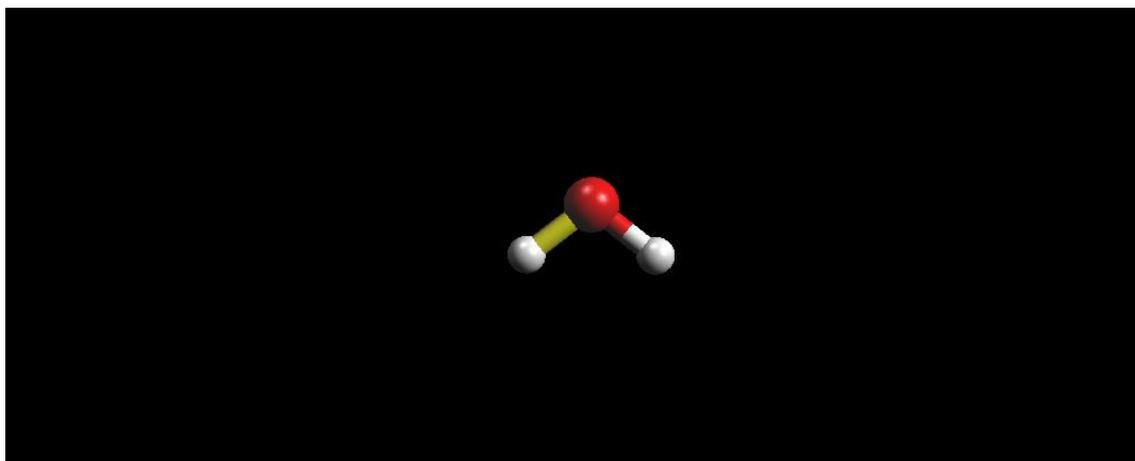
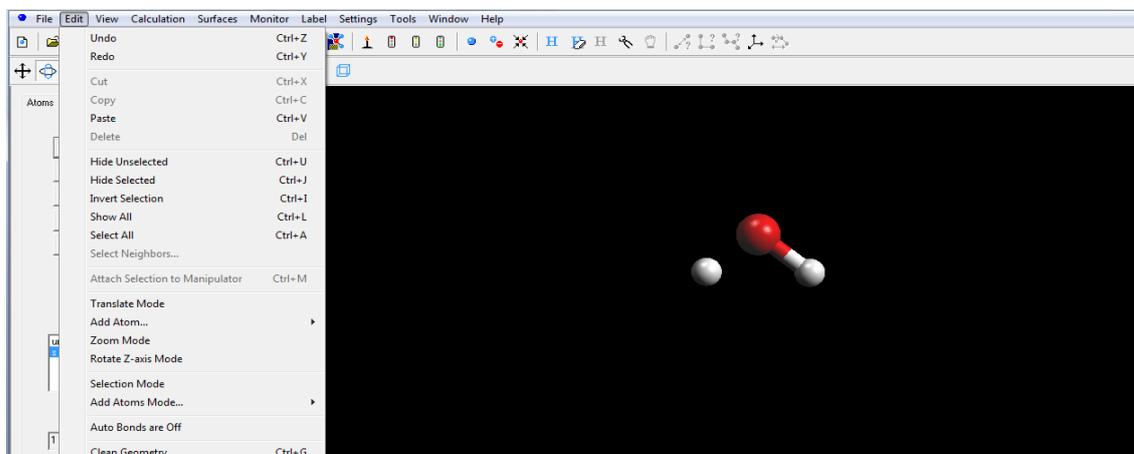
1) Como o botão esquerdo do mouse clique sobre a ligação desejada:



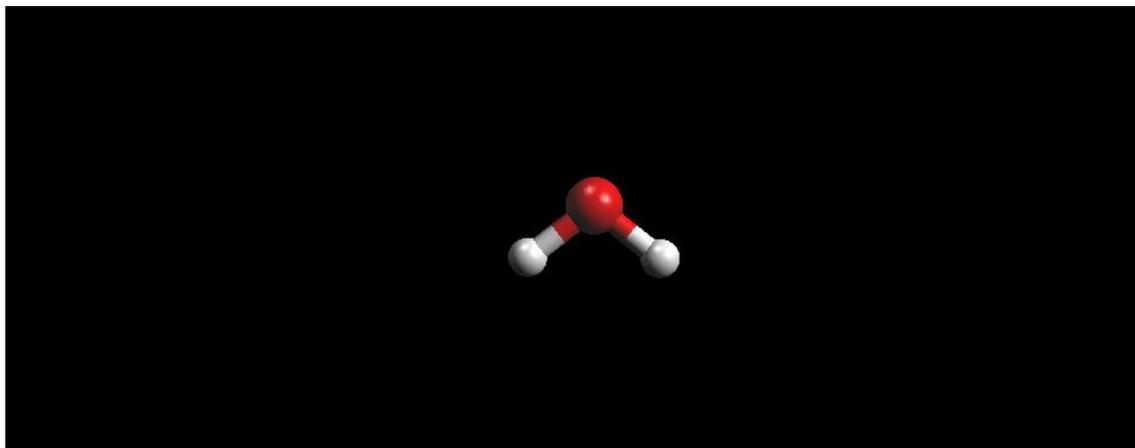
2) Com o botão direito do mouse clique na opção Delete Bond (deletar ligação):



- 3) Para desfazer a operação clique na opção Edit na Barra de Ferramentas e na opção Undo:



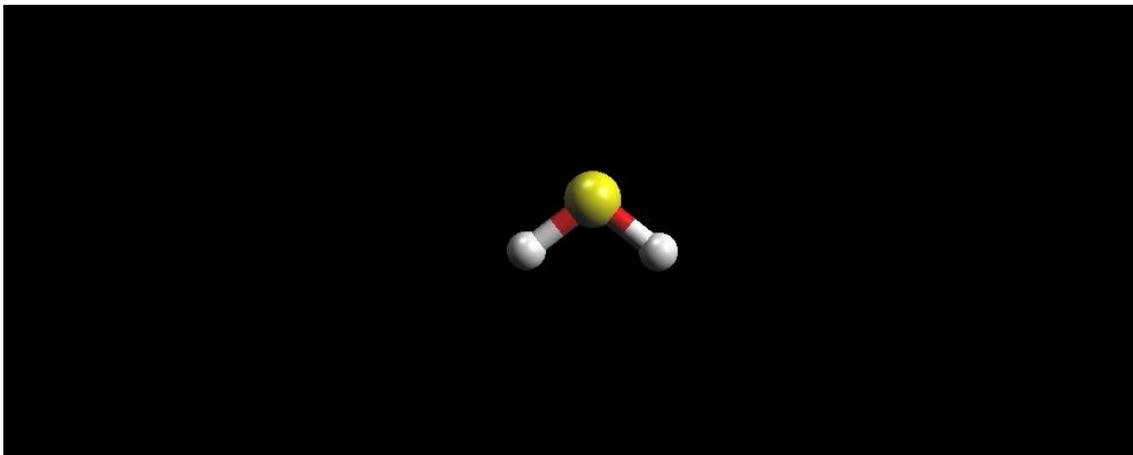
- 4) Clique na ligação com o botão esquerdo do mouse para retirar a seleção:



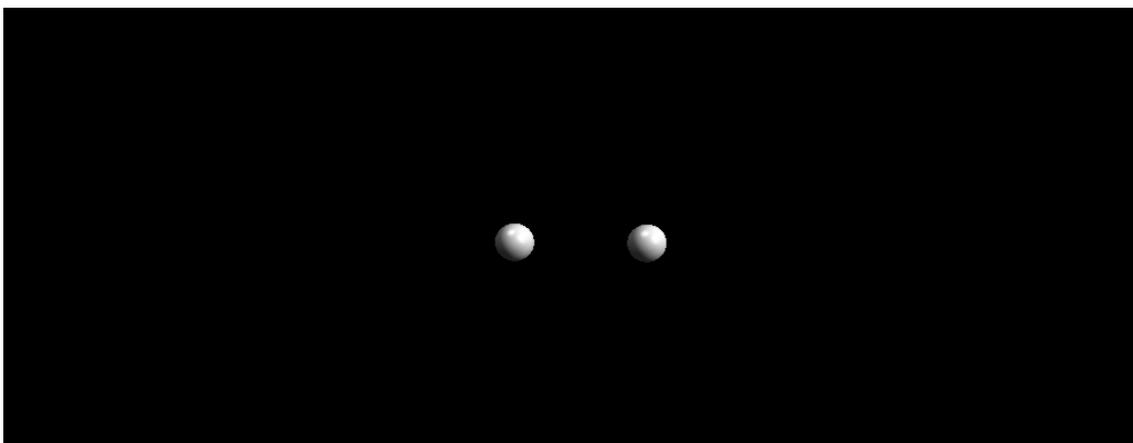
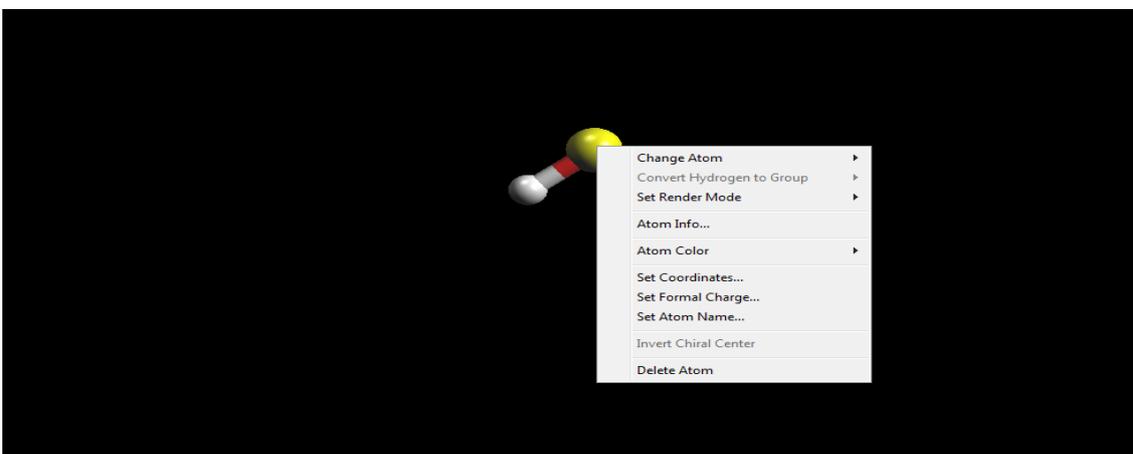
Exercício 6

Como deletar átomos no Arguslab

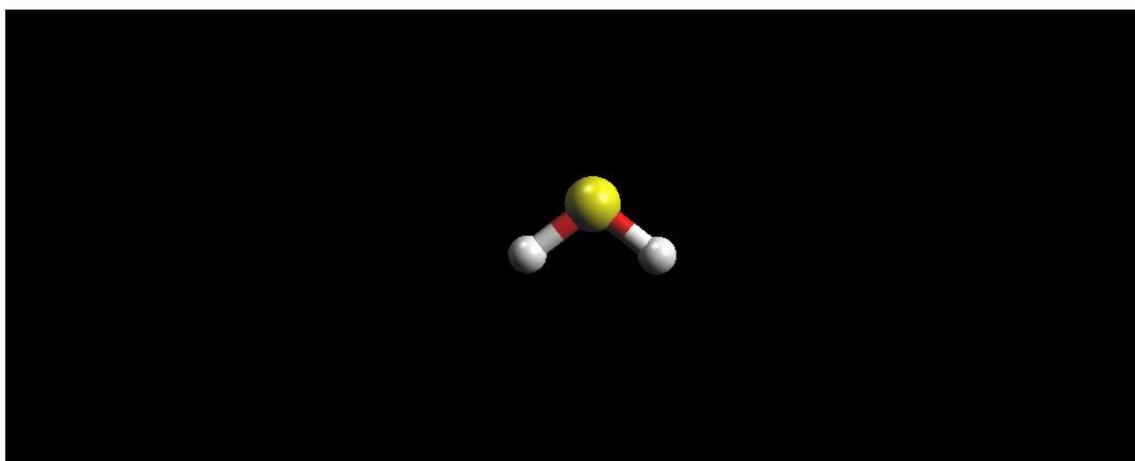
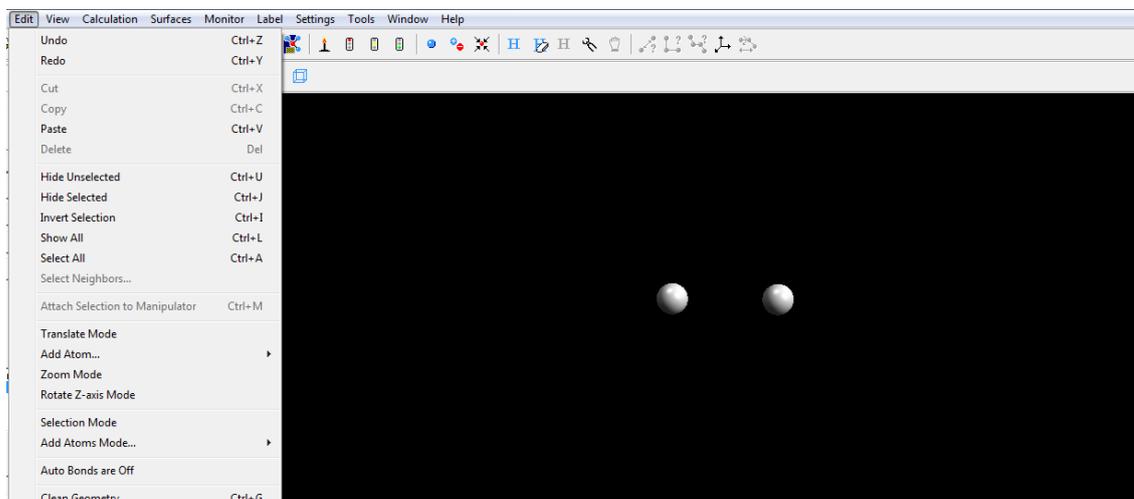
1) Com o botão esquerdo do mouse selecione o átomo desejado:



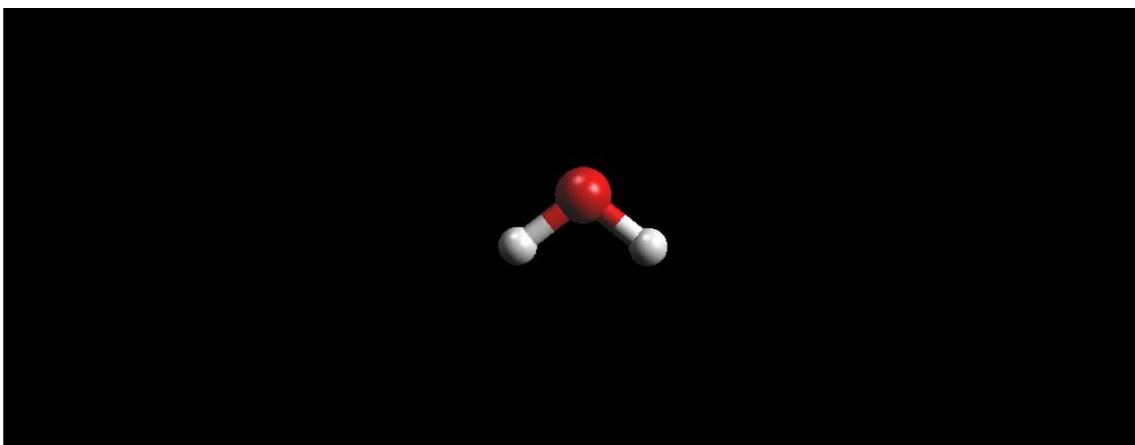
2) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo desejado, e selecione Delete Atom:



- 3) Para desfazer a operação clique na opção Edit na Barra de Ferramentas e na opção Undo:



- 4) Clique no átomo com o botão esquerdo do mouse para retirar a seleção:



APÊNDICE D - Iniciando Arguslab 4



Nome:

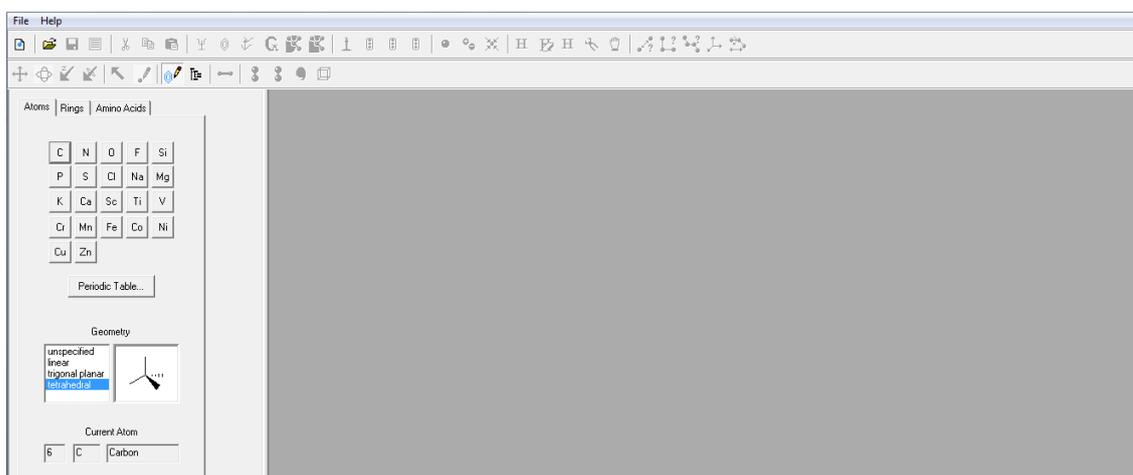
Data:

Exercício 1

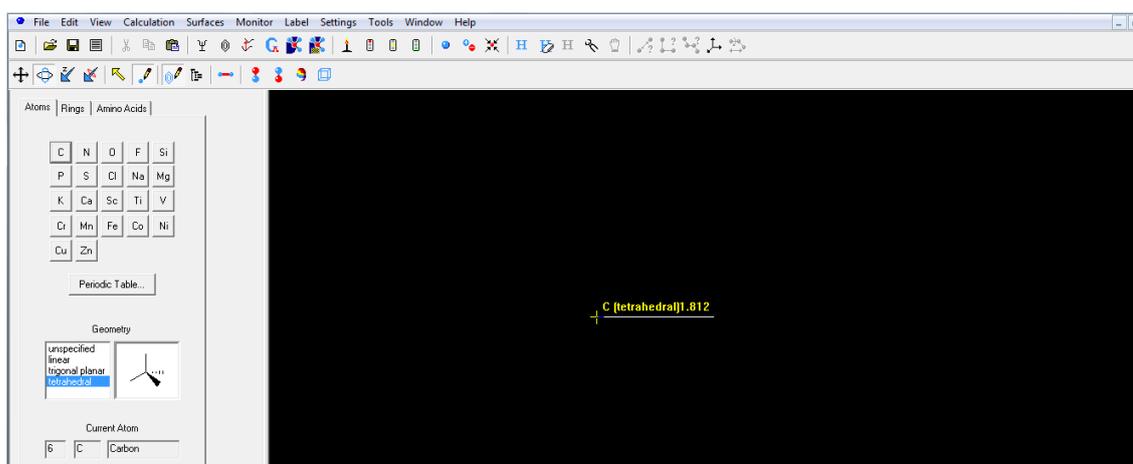
Iniciando o Arguslab

Construindo a molécula da Amônia no Arguslab

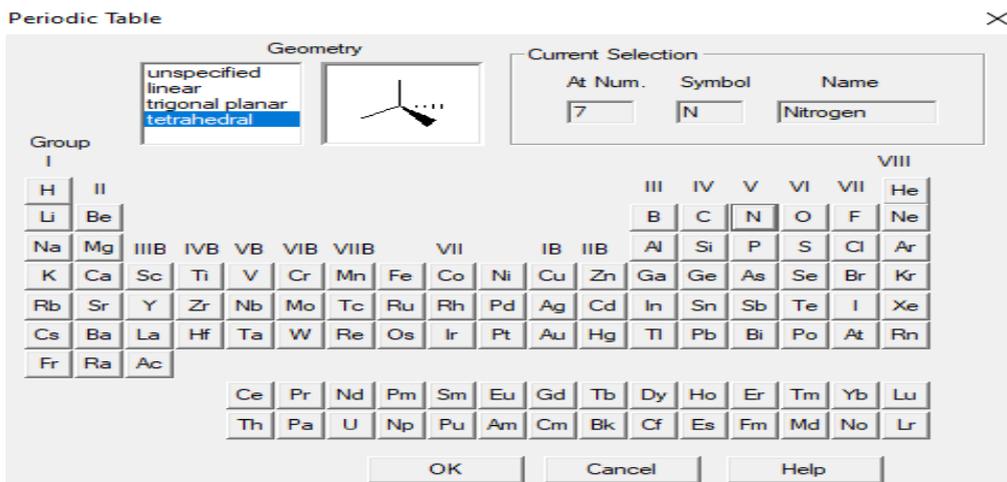
1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:



2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

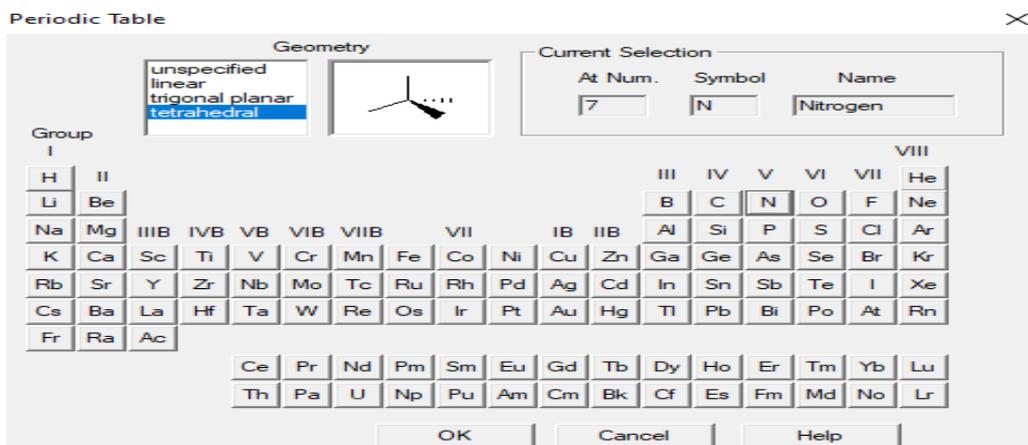


3) Clicar na opção Tabela Periódica:

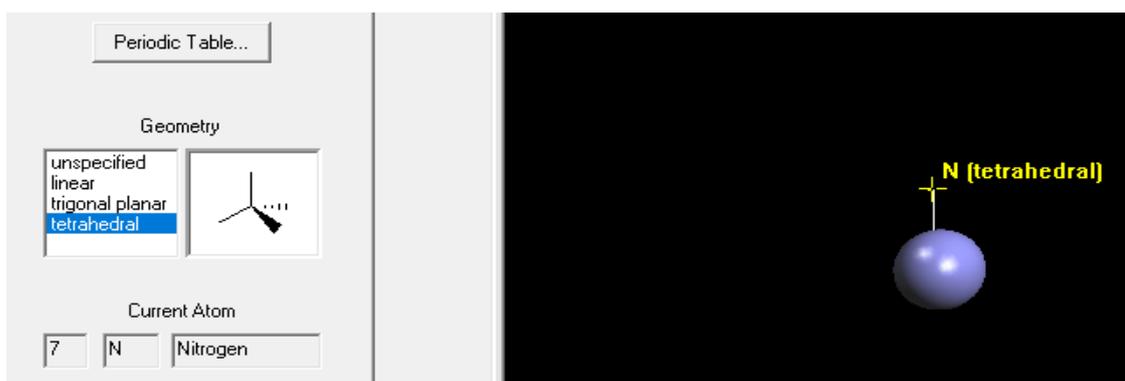


4) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas ou seleccione Modo de Seleção no menu Editar. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

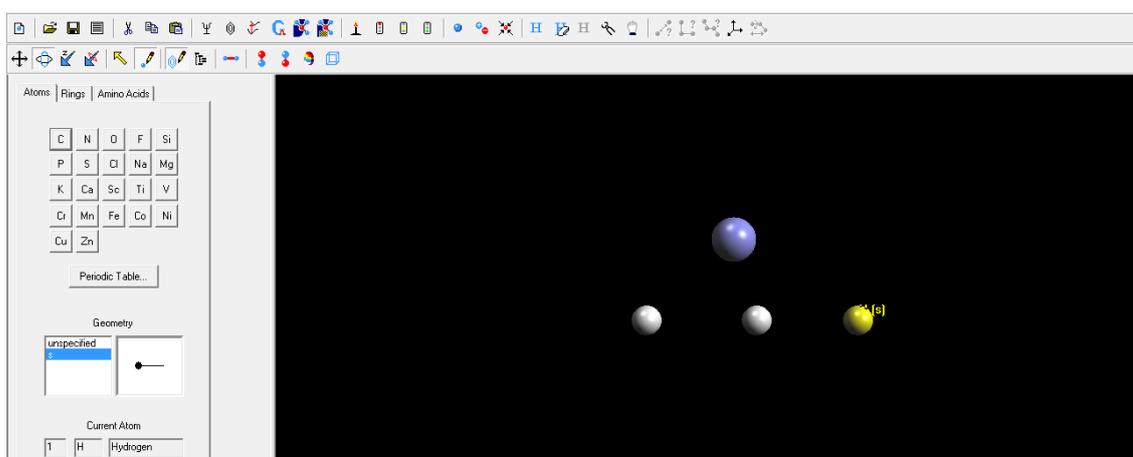
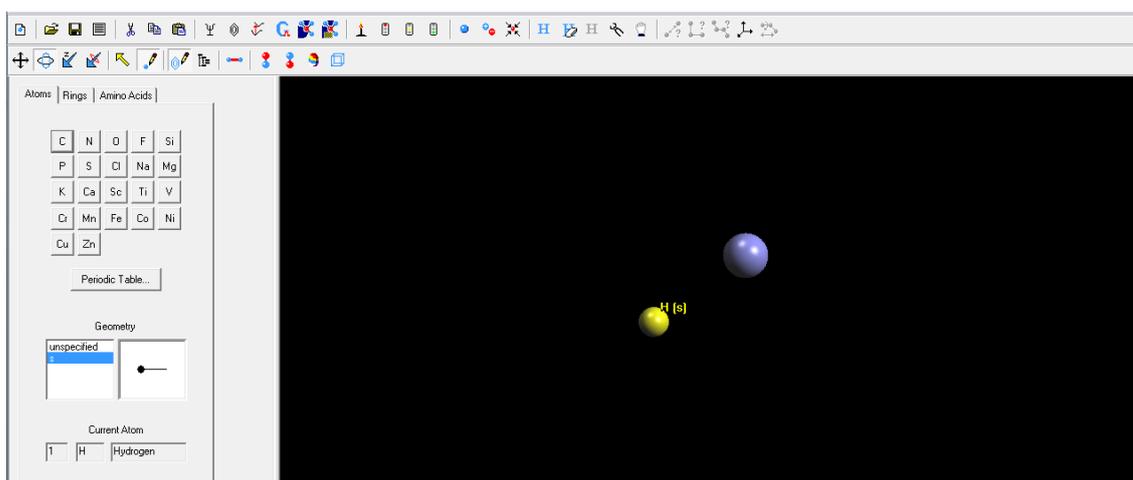
5) Na Tabela Periódica seleccione o átomo de Nitrogênio e escolha a especificação tetrahedral:



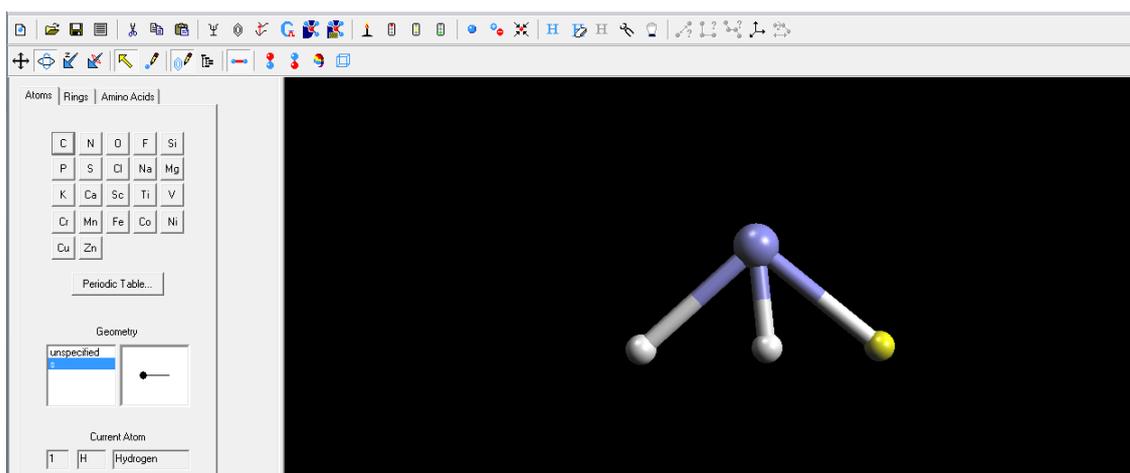
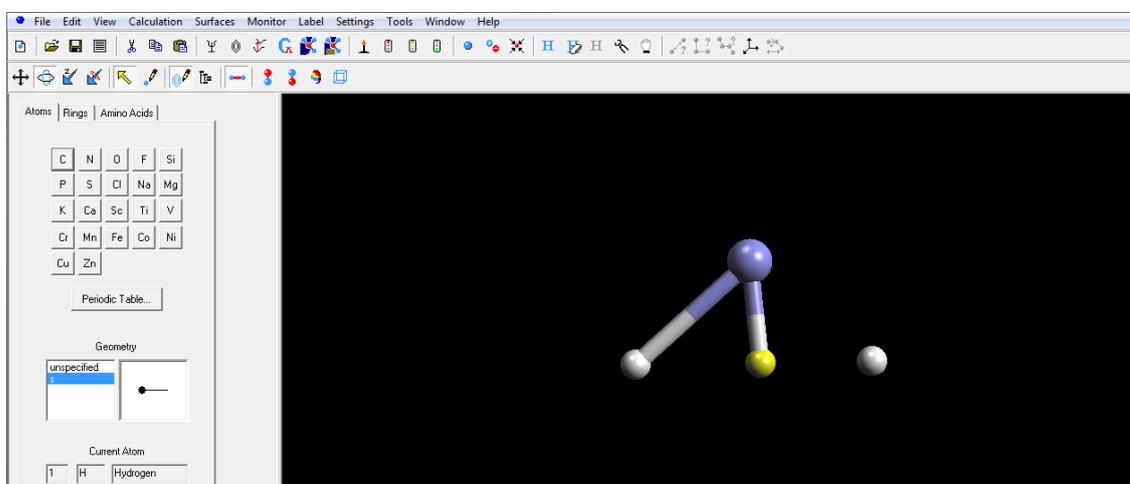
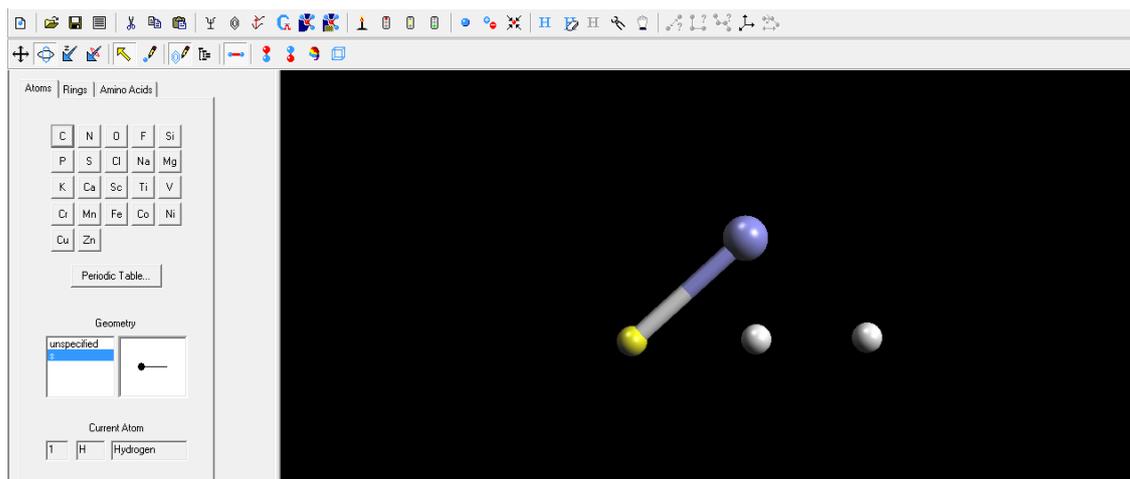
6) Clique em OK e após com o botão direito do mouse clique na tela:



- 7) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas
- 8) Selecionar a Tabela Periódica
- 9) Selecionar o átomo de Hidrogênio escolhendo a opção S
- 10) Clicar em OK
- 11) Com o botão direito do mouse clicar três vezes na tela:



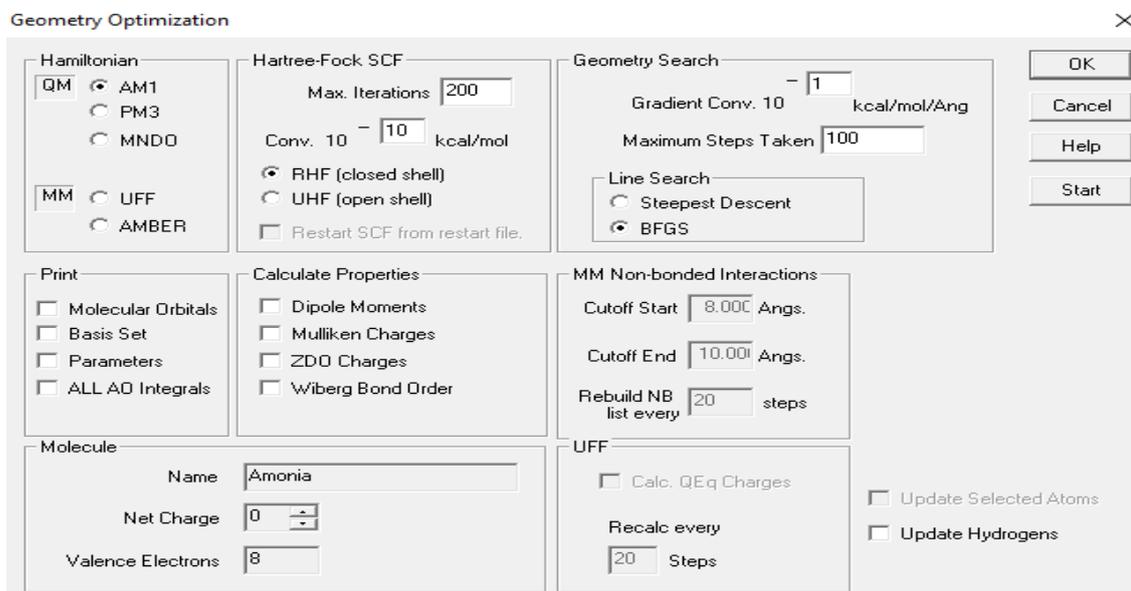
- 12) Assim temos os átomos que formam a molécula da amônia, um Nitrogênio e três Hidrogênios
- 13) Próximo passo é a adição das ligações químicas
- 14) Adicionando Ligações Químicas com o botão esquerdo do mouse: clicar com o botão esquerdo no átomo de Hidrogênio, selecionar a opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas e depois com o botão esquerdo clicar no átomo de Nitrogênio. Após repetir o processo para o segundo e terceiro átomo de Hidrogênio:



15) Clique no botão otimizar geometria na Barra de Ferramentas  Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria:

16) Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1

17) Após clique em OK



APÊNDICE E - Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Água 5



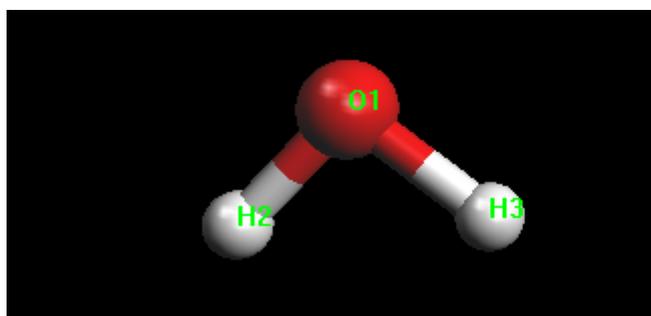
Nome:

Data:

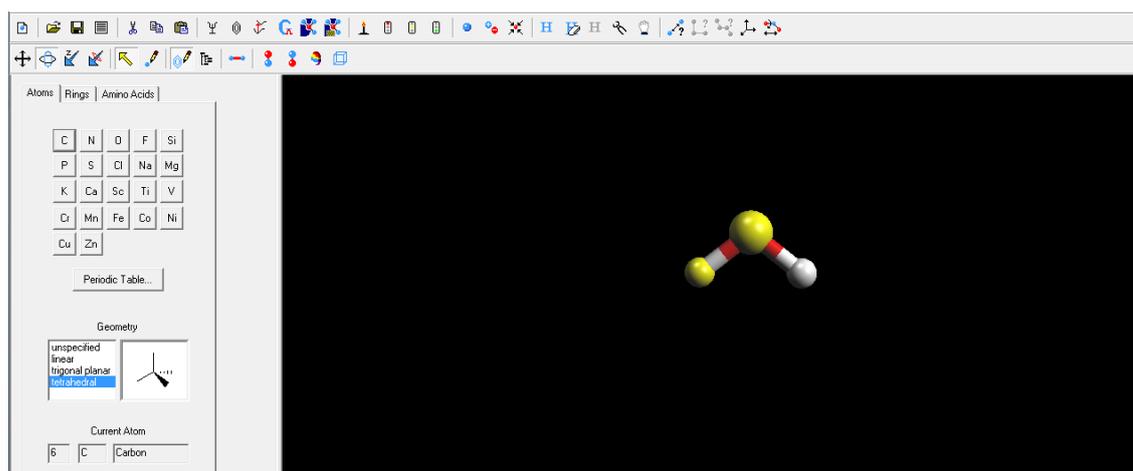
Exercício 1

Calcular a distância entre átomos da molécula da água no Arguslab

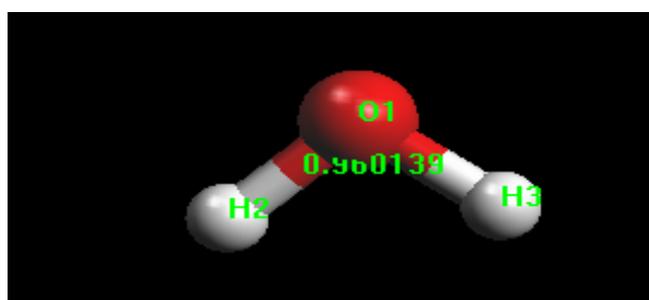
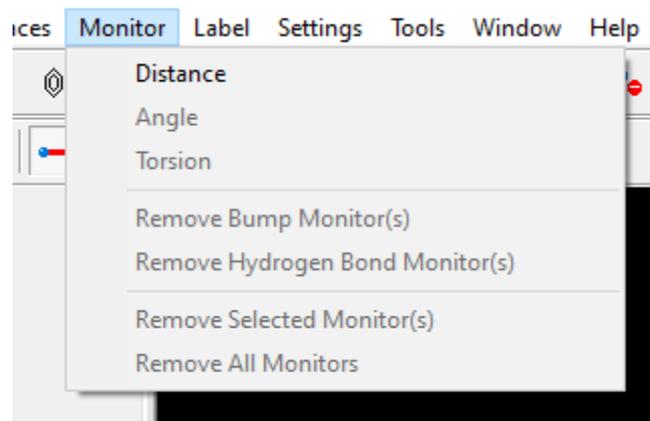
5) Abra o arquivo da molécula da água com a geometria otimizada.



6) Selecione a opção  na Barra de Ferramentas, aperte a tecla Ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione dois átomos com o botão esquerdo do mouse:



7) Selecione a opção distância entre dois átomos  na Barra de Ferramentas ou monitor no menu e escolha a opção Distance:

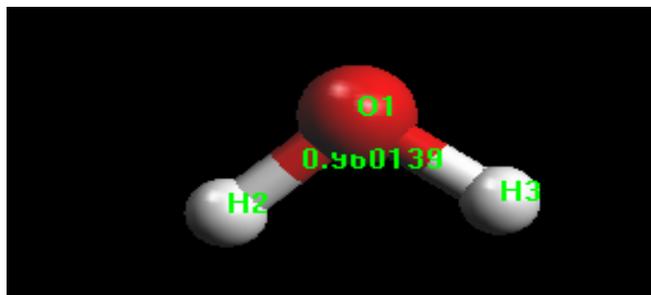


- 8) O valor da distância entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.
- 9) Salve o arquivo.

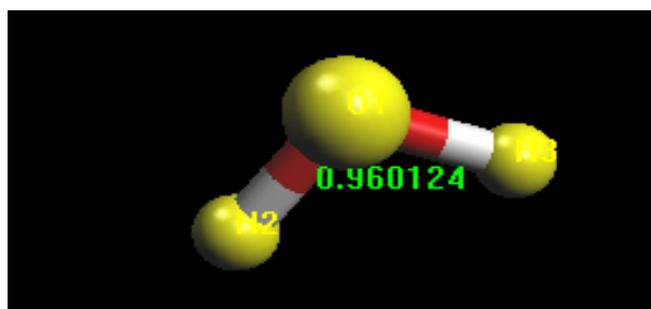
Exercício 2

Calcular o ângulo entre átomos da molécula da água no Arguslab

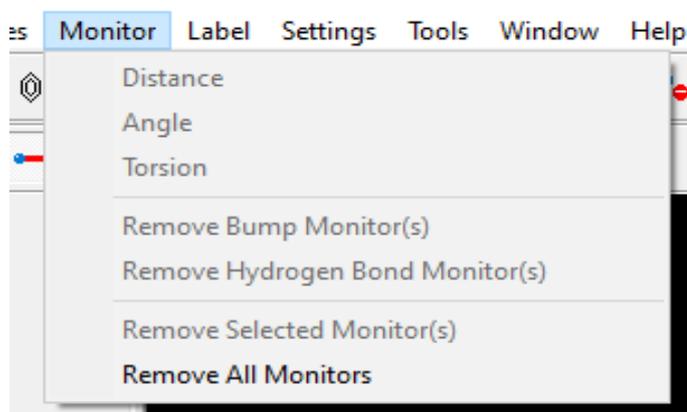
- 1) Abra o arquivo da molécula da água com a geometria otimizada.

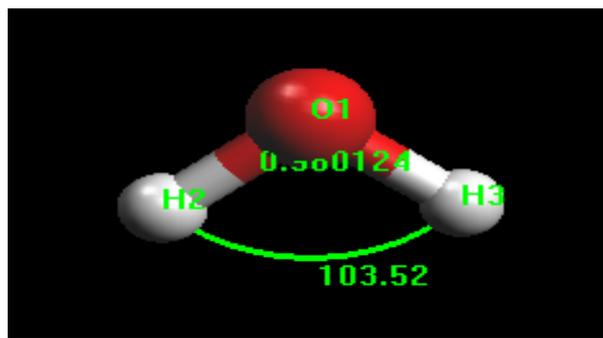


- 2) Selecione a opção  na Barra de Ferramentas, aperte a tecla Ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione três átomos com o botão esquerdo do mouse:



- 3) Selecione a opção ângulo entre três átomos  na Barra de Ferramentas ou monitor na barra menu e clique em Angle:





- 4) O valor do ângulo entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.
- 5) Salve o arquivo.

APÊNDICE F - Cálculo de Ligação e Ângulo na Molécula da Amônia 6



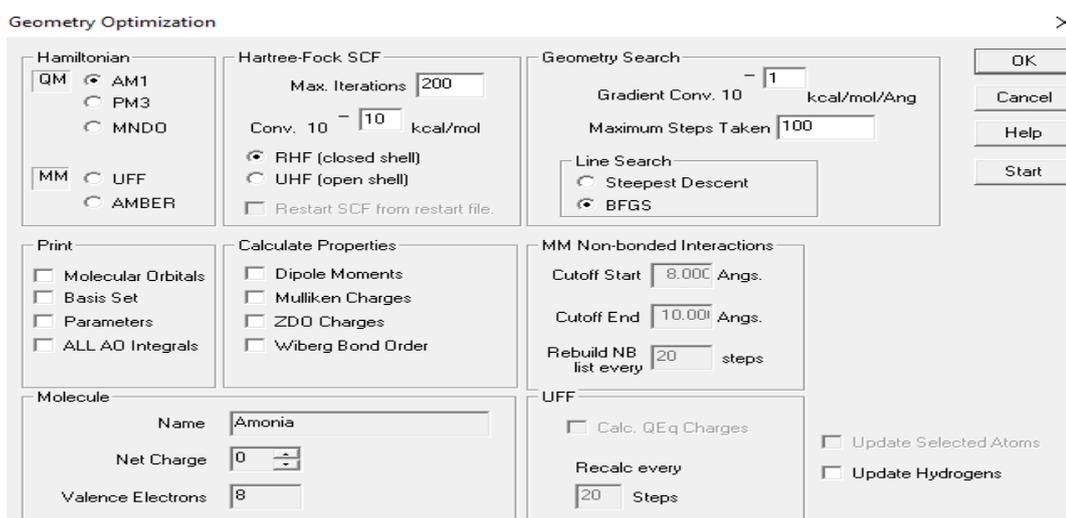
Exercício 1

Nome:

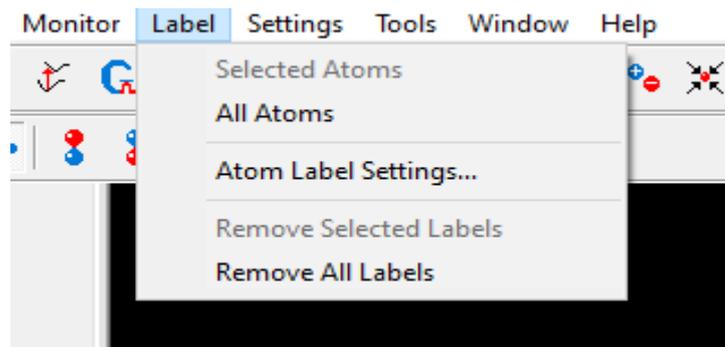
Data:

Calcular a distância entre átomos da molécula da amônia no Arguslab

- 1) Abra o arquivo da molécula da amônia e otimize a geometria escolhendo a opção AM1.



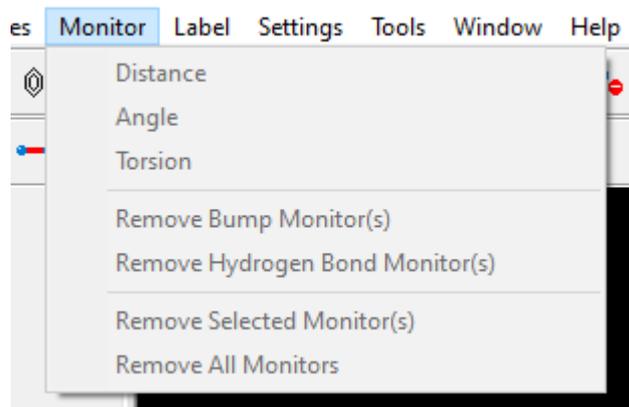
2) Selecione a opção Label no menu e clique em All Atoms:



3) Selecione a opção  na Barra de Ferramentas, aperte a tecla ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione dois átomos com o botão esquerdo do mouse:



4) Selecione a opção distância entre dois átomos  na Barra de Ferramentas ou clique em monitor na barra de menu e clique em Distance.

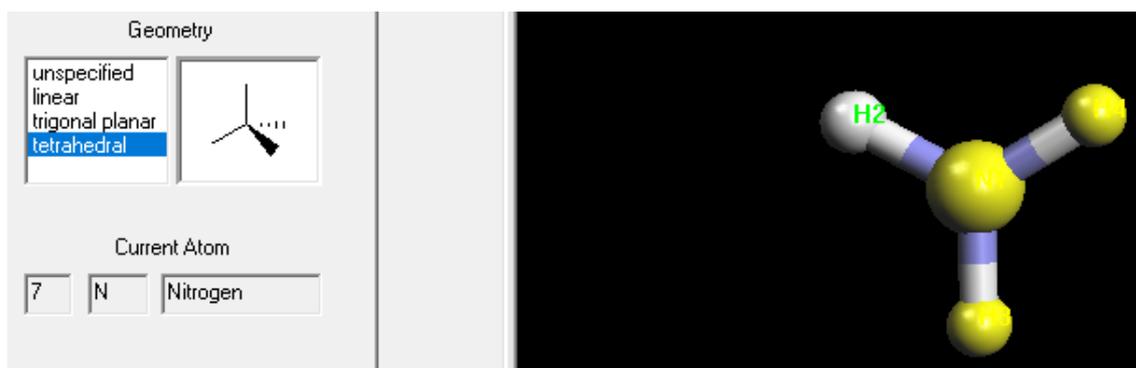


- 5) O valor da distância entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.

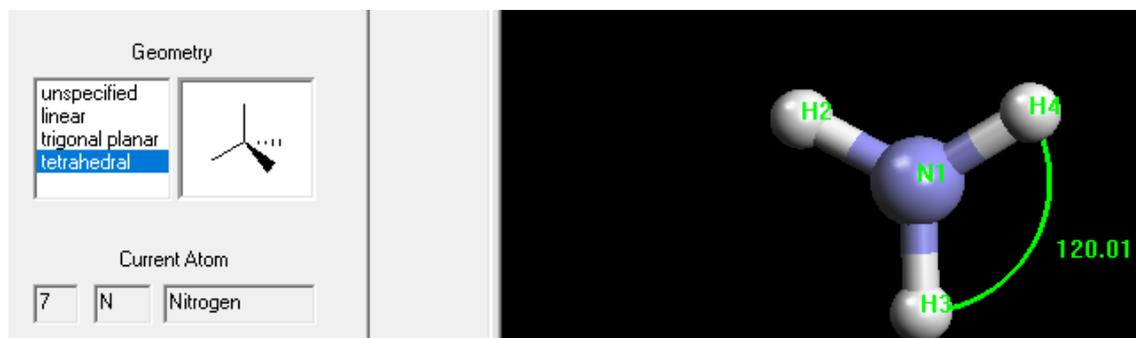
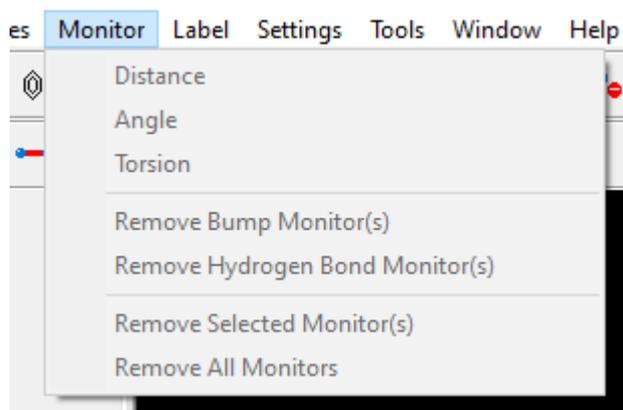
Exercício 2

Calcular o ângulo entre átomos da molécula da amônia no Arguslab

- 1) Selecione a opção  na Barra de Ferramentas, aperte a tecla ctrl (control) no teclado e mantenha a tecla pressionada. Após selecione três átomos com o botão esquerdo do mouse:



- 2) Selecione a opção ângulo entre três átomos  na Barra de Ferramentas ou clique em monitor na barra de menu e clique em Angle:



- 3) O valor do ângulo entre os átomos será exibido em Angstroms, na cor verde.
- 4) Salve o arquivo.

APÊNDICE G - Otimizando Geometria de uma Molécula 7



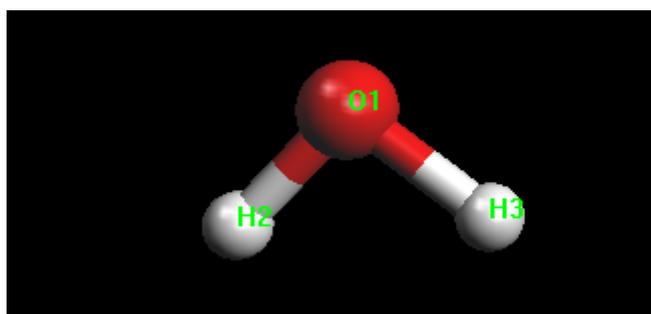
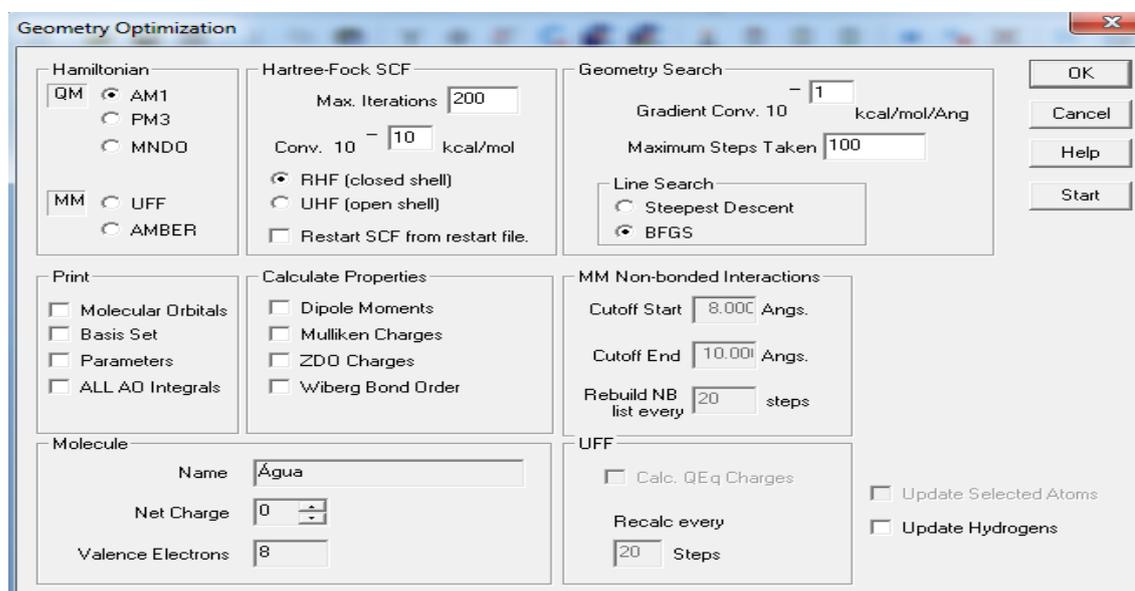
Nome:

Data:

Exercício 1

Otimizar a Geometria de uma molécula no Arguslab

- 1) Clique no botão otimizar geometria na Barra de Ferramentas  ou no menu Calculation. Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria:
- 2) Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1
- 3) Após clique em OK



- 4) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.
- 5) Salve o arquivo.

APÊNDICE H - Construindo Molécula Benzeno no Arguslab 8



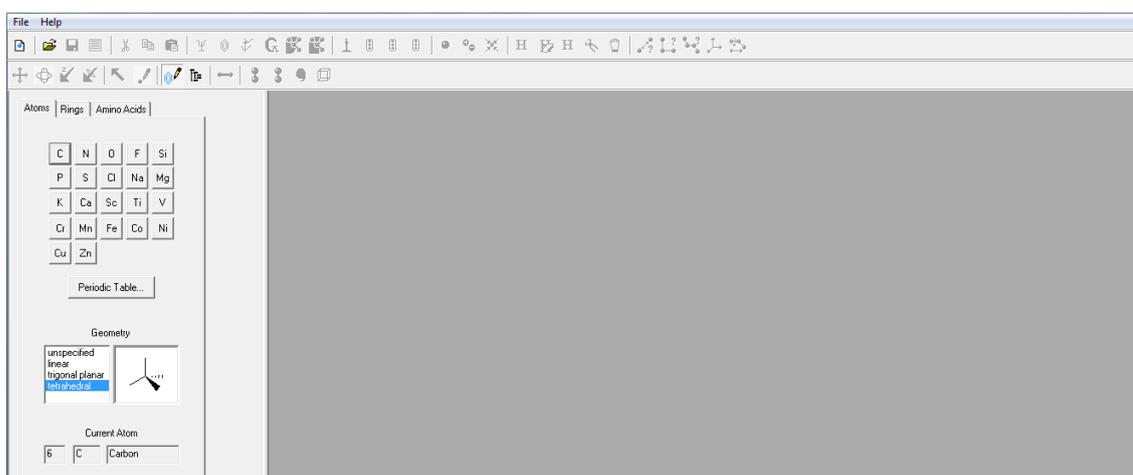
Exercício 1

Nome:

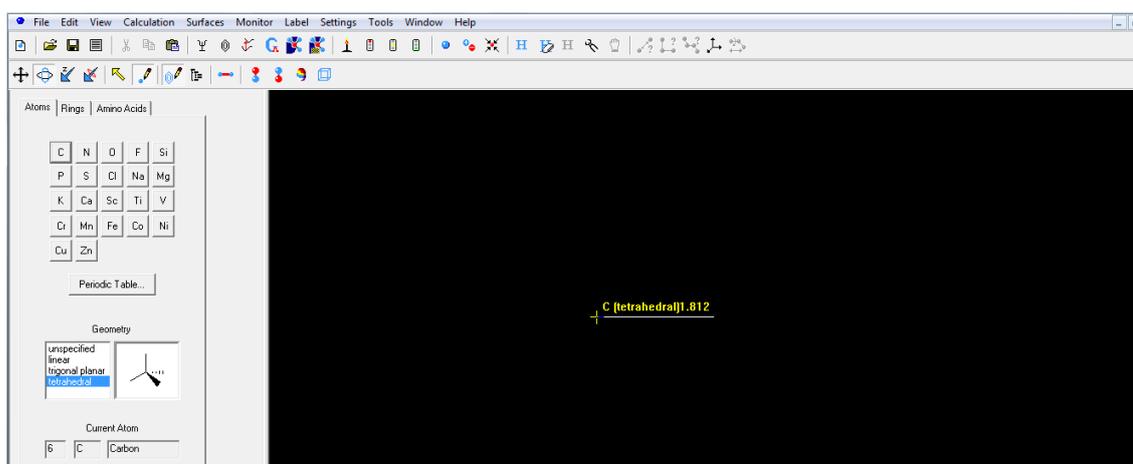
Data:

Construindo a molécula do Benzeno no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

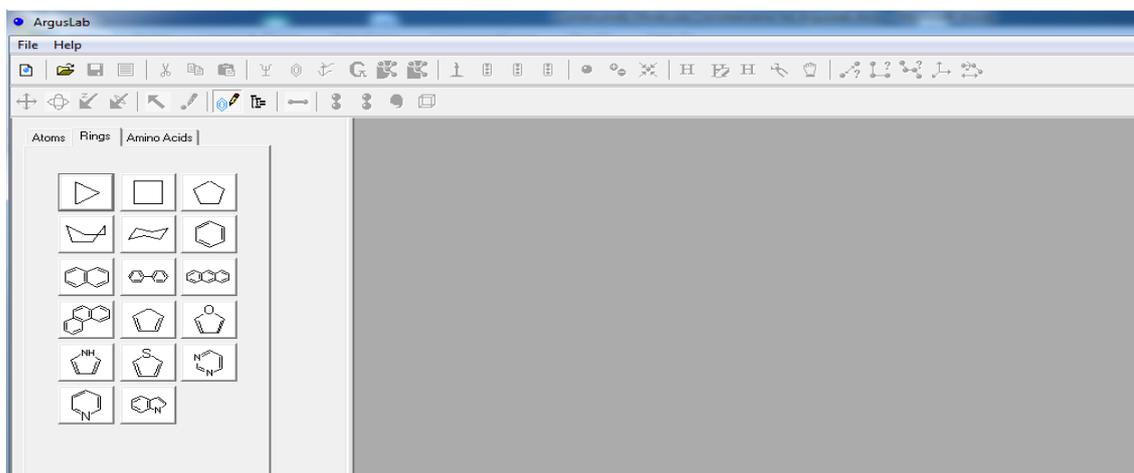


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

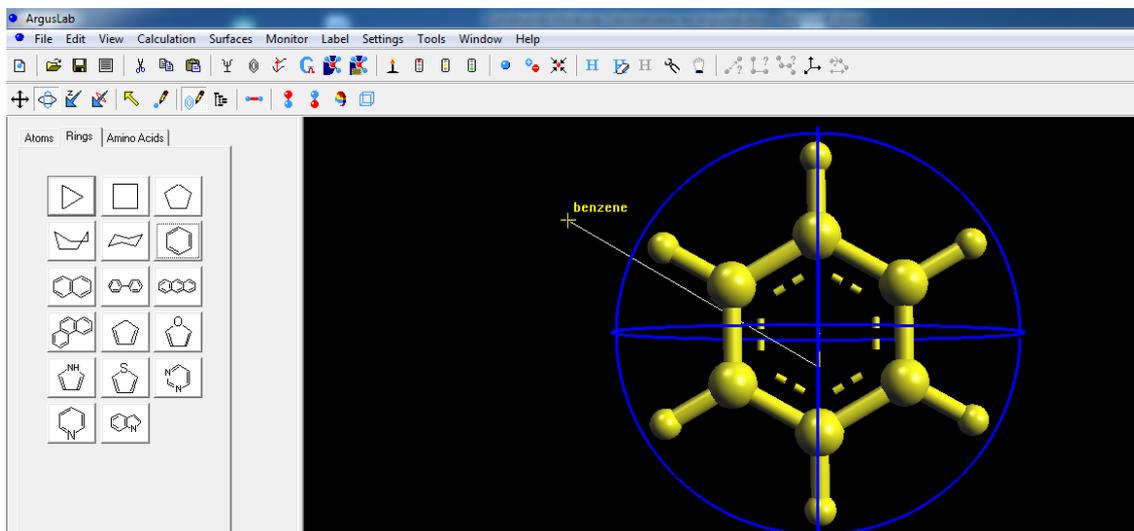


3) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

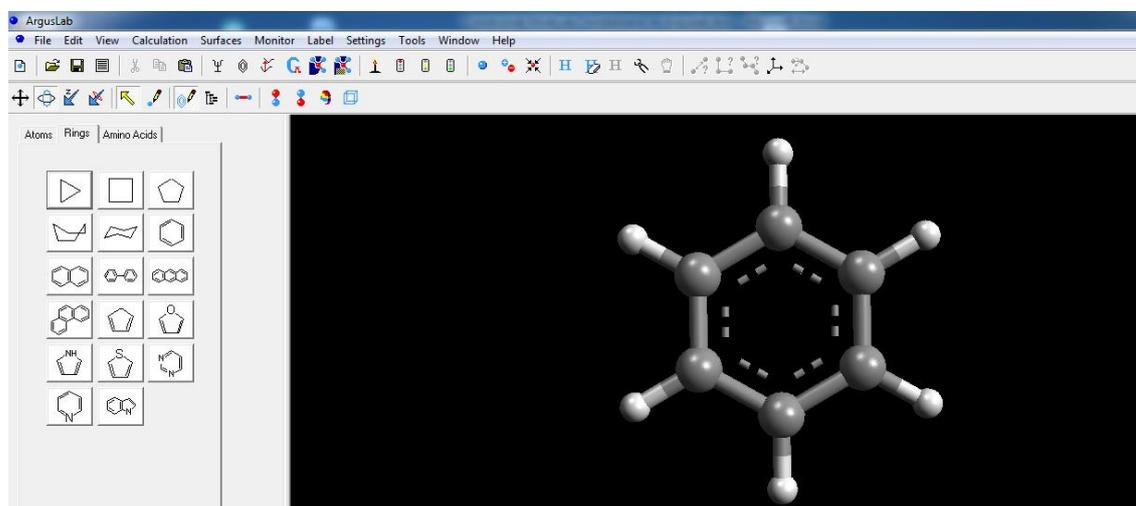
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



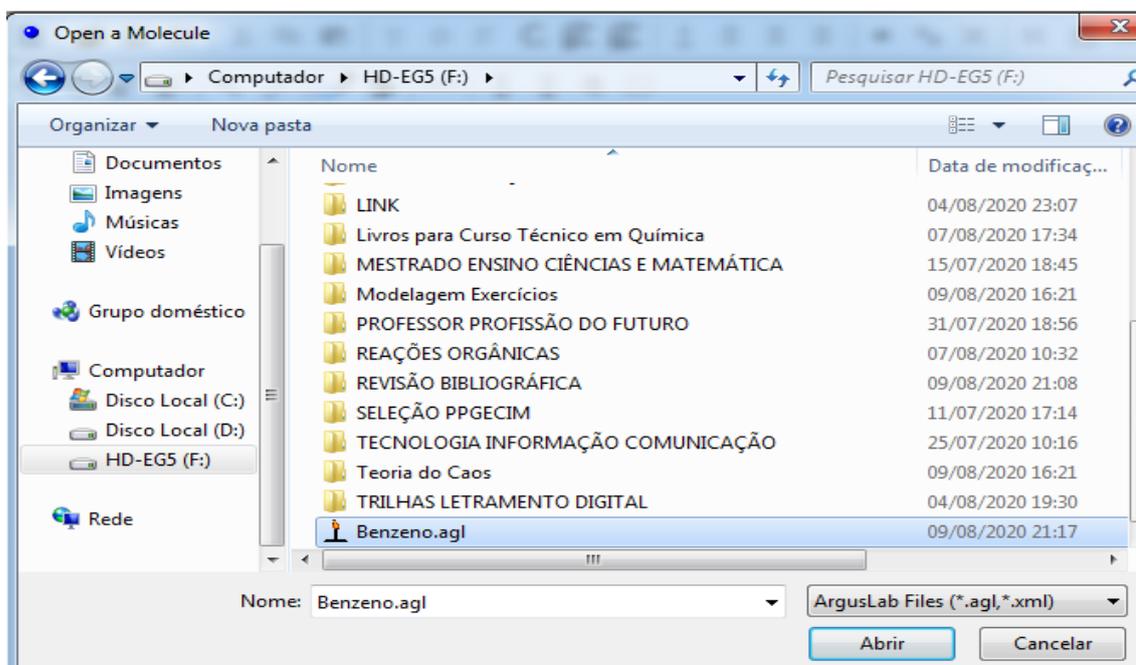
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



- 6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



- 7) Feche o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save As
- 8) Dê o nome para o arquivo de Benzeno.agl
- 9) Escolha a pasta
- 10) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



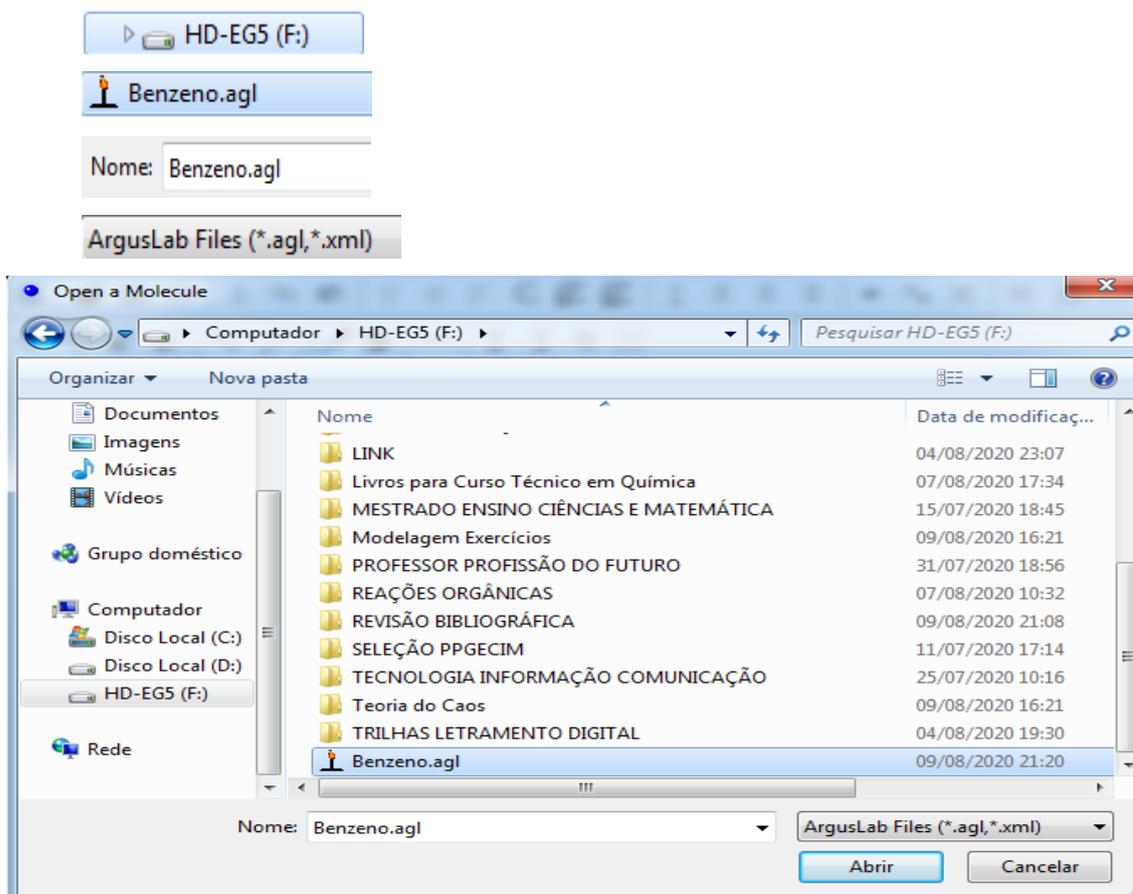
Nome: Benzeno.agl

ArgusLab Files (*.agl,*.xml)

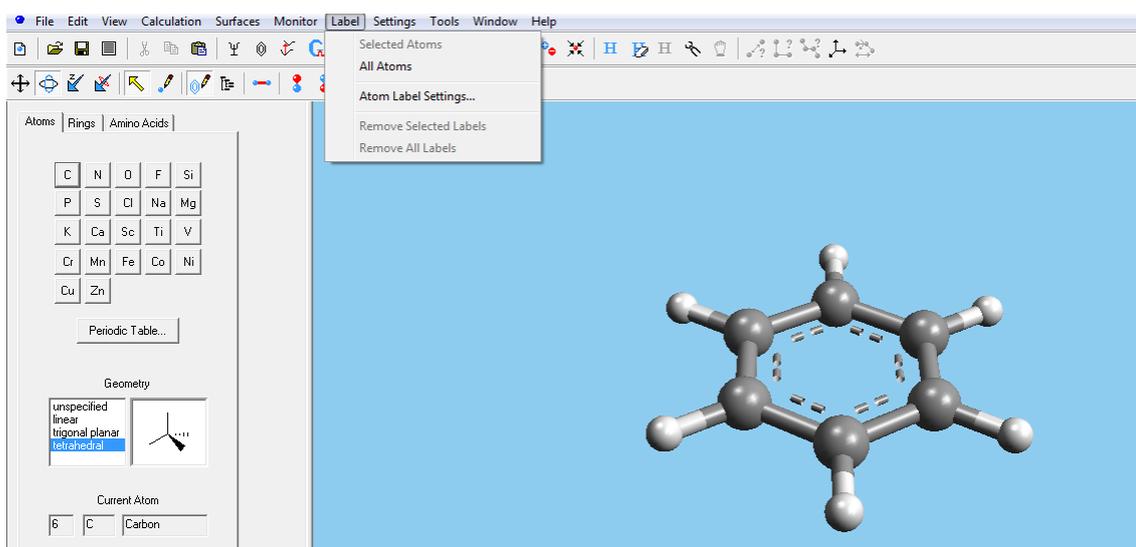
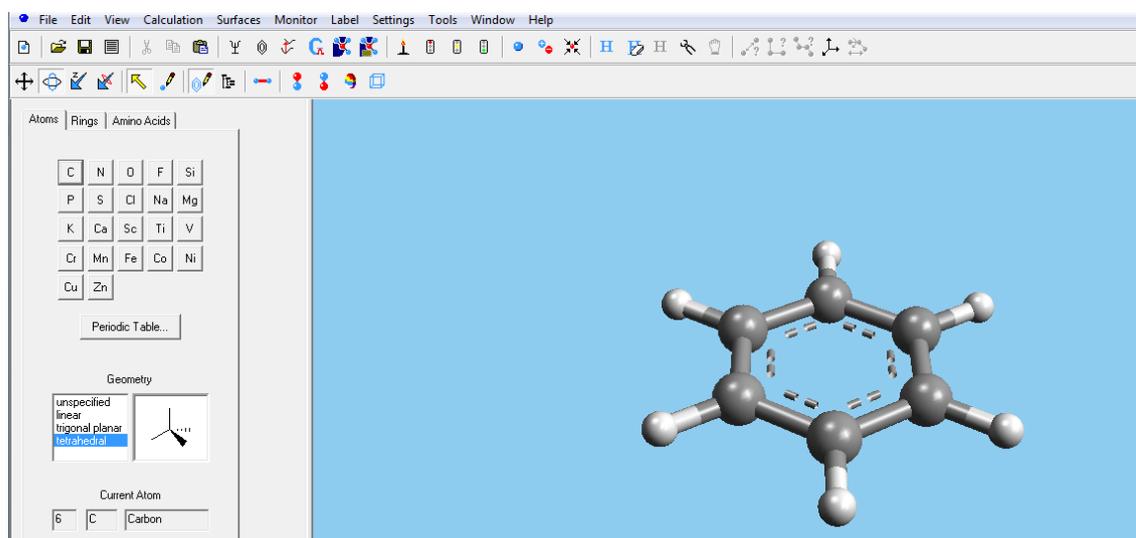
Exercício 2

Otimizar a Geometria da molécula do Benzeno no Arguslab

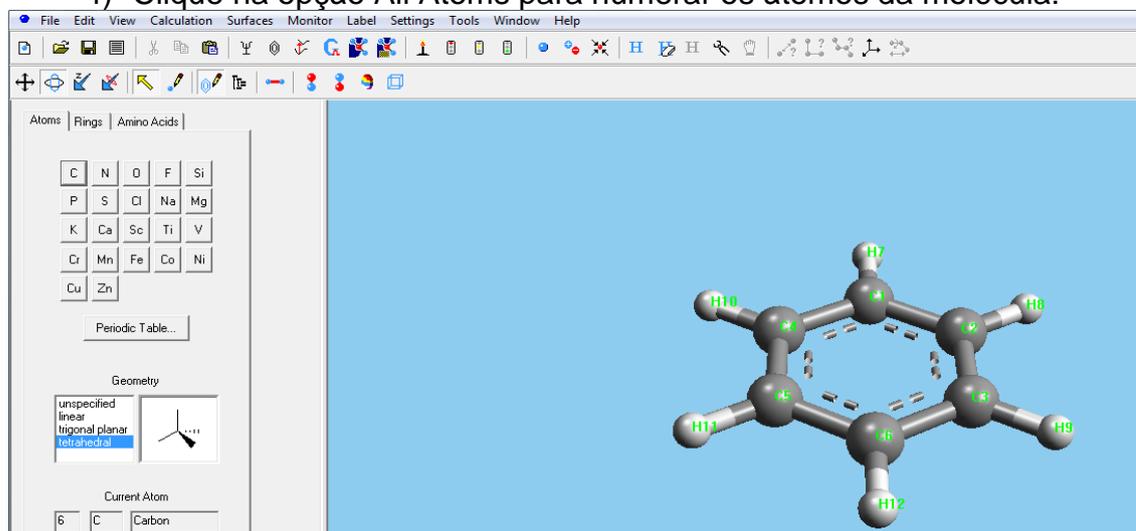
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



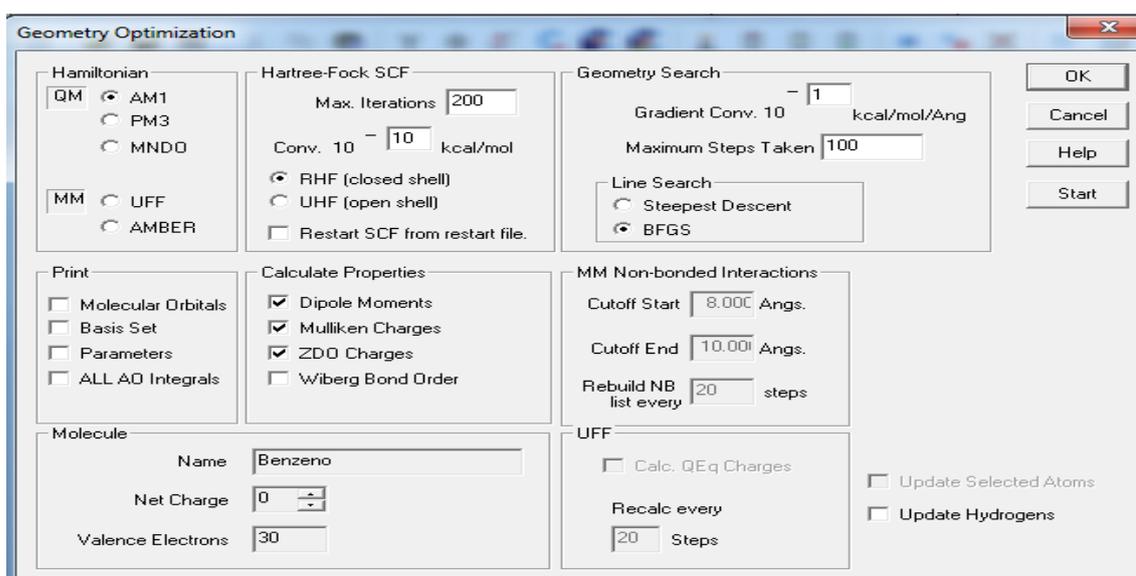
- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:



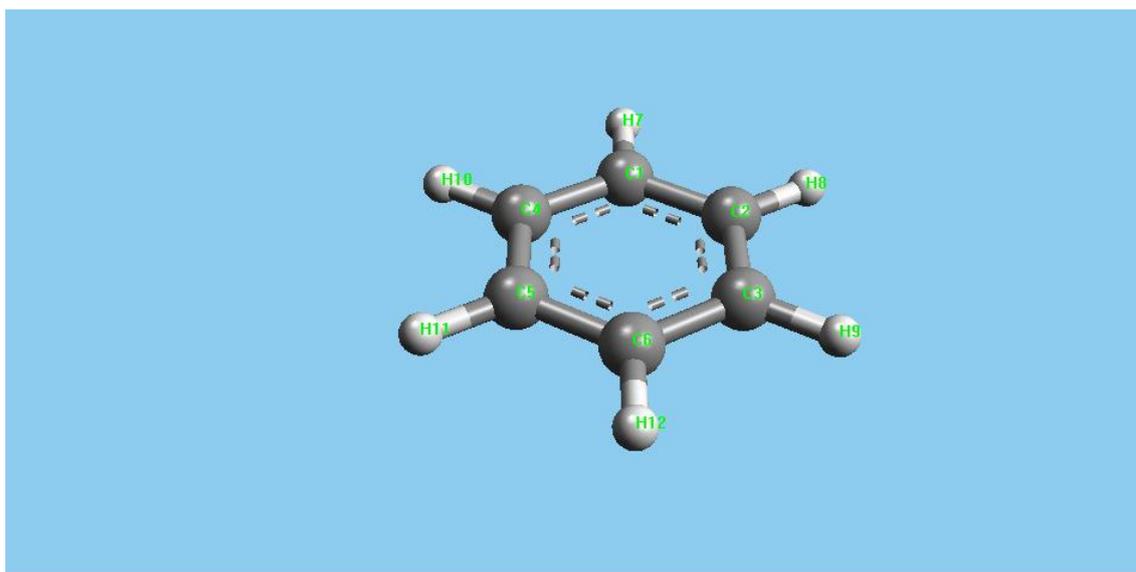
- 4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



- 5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



- 6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



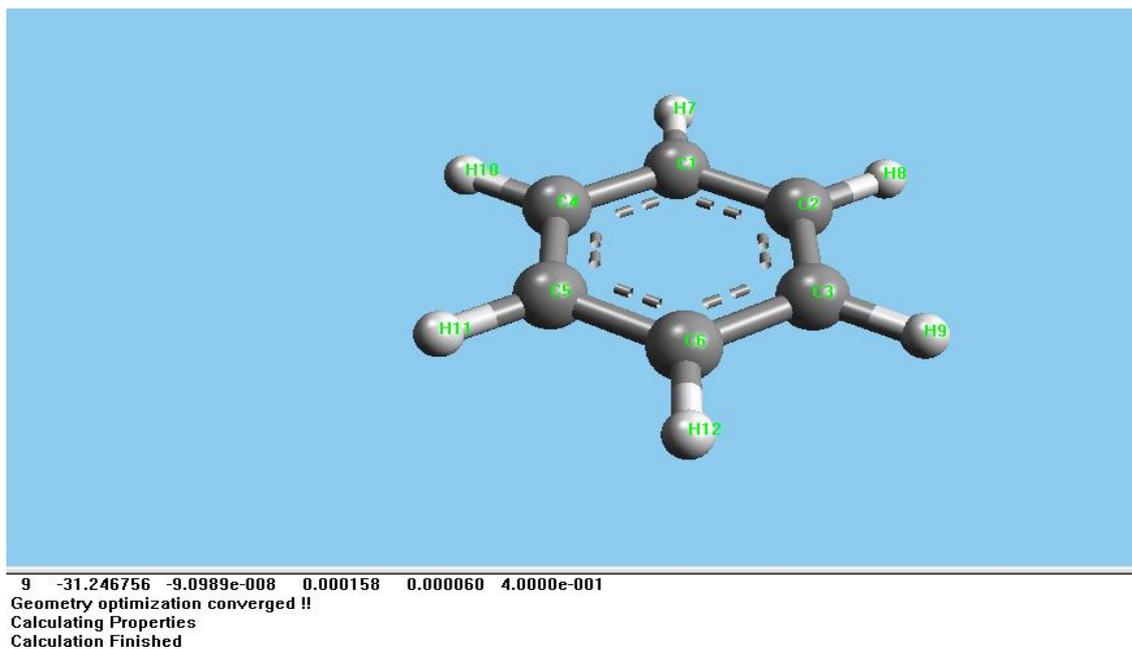
```

9 -31.246756 -9.0989e-008 0.000158 0.000060 4.0000e-001
Geometry optimization converged !!
Calculating Properties
Calculation Finished

```

7) Selecione a opção  Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Nitrobenzeno.out.txt.

8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção  na Barra de Ferramentas:



9) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

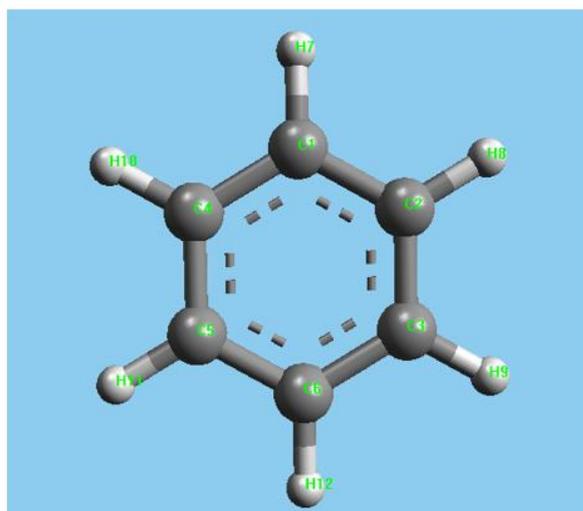
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Benzeno

- 1) Abra o arquivo texto Benzeno.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Muliken, faça um Print Screenshot da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic Charges

1	C	-0.1916
2	C	-0.1916
3	C	-0.1916
4	C	-0.1916
5	C	-0.1916
6	C	-0.1916
7	H	0.1916
8	H	0.1916
9	H	0.1916
10	H	0.1916
11	H	0.1916
12	H	0.1916

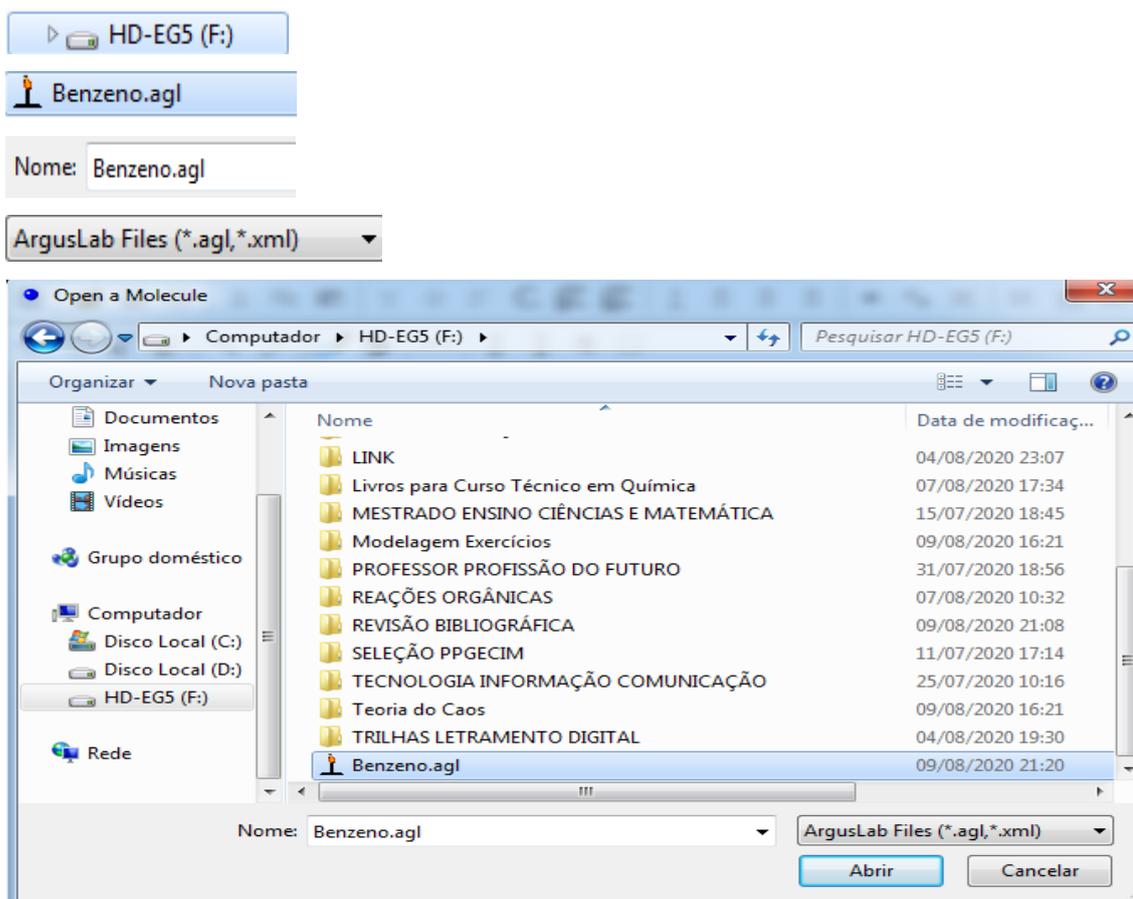
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



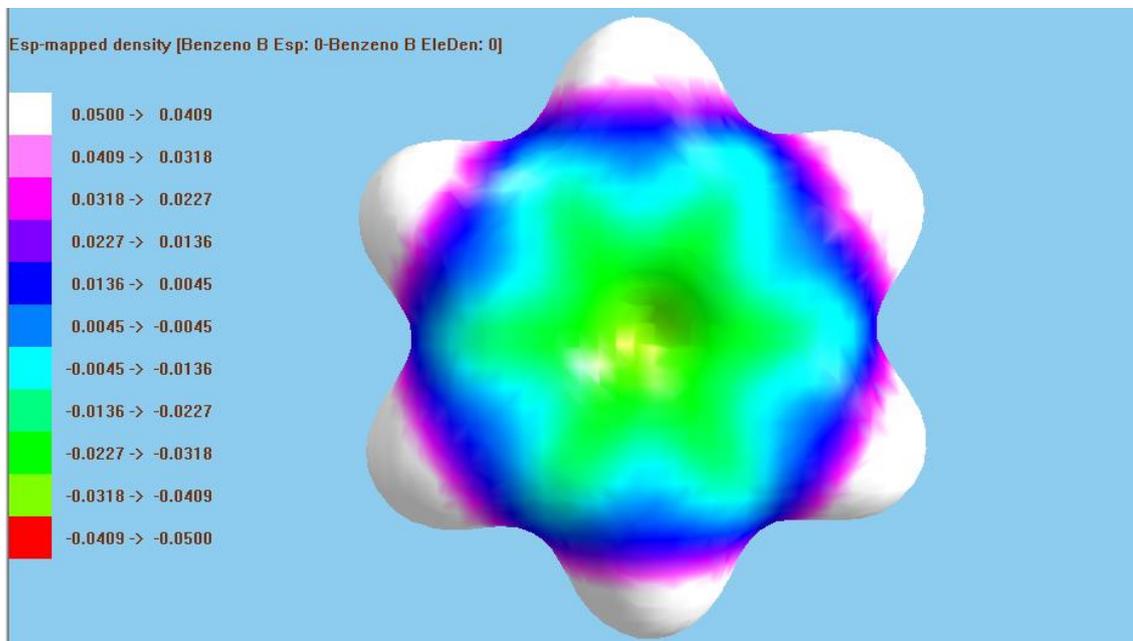
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Benzeno no Arguslab

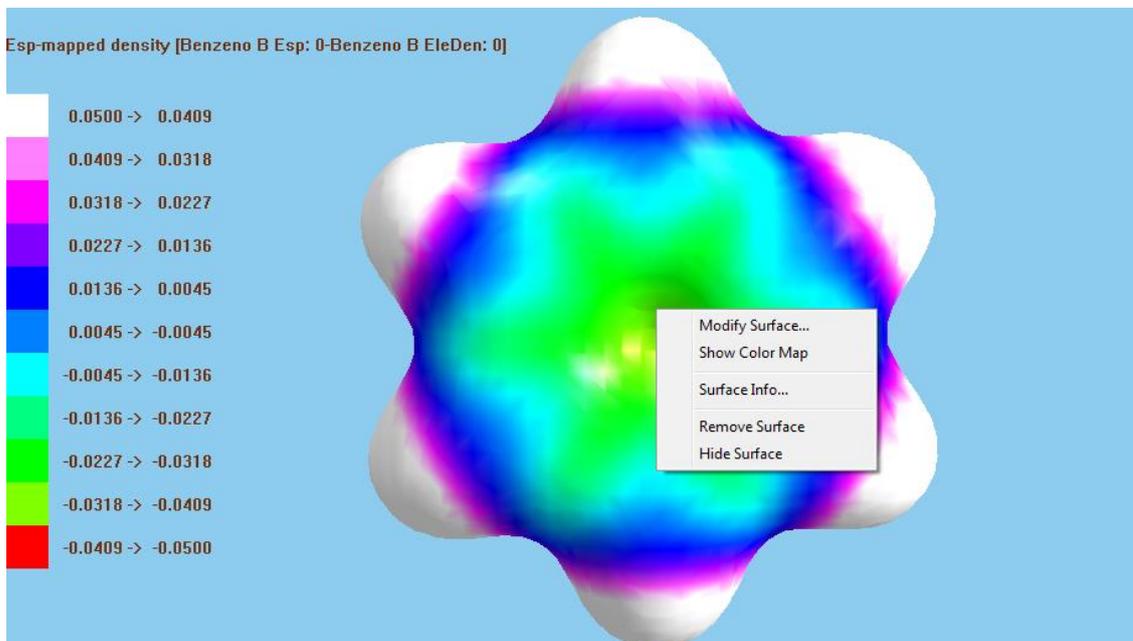
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

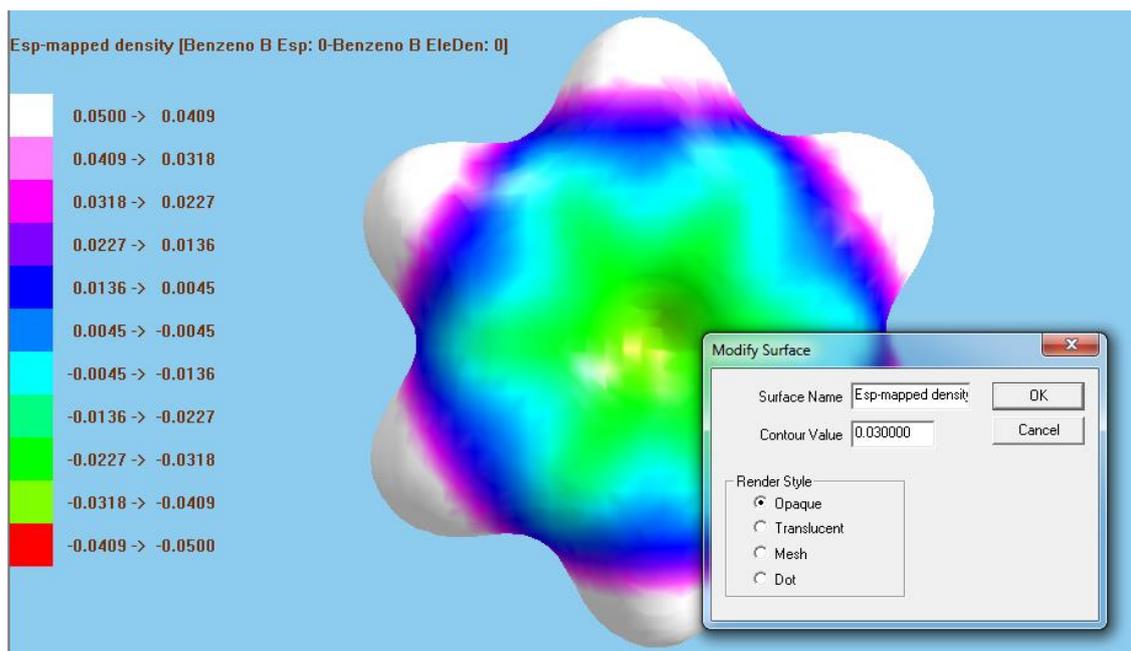


- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula de Benzeno ficará com o seguinte aspecto:

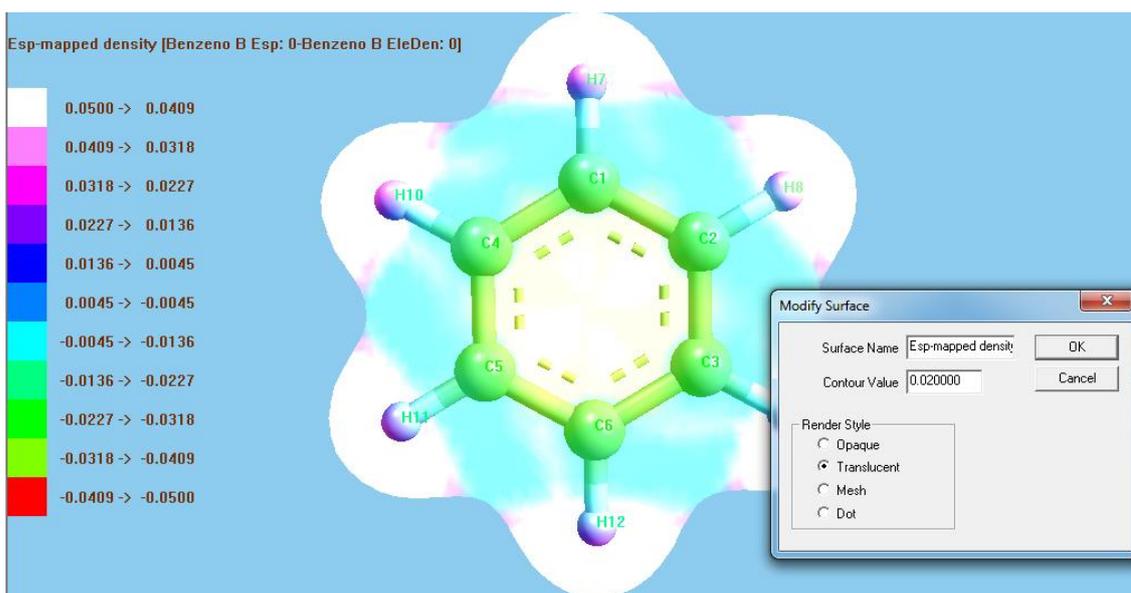


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:



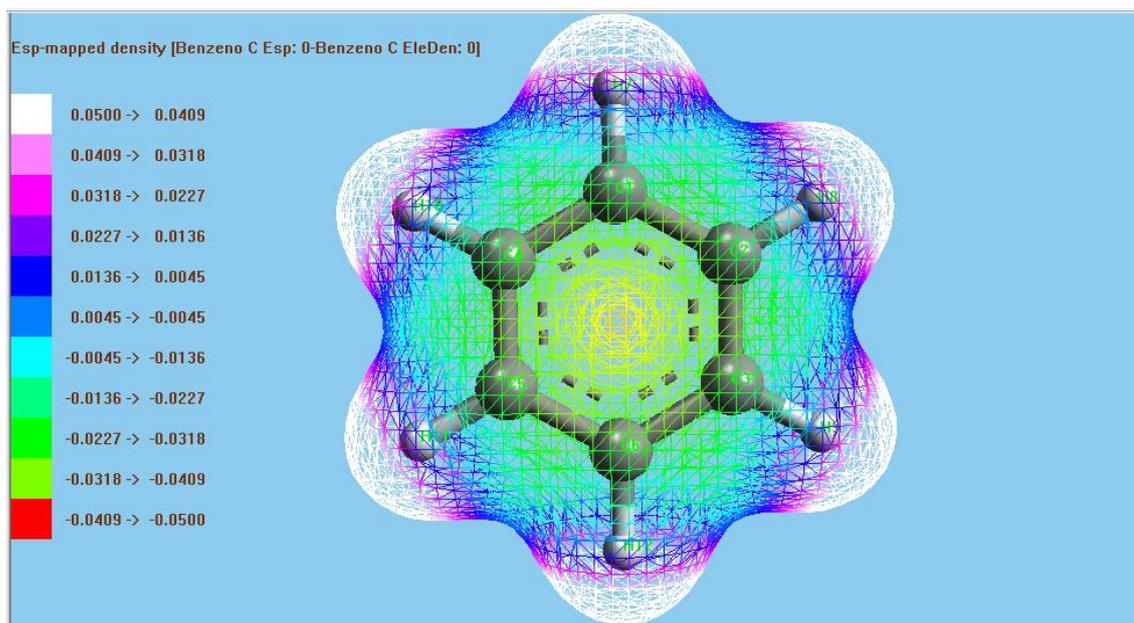


5) Altere o valor de contorno para 0.020000 e escolha a opção Translucent:



6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:

7) Selecione a opção Mesh:



8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE I - Construindo Molécula Clorobenzeno no Arguslab 9



Exercício 1

Nome:

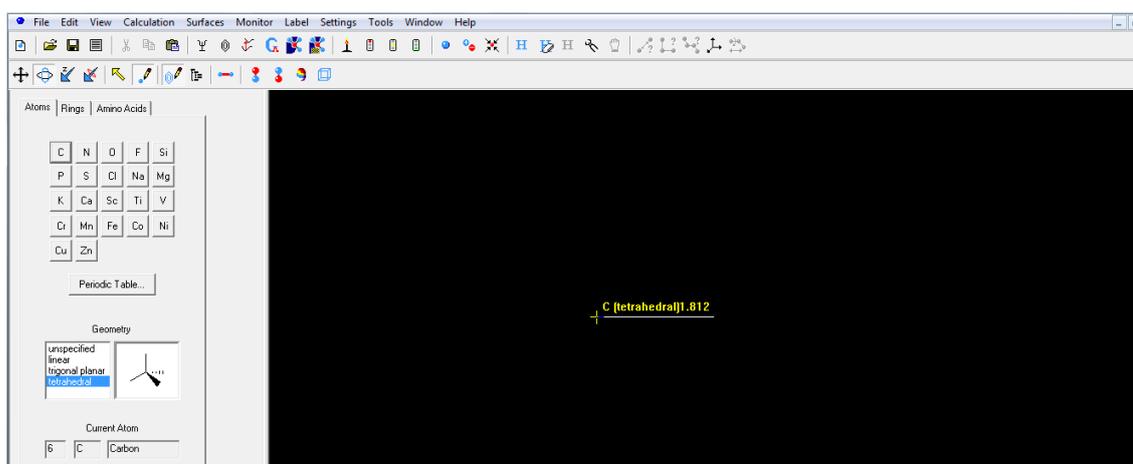
Data:

Construindo a molécula do Clorobenzeno no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

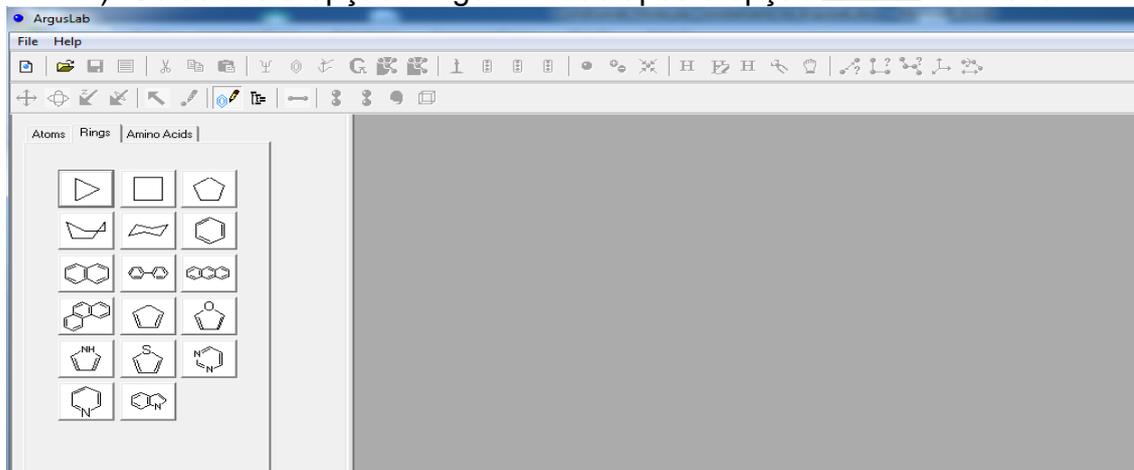


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

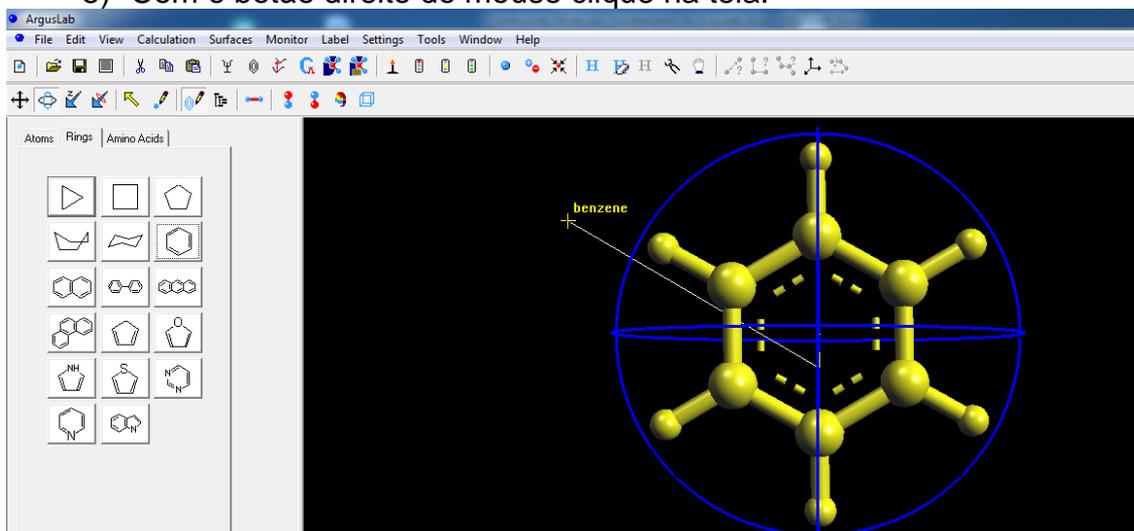


3) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

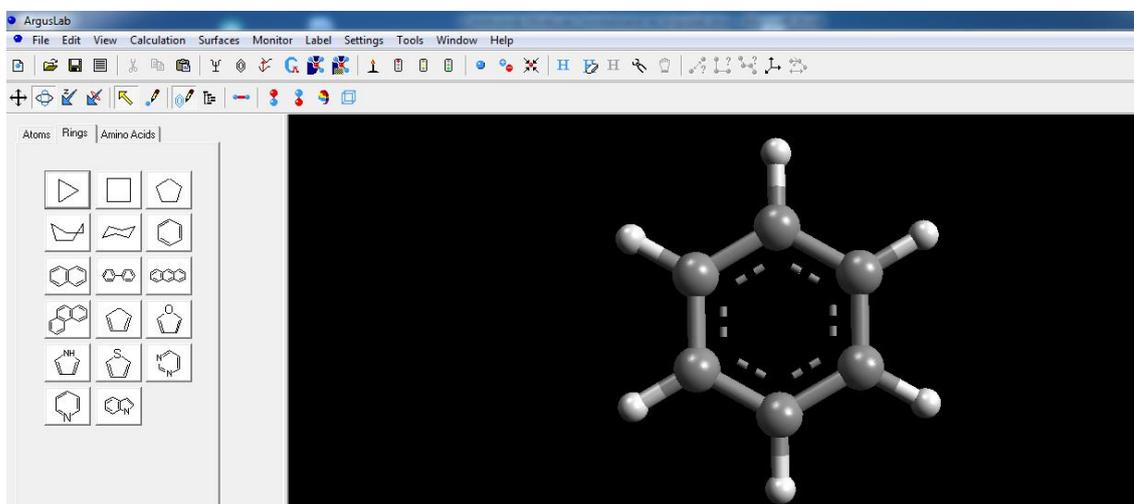
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



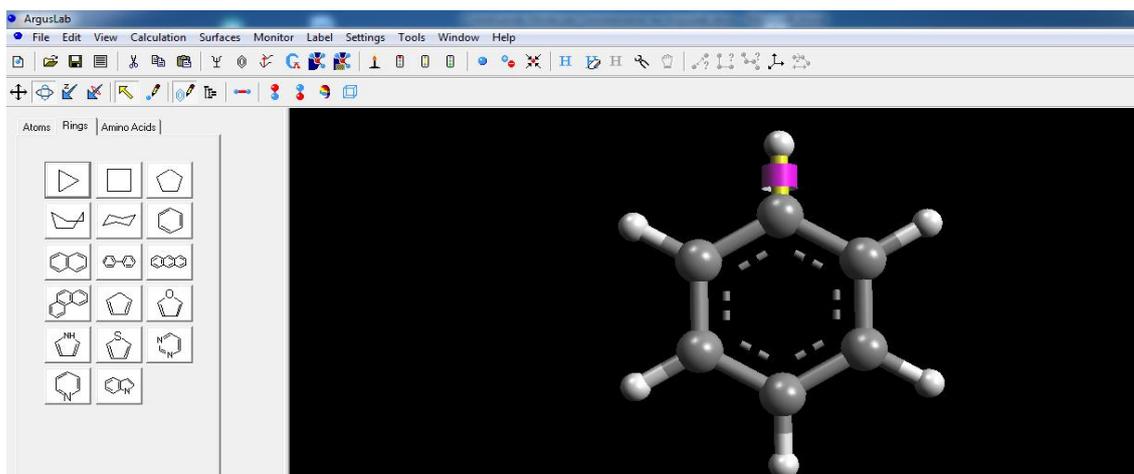
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



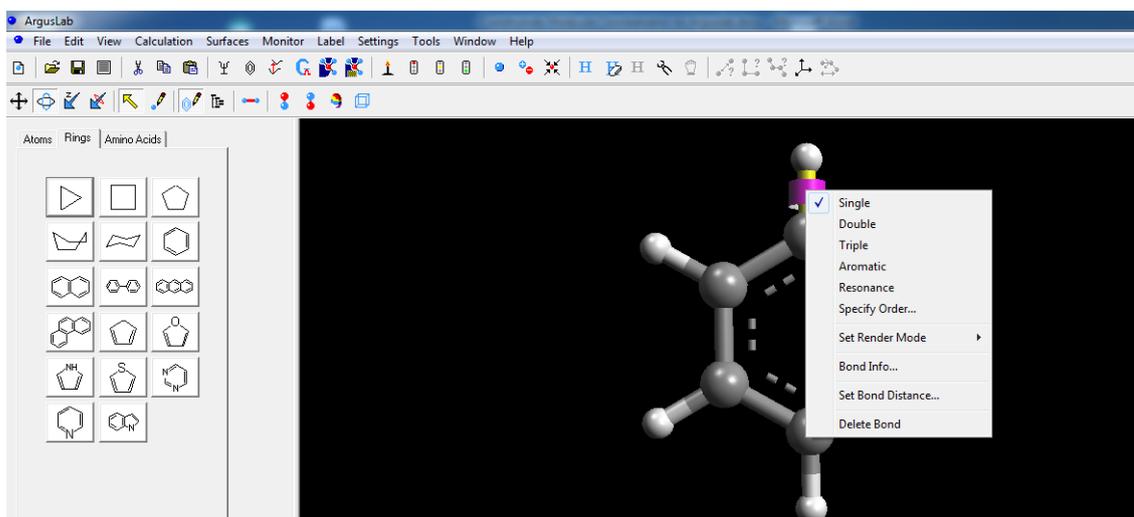
6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



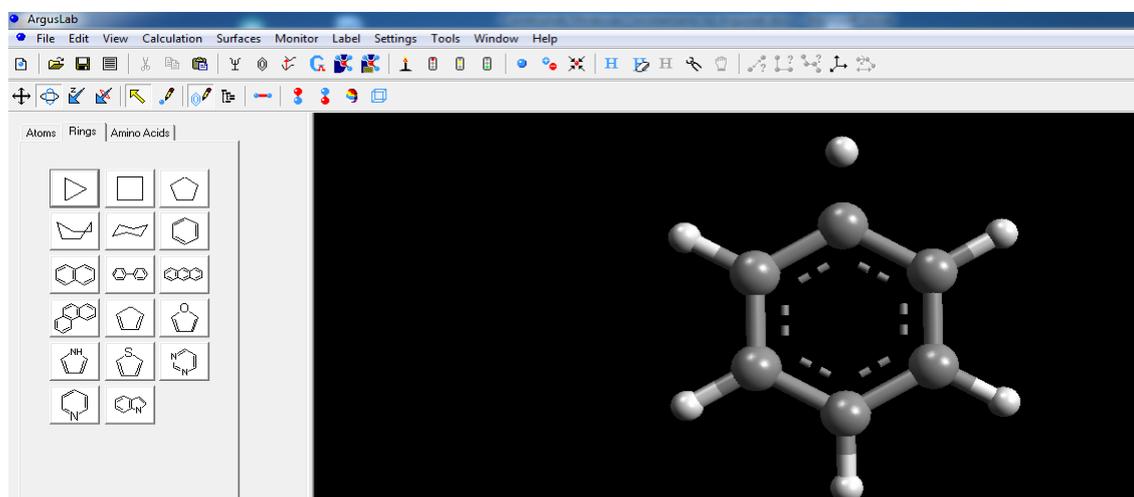
7) Com o botão esquerdo do mouse clique na ligação Carbono - Hidrogênio:



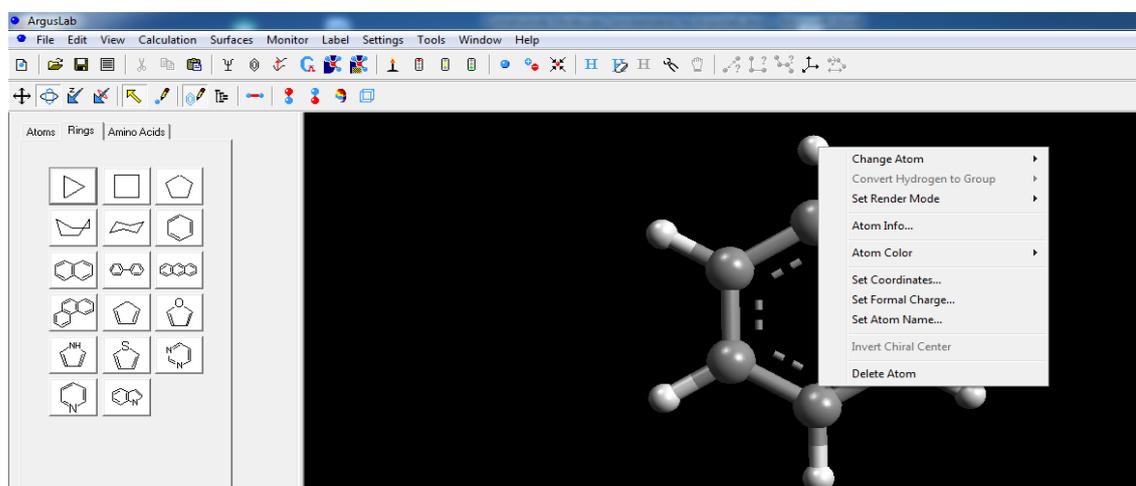
8) Clique com o botão direito do mouse sobre a ligação selecionada:



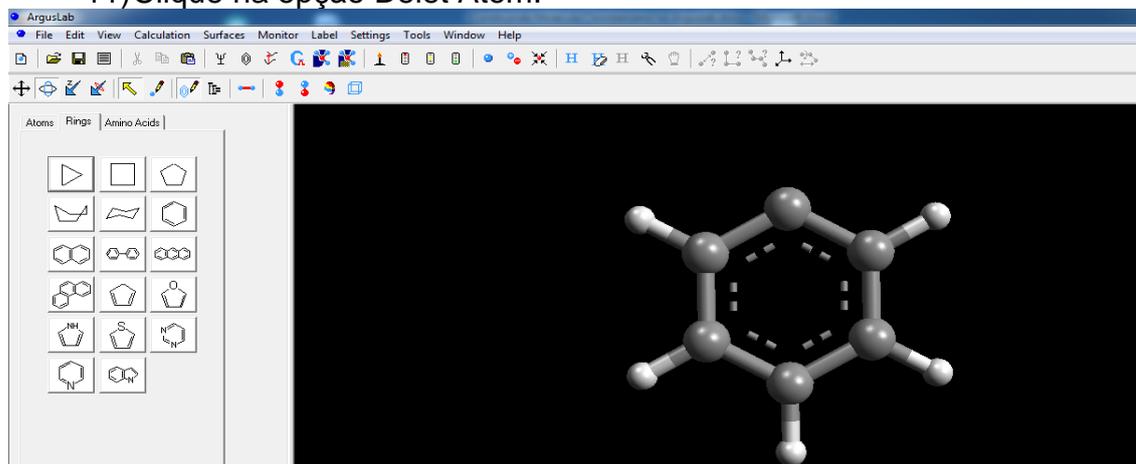
9) Clique na opção Delet Bond:



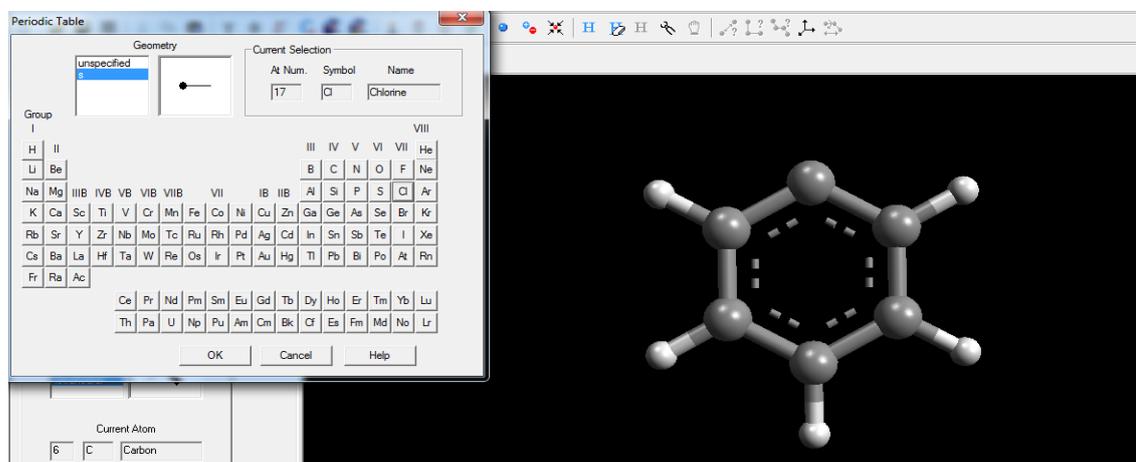
10) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo de Hidrogênio selecionado:



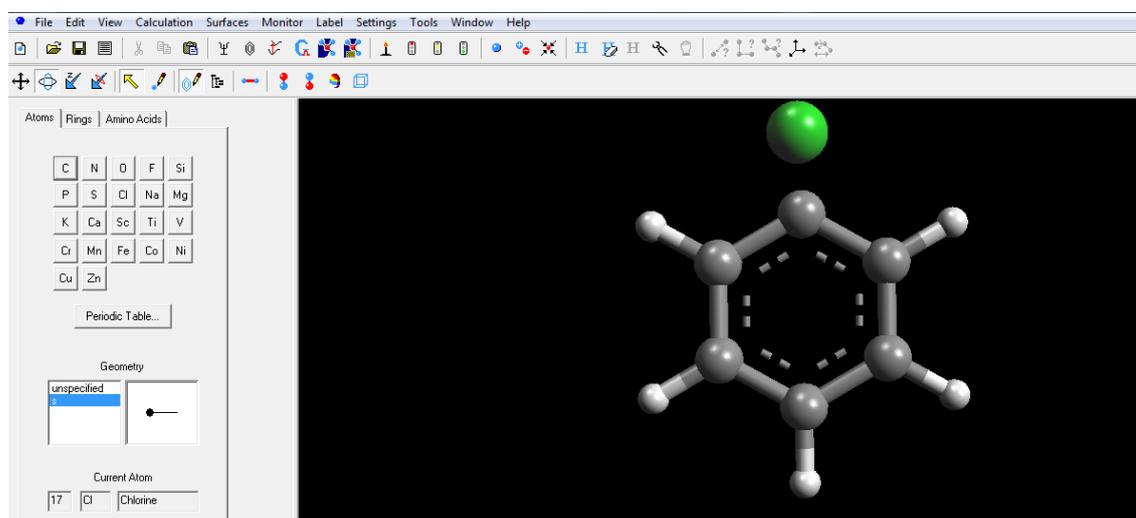
11) Clique na opção Delet Atom:



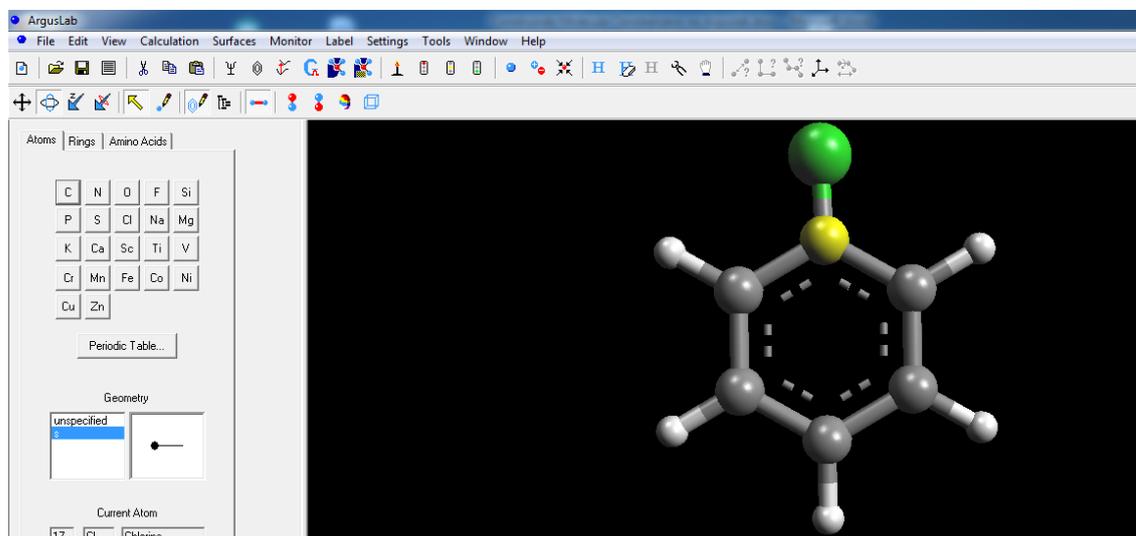
12) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela periódica, e após clique no átomo de Cloro com a opção S e clique em OK:



13) Com o botão direito do mouse clique no local do átomo de Hidrogênio que foi deletado:



14) Para inserir a ligação entre o átomo de Cloro e o Carbono: selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo de Cloro e Carbono, a ligação é inserida:

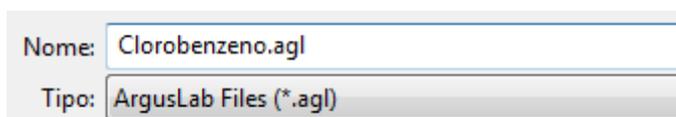
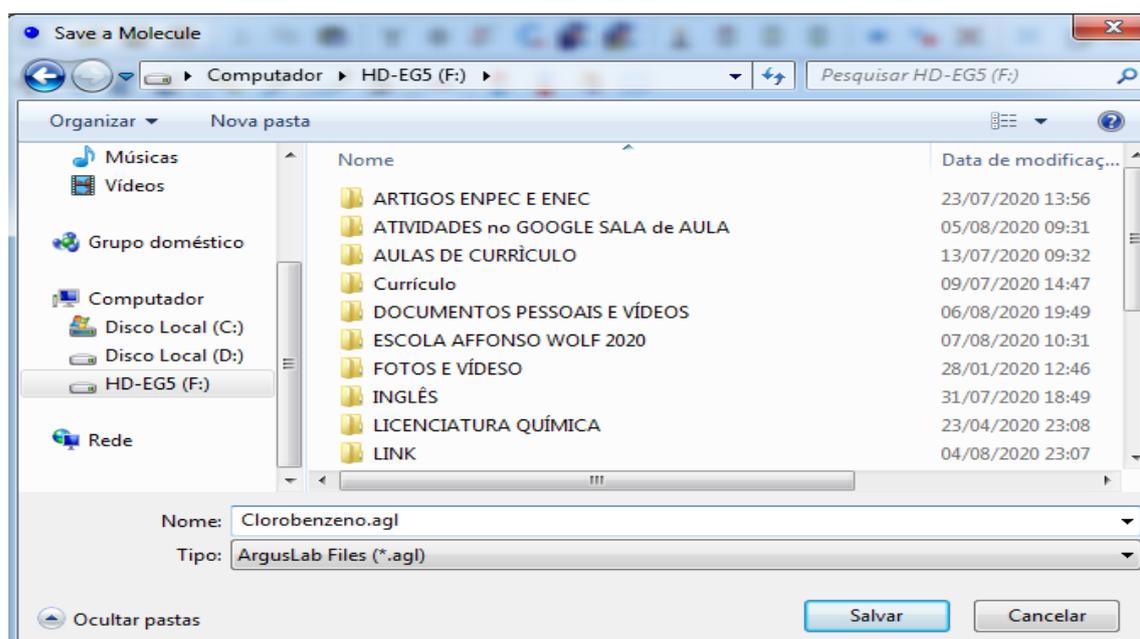


15) Salve o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save As

16) Dê o nome para o arquivo de Clorobenzeno.agl

17) Escolha a pasta

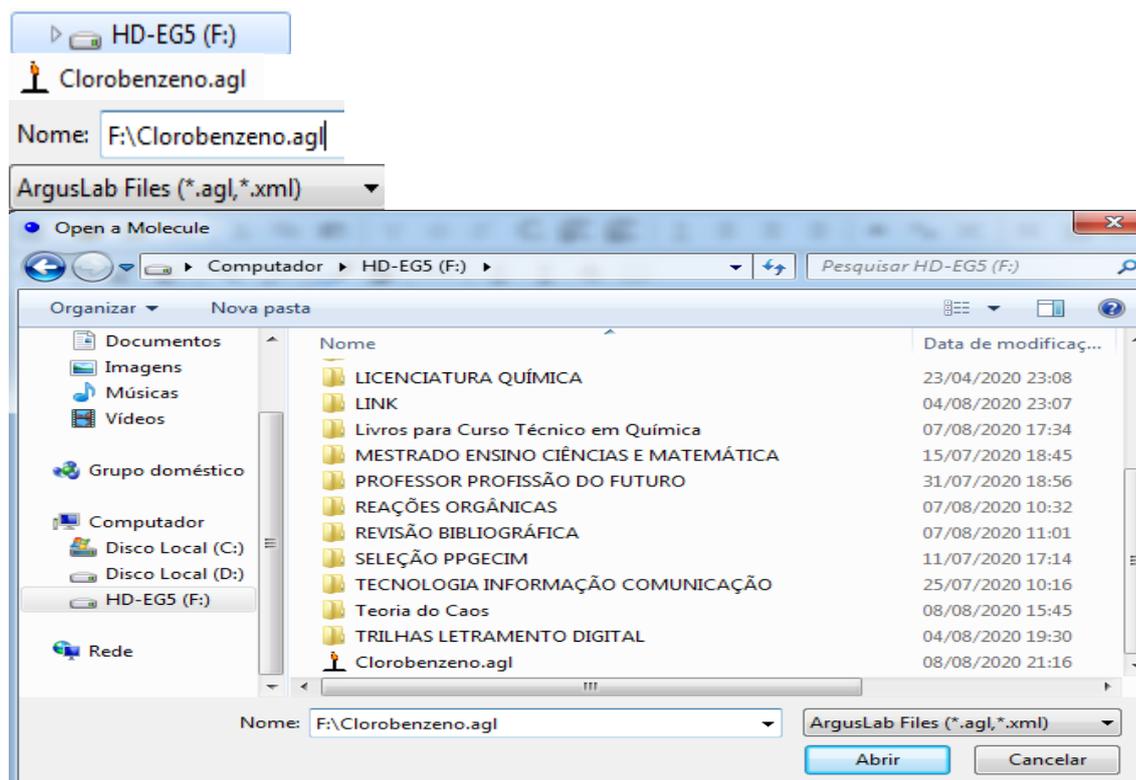
18) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



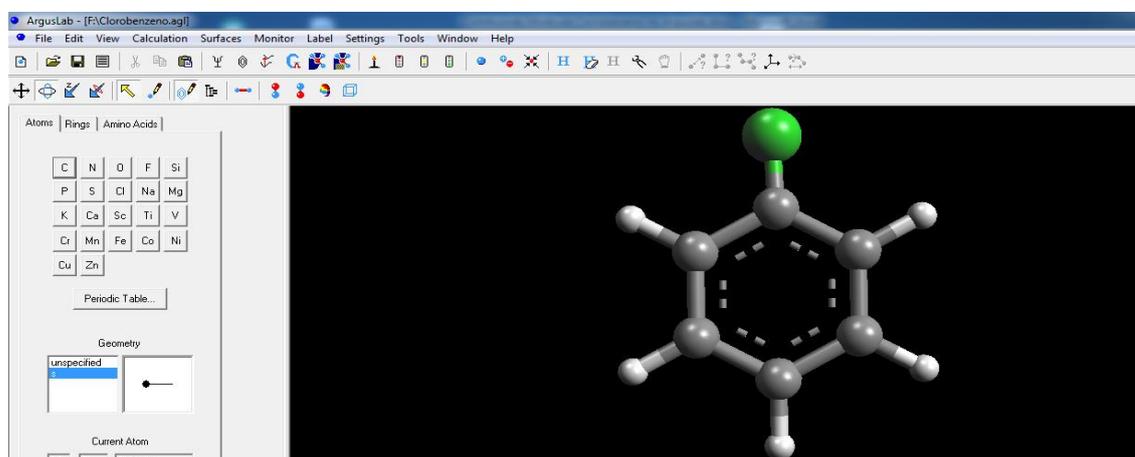
Exercício 2

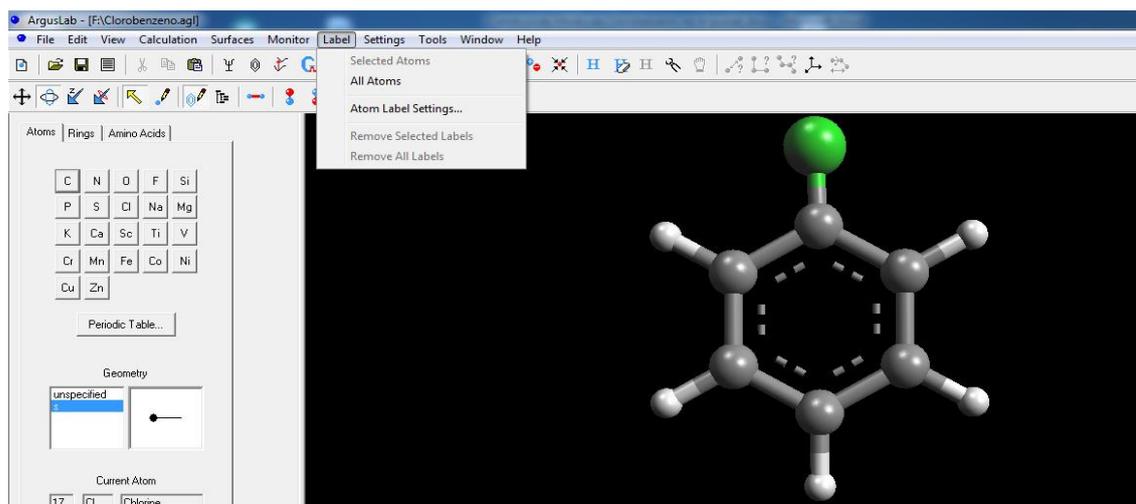
Otimizar a Geometria da molécula do Clorobenzeno Arguslab

- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

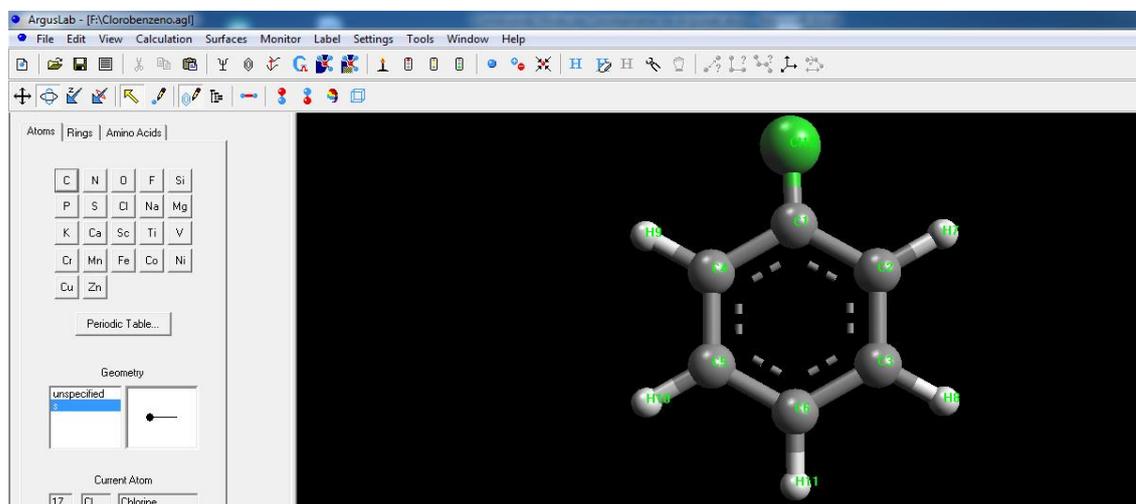


- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:

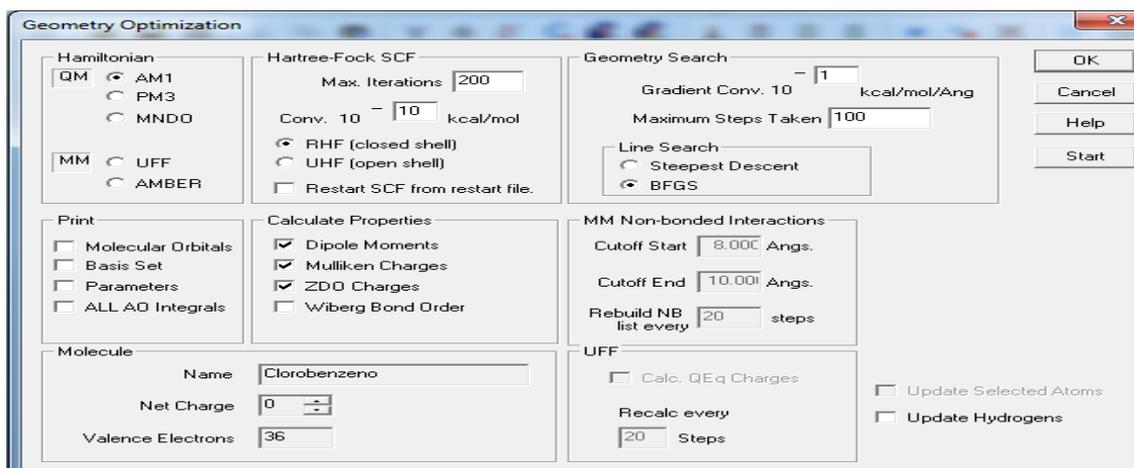




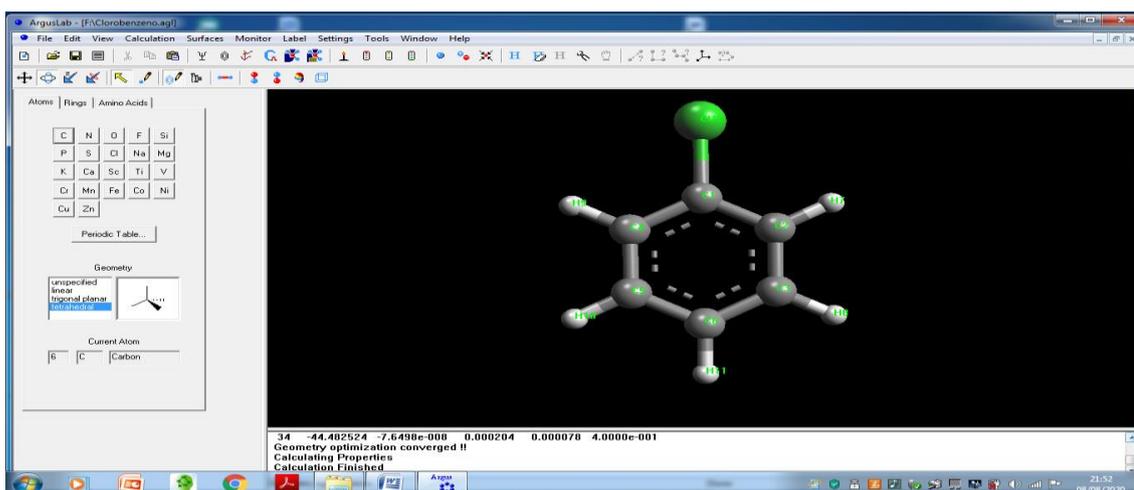
4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



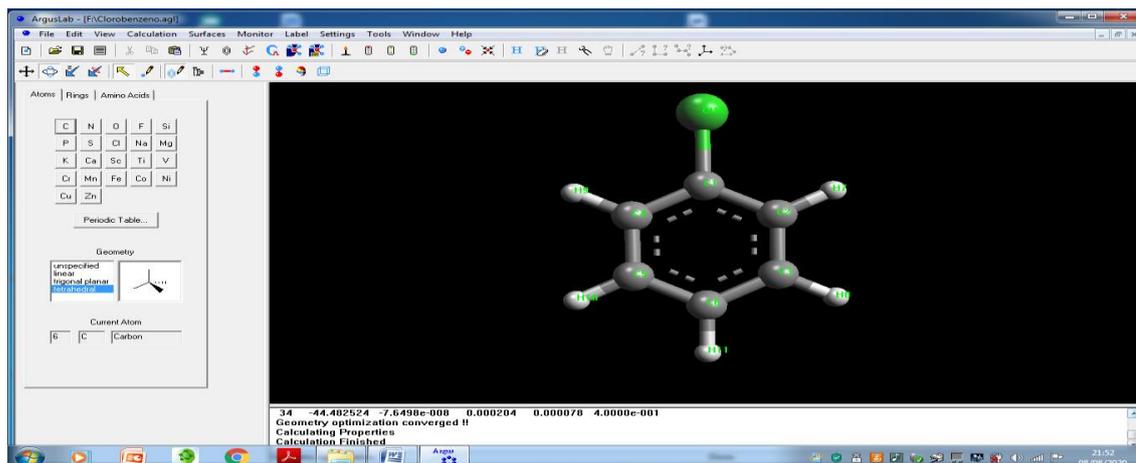
5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Muliken Charges e ZDO Charges:



- 6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



- 7) Selecione a opção  Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Clorobenzeno.out.txt.
- 8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção  na Barra de Ferramentas:



9) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

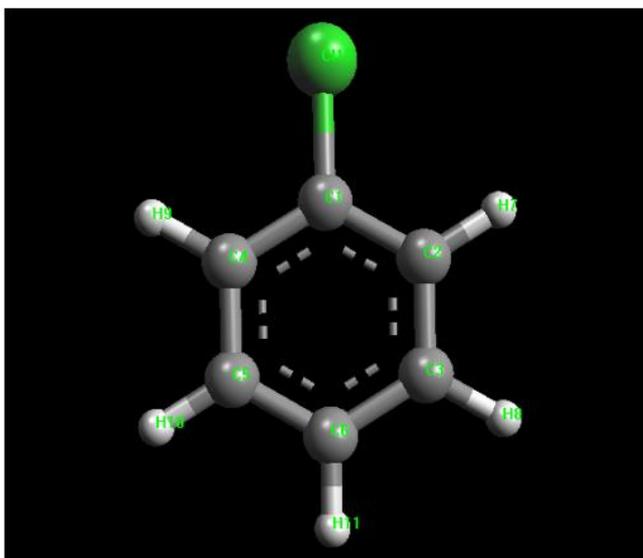
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Clorobenzeno

- 1) Abra o arquivo texto Clorobenzeno.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Muliken, faça um Print Screenshot da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic Charges

1	C	-0.0808
2	C	-0.1770
3	C	-0.1835
4	C	-0.1771
5	C	-0.1834
6	C	-0.1919
7	H	0.2129
8	H	0.1998
9	H	0.2129
10	H	0.1999
11	H	0.1981
12	Cl	-0.0298

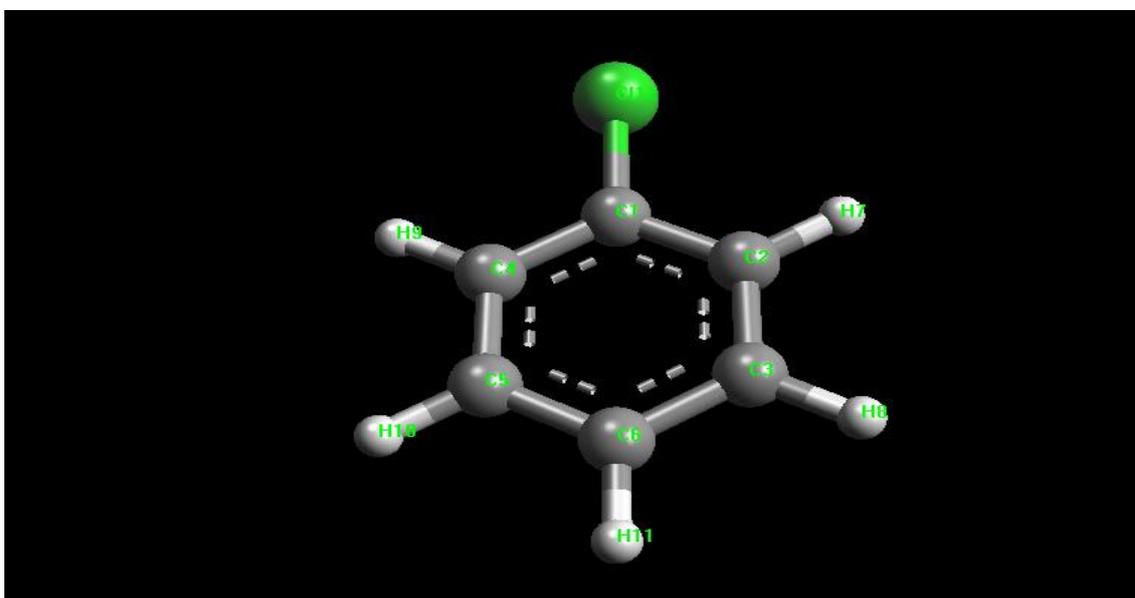
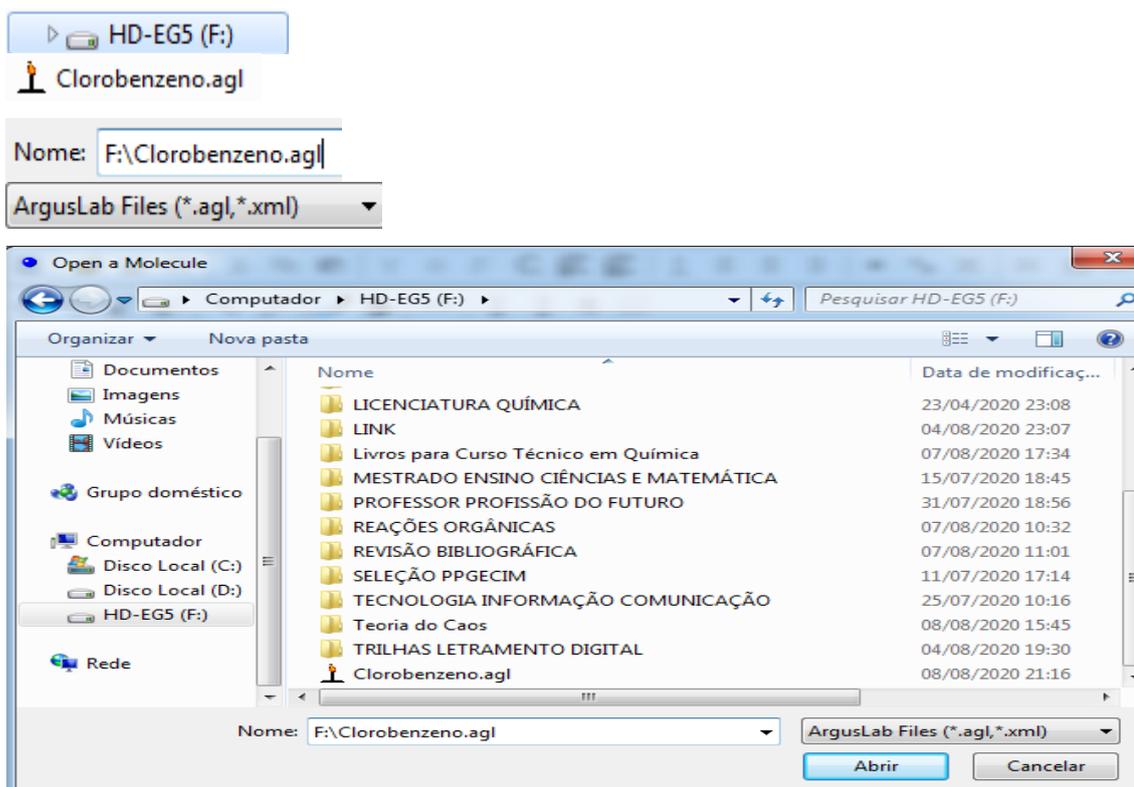
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



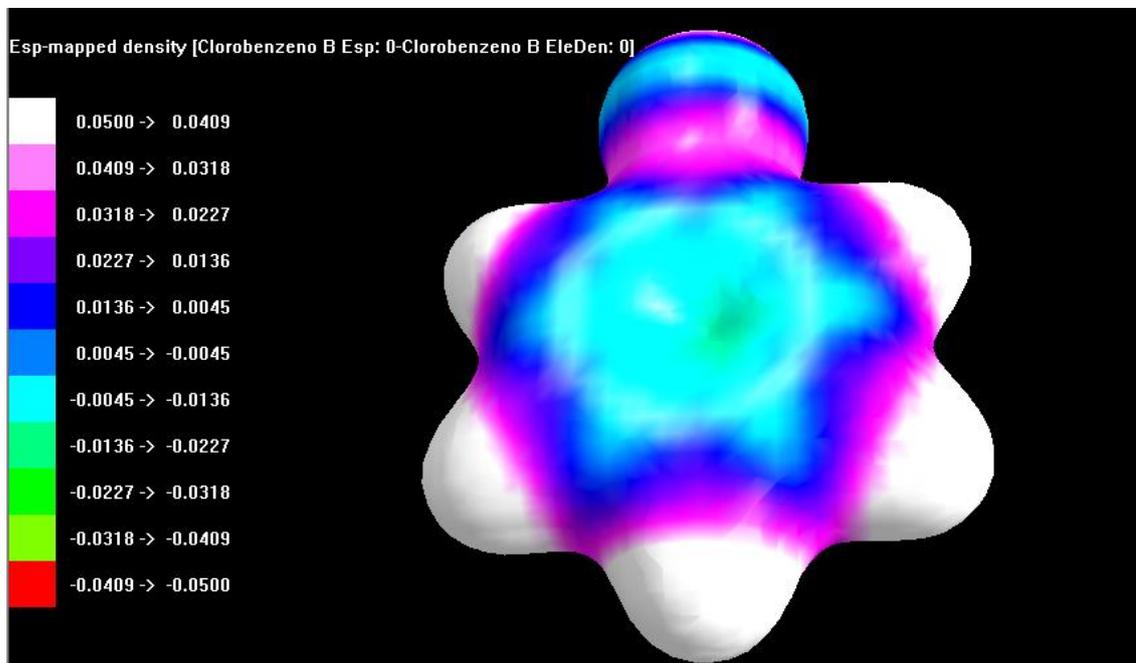
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Clorobenzeno no Arguslab

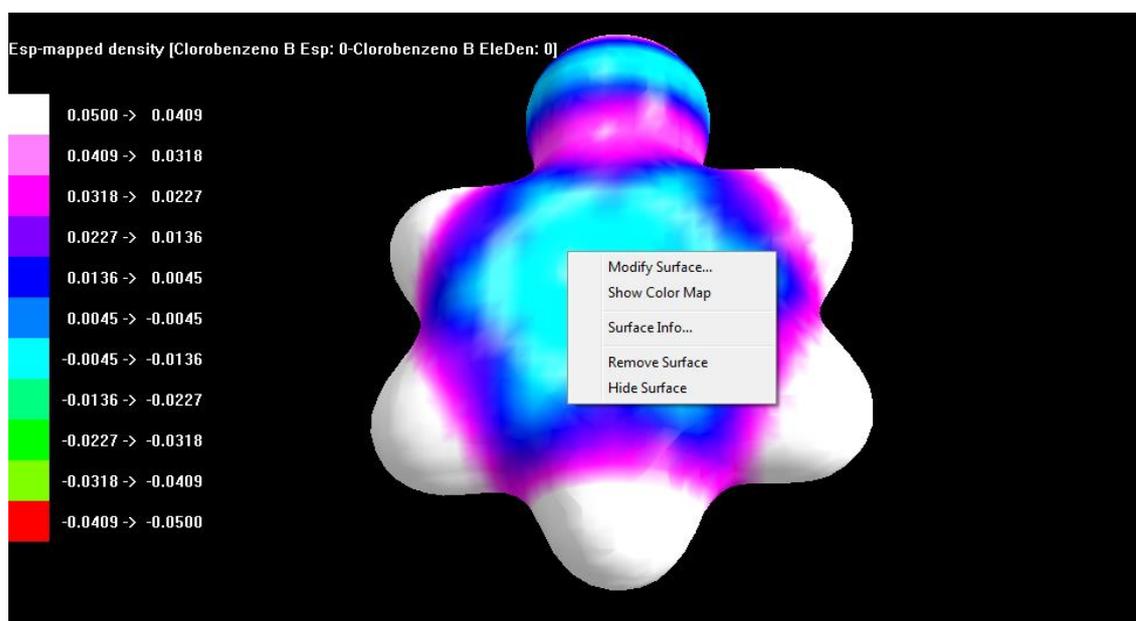
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

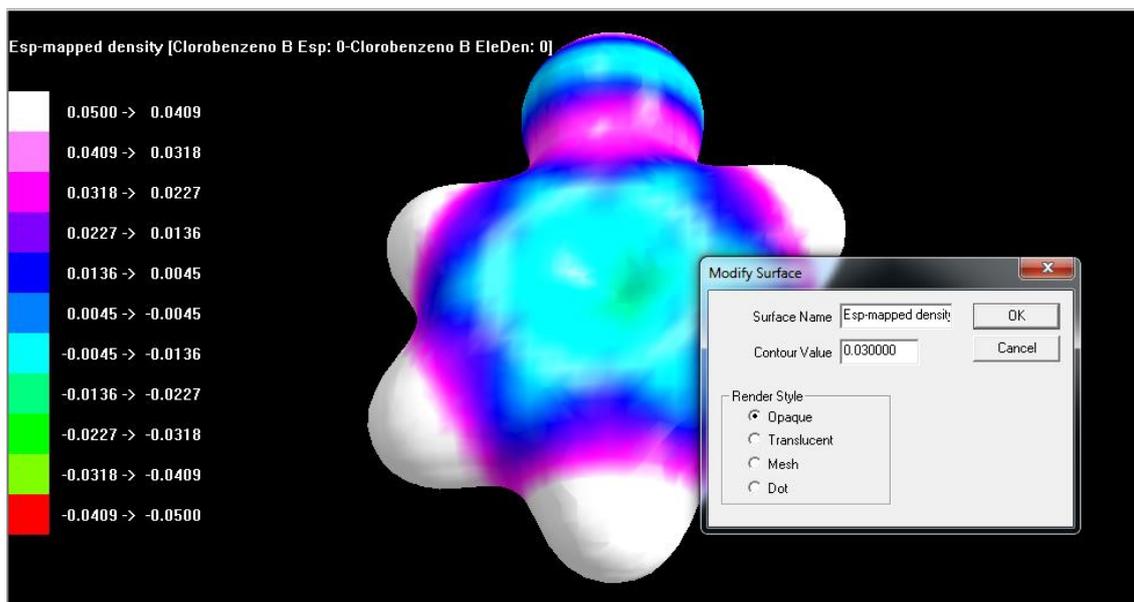


- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula de Clorobenzeno ficará com o seguinte aspecto:

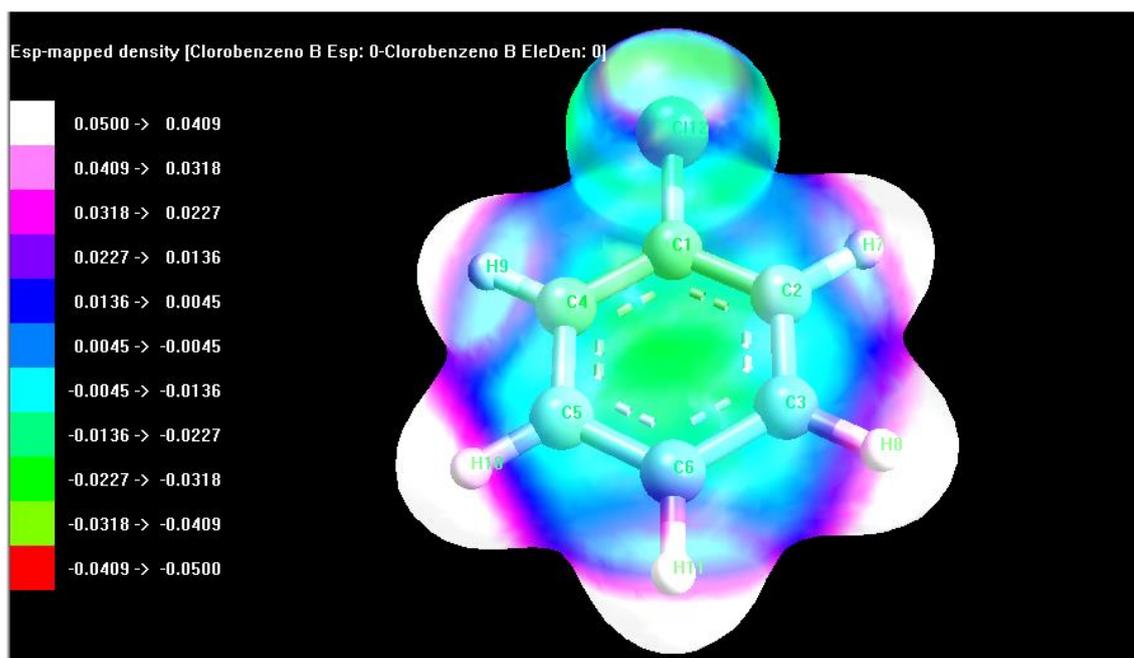


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:

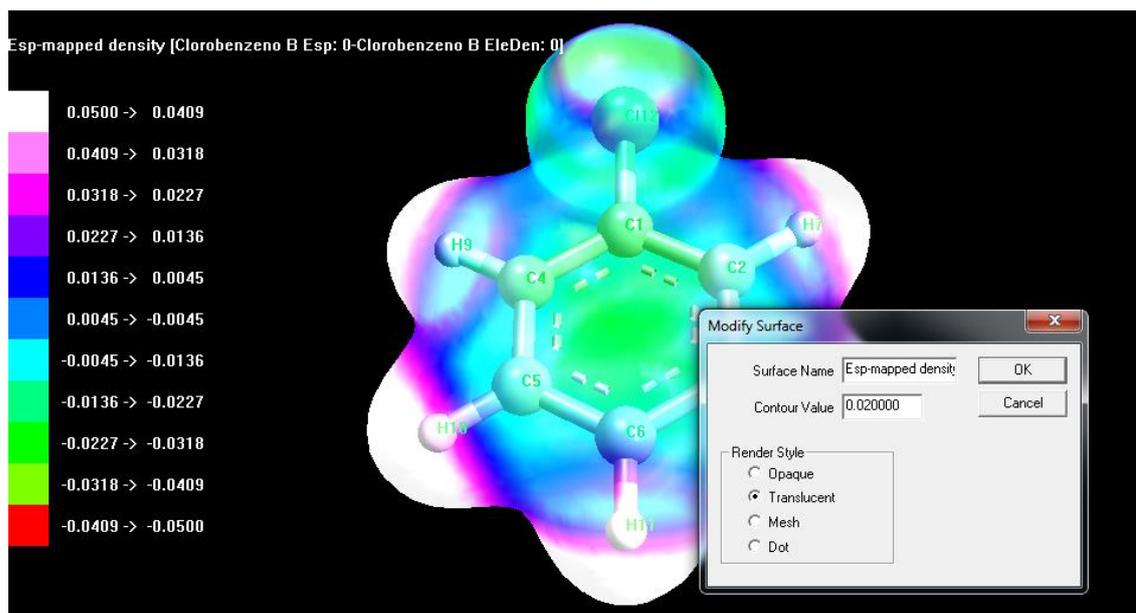




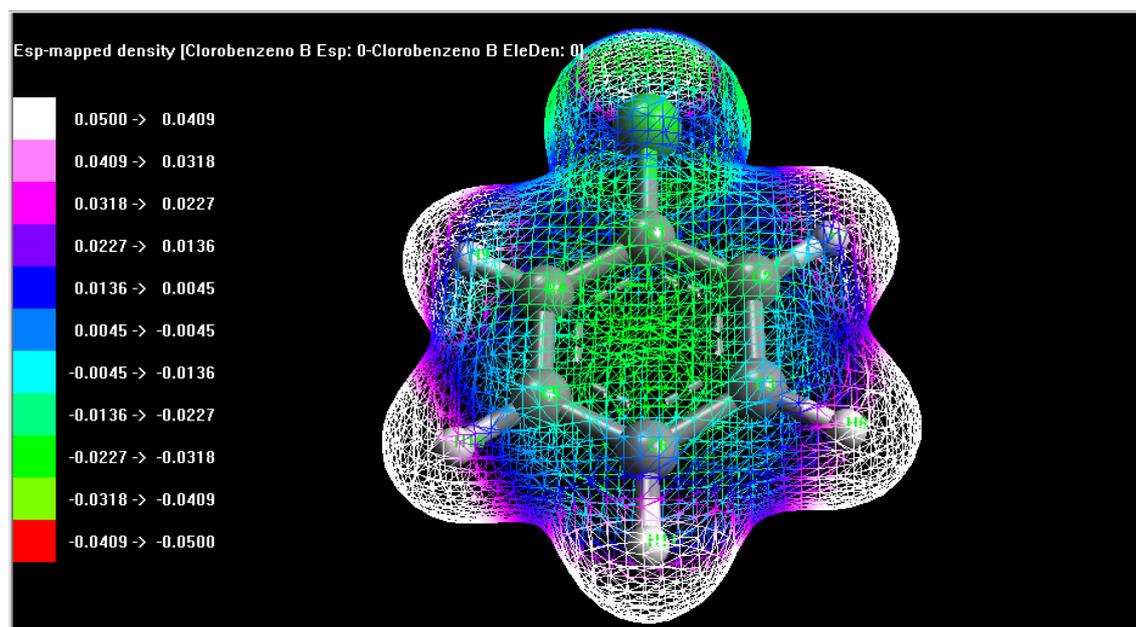
5) Altere o valor de contorno para 0.020000 e escolha a opção Translucent:



6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:



7) Selecione a opção Mesh:



8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE J - Construindo Molécula Fenol no Arguslab 10



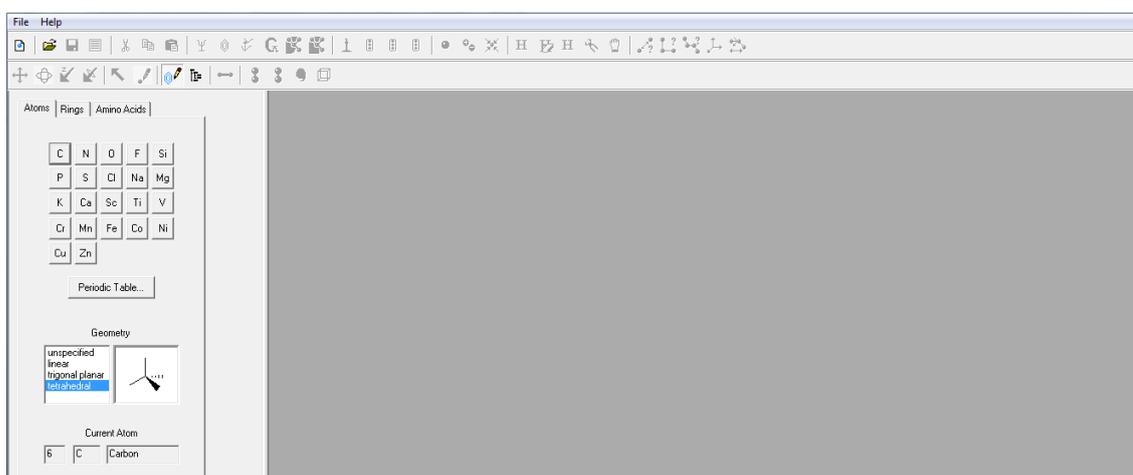
Exercício 1

Nome:

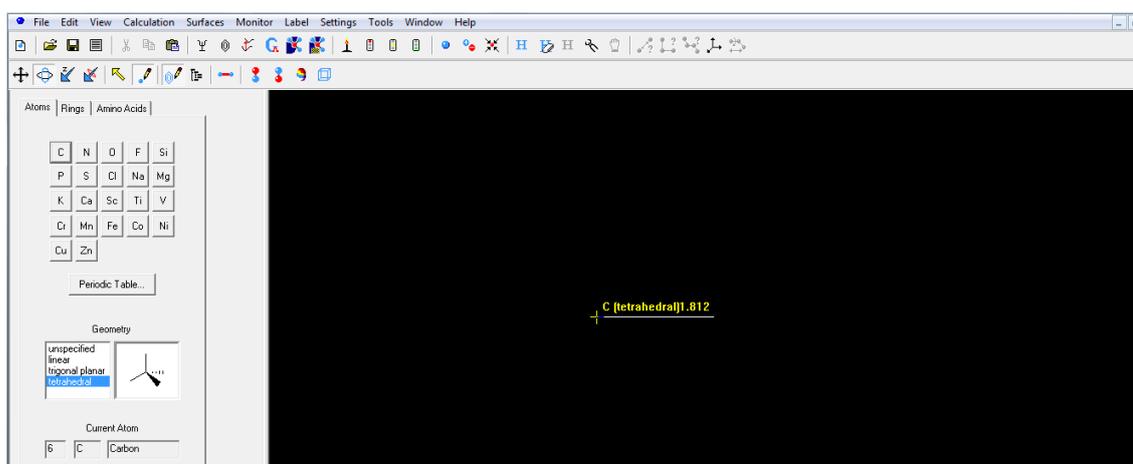
Data:

Construindo a molécula do Fenol no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

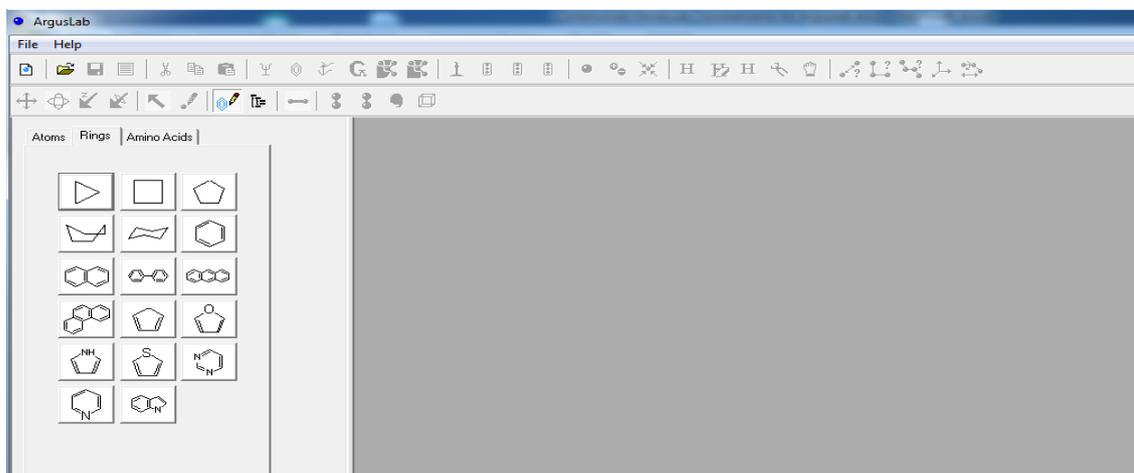


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

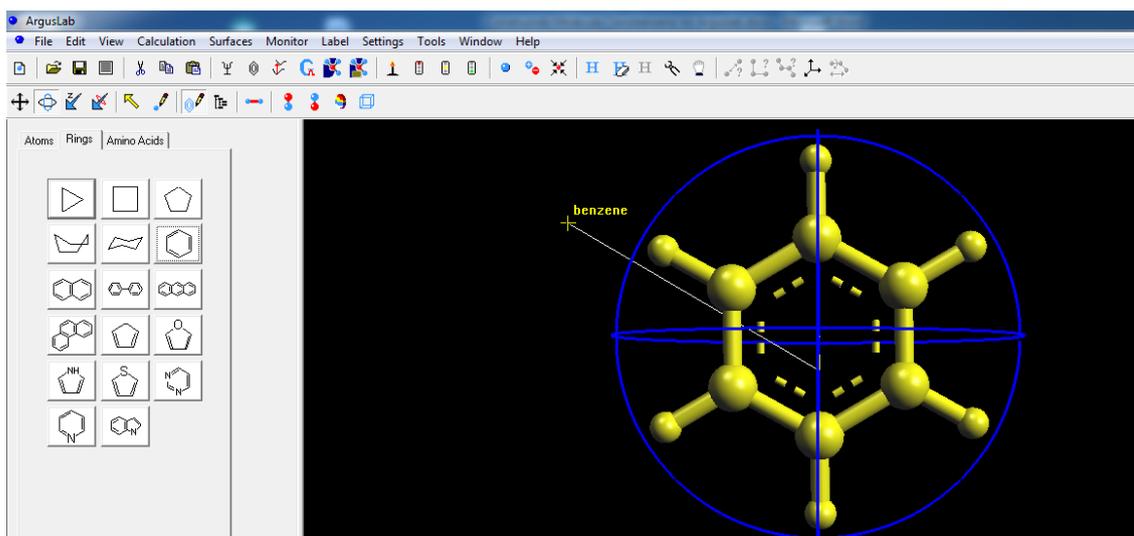


3) Clicar no botão na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

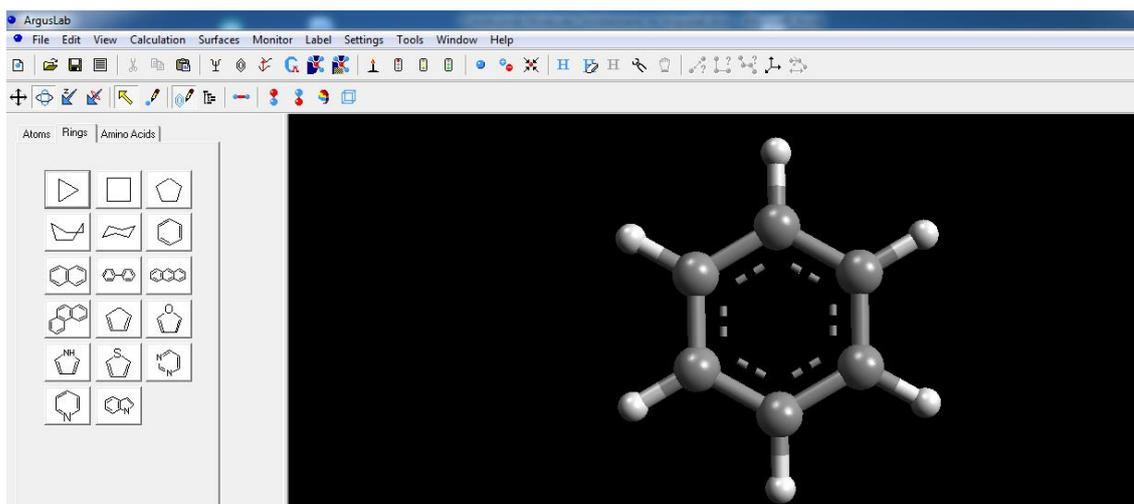
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



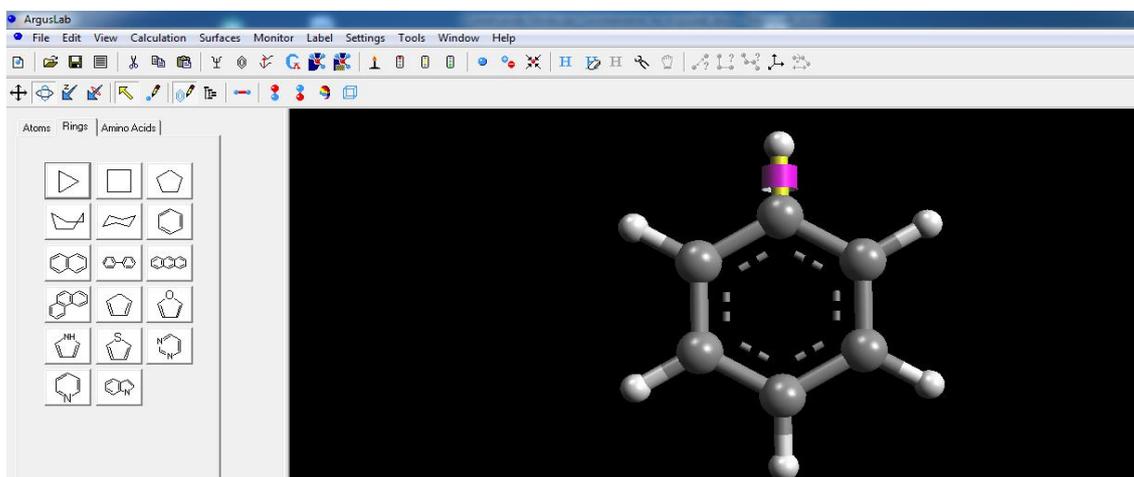
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



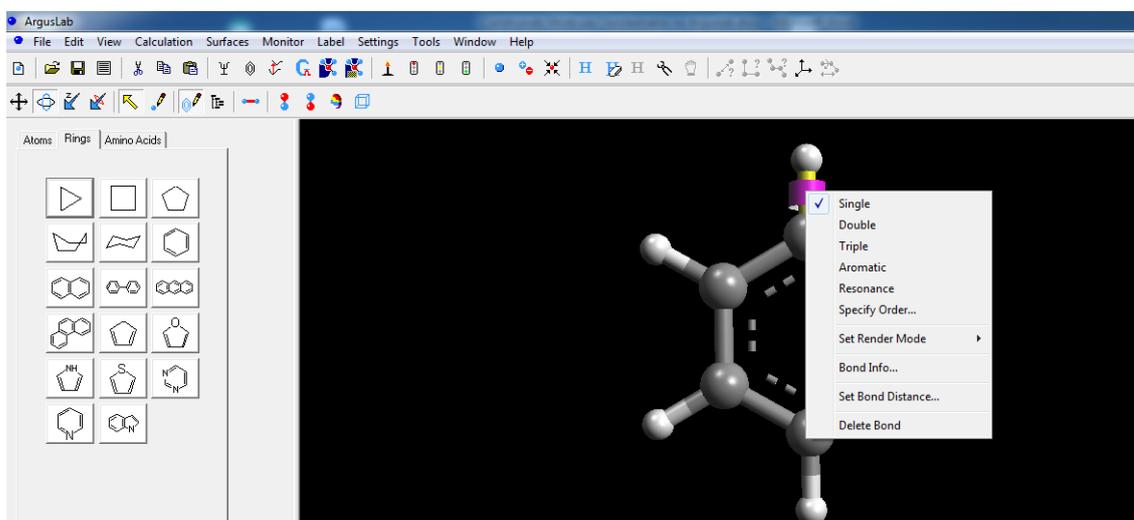
6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



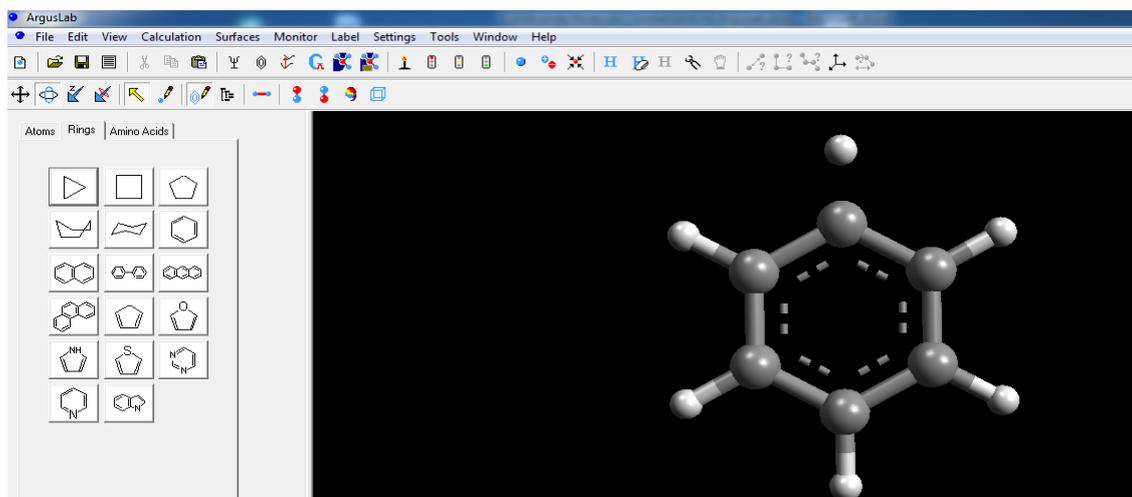
7) Com o botão esquerdo do mouse clique na ligação Carbono - Hidrogênio:



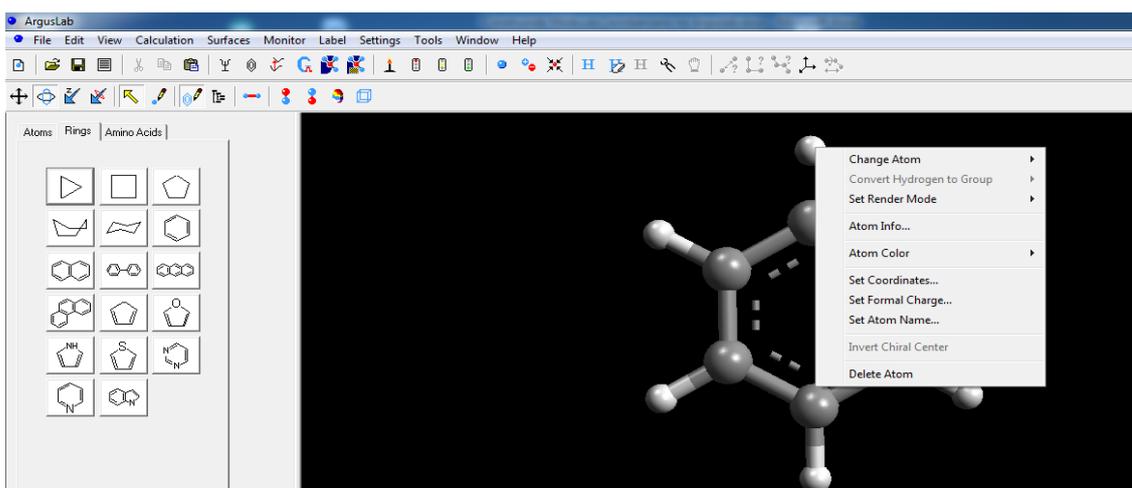
8) Clique com o botão direito do mouse sobre a ligação selecionada:



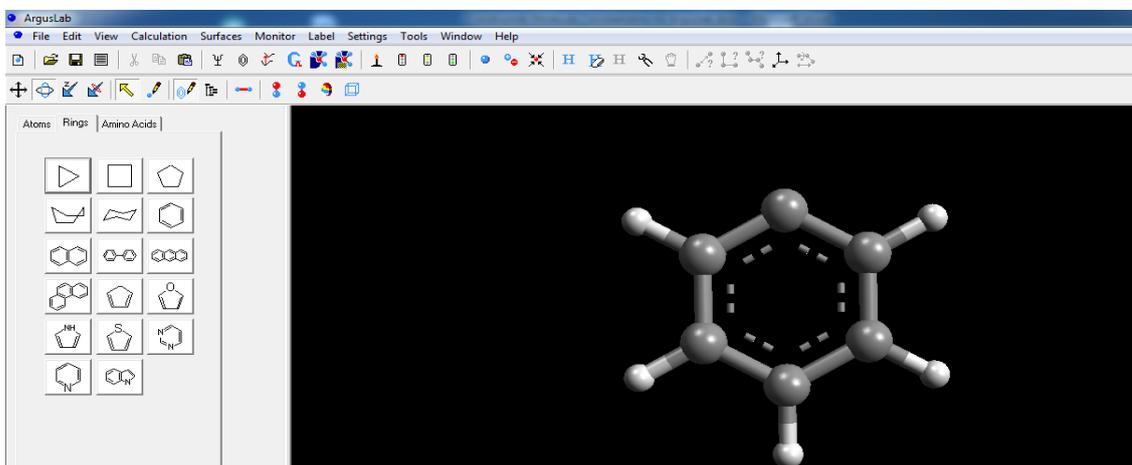
9) Clique na opção Delete Bond:



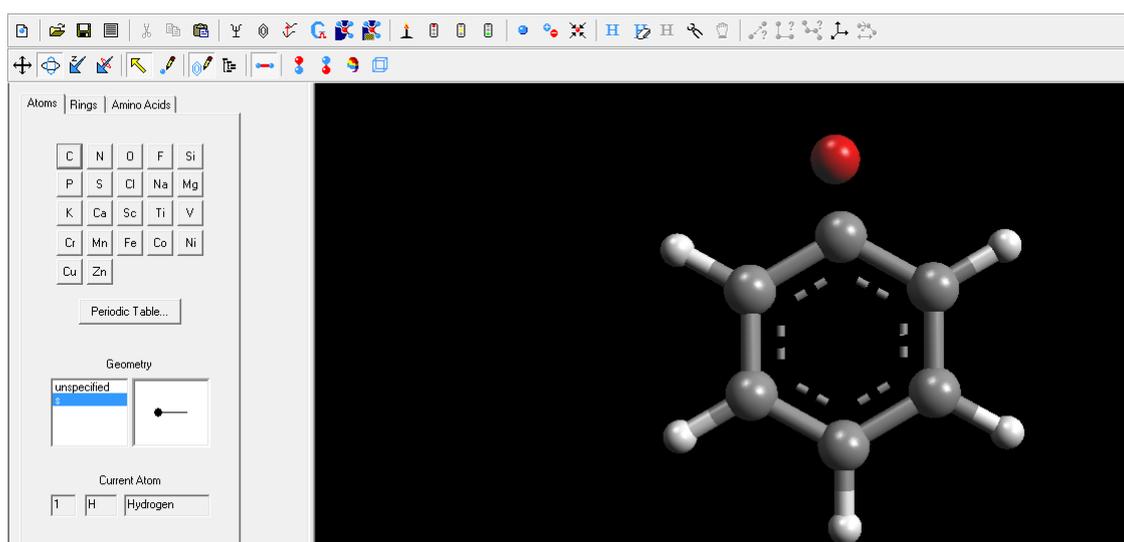
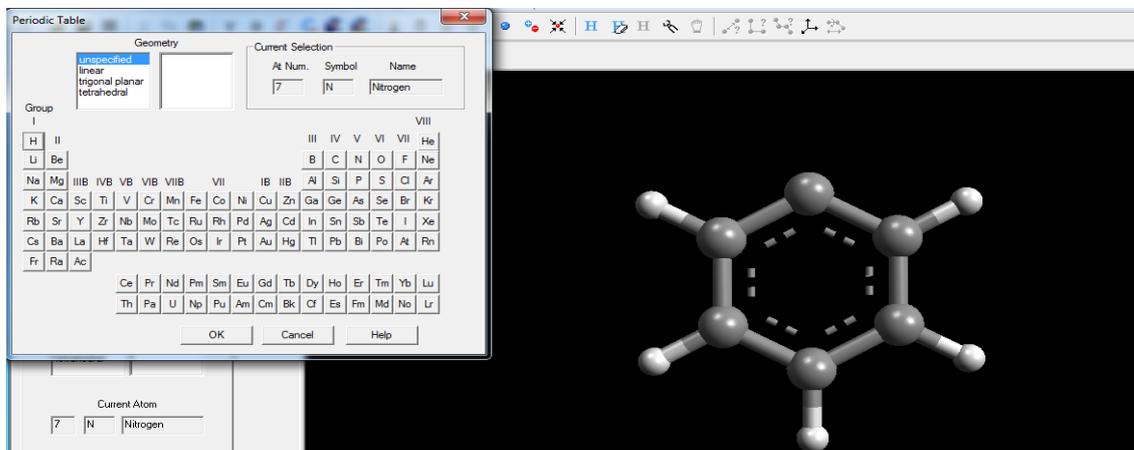
10) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo de Hidrogênio selecionado:



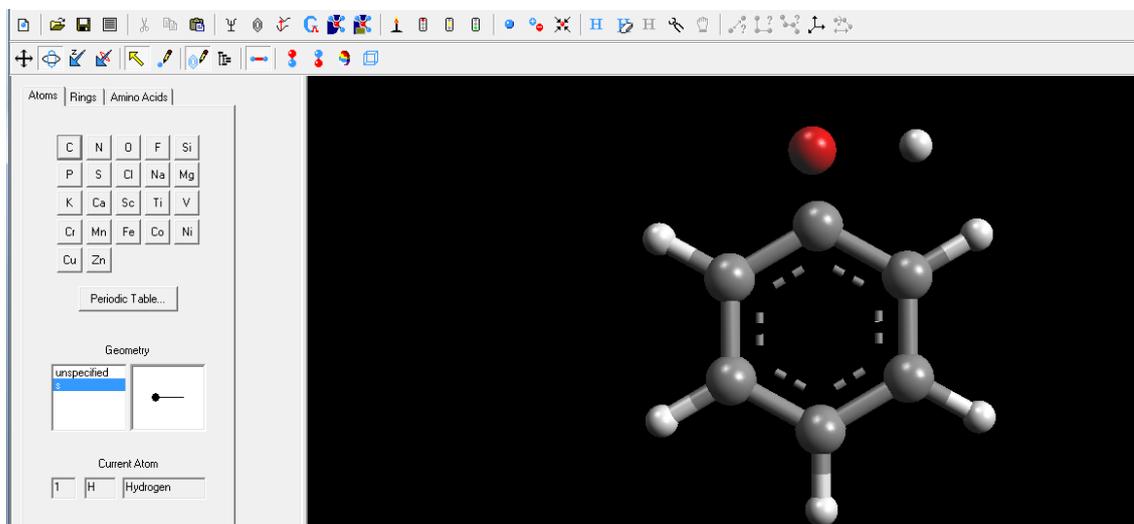
11) Clique na opção Delet Atom:



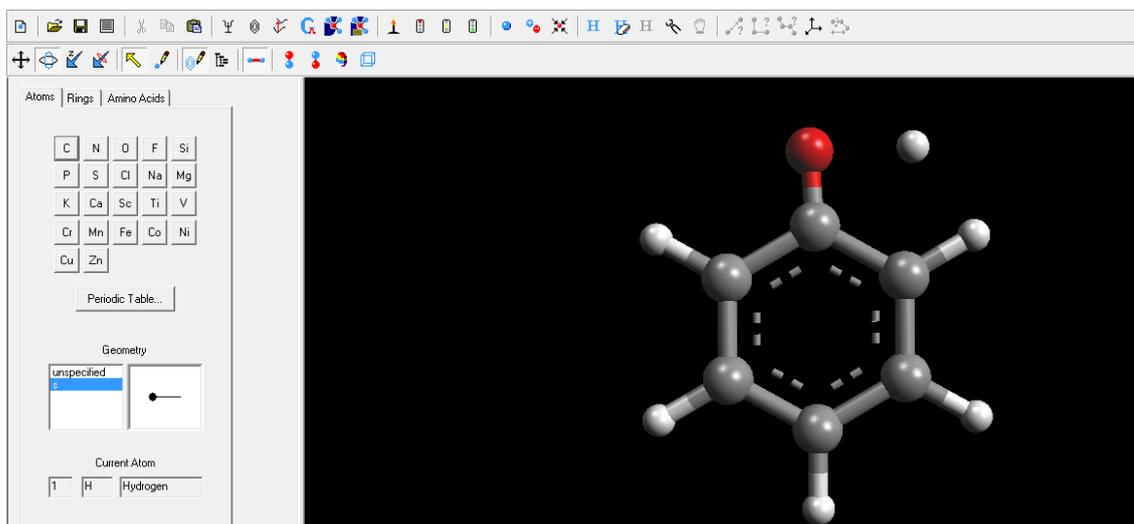
12) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela periódica, e após clique no átomo de Oxigênio com a opção unspecified e clique em OK:



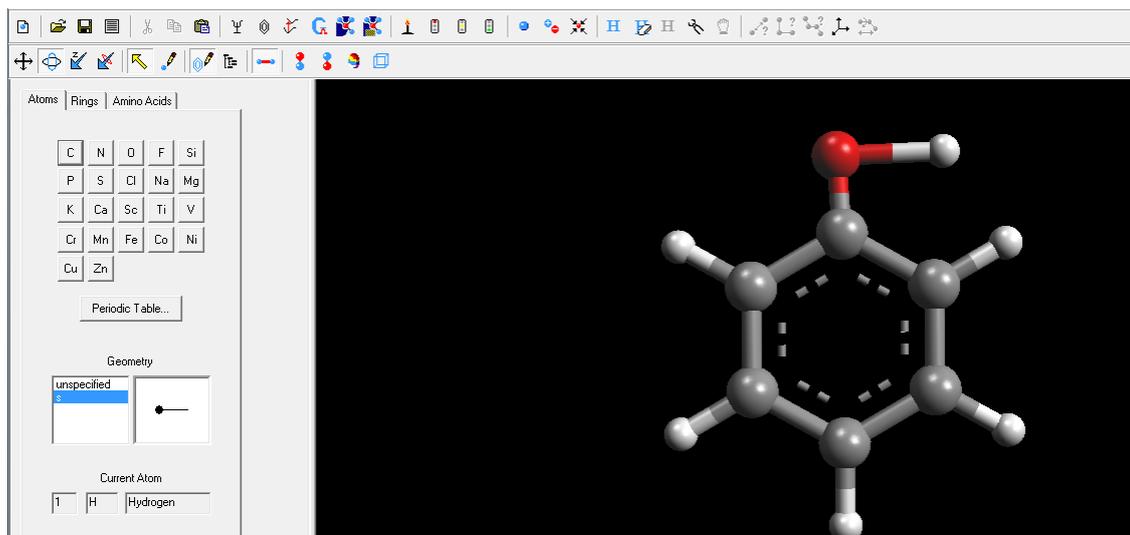
13) Selecione  na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela Periódica, e após clique no átomo de Hidrogênio opção S e clique em OK:



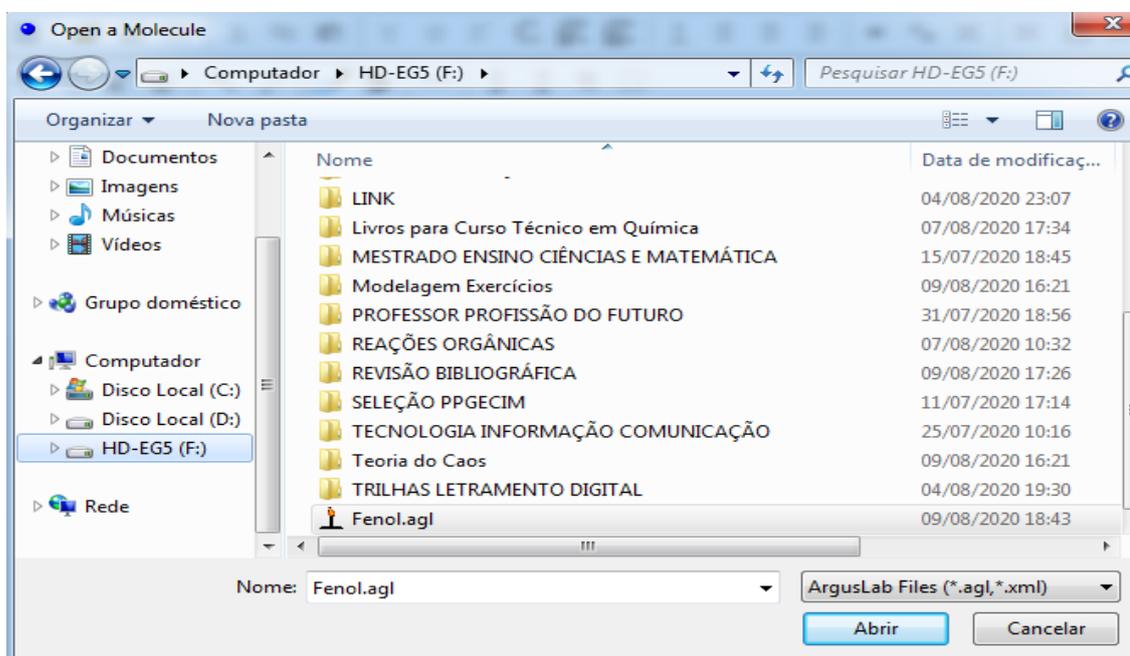
14) Para inserir a ligação entre o átomo de Oxigênio e o de Carbono: selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo Oxigênio e Carbono, a ligação é inserida:



15) Para inserir a ligação entre o átomo de Oxigênio e o de Hidrogênio: selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo Oxigênio e Hidrogênio, a ligação é inserida:



- 16) Feche o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save
- As
- 17) Dê o nome para o arquivo de Fenol.agl
- 18) Escolha a pasta
- 19) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



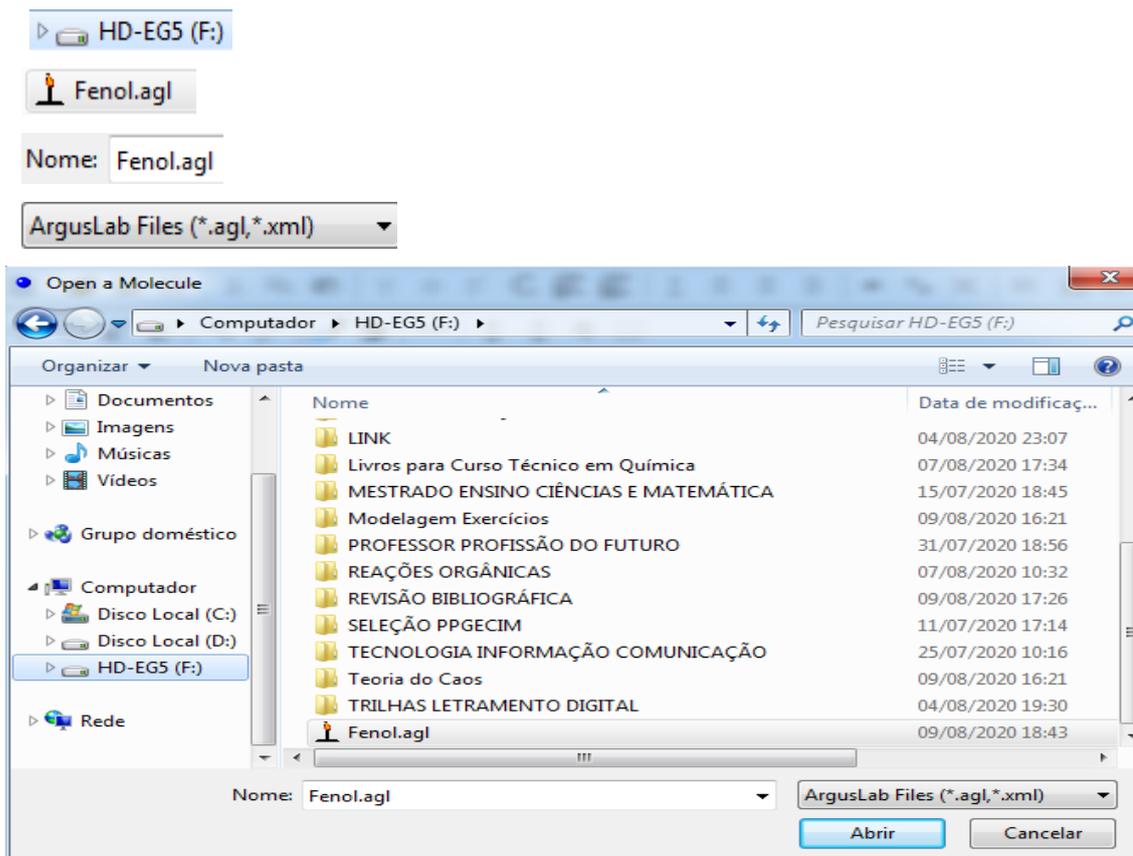
Nome: Fenol.agl

ArgusLab Files (*.agl;*.xml)

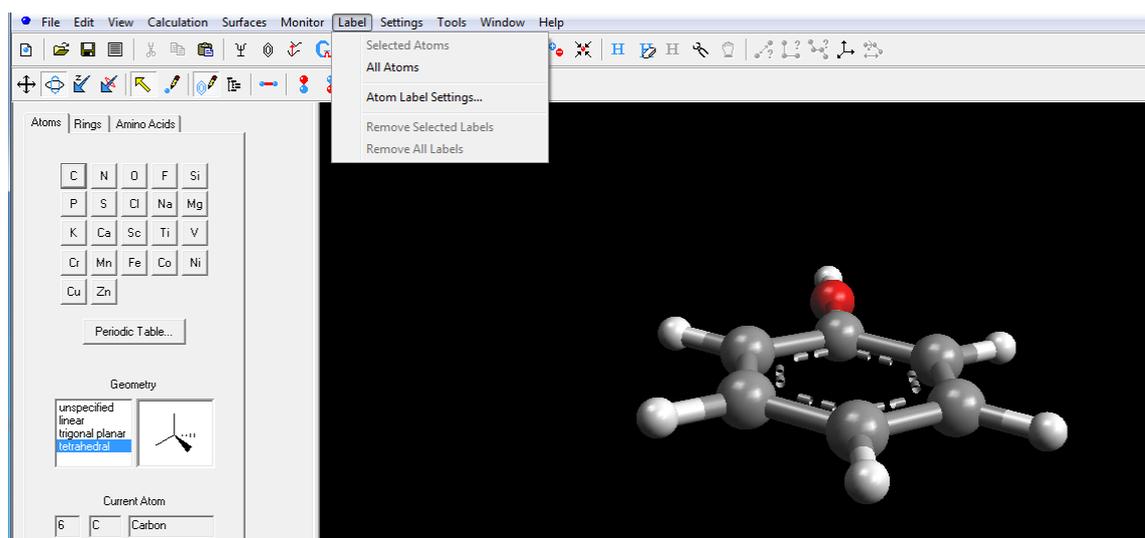
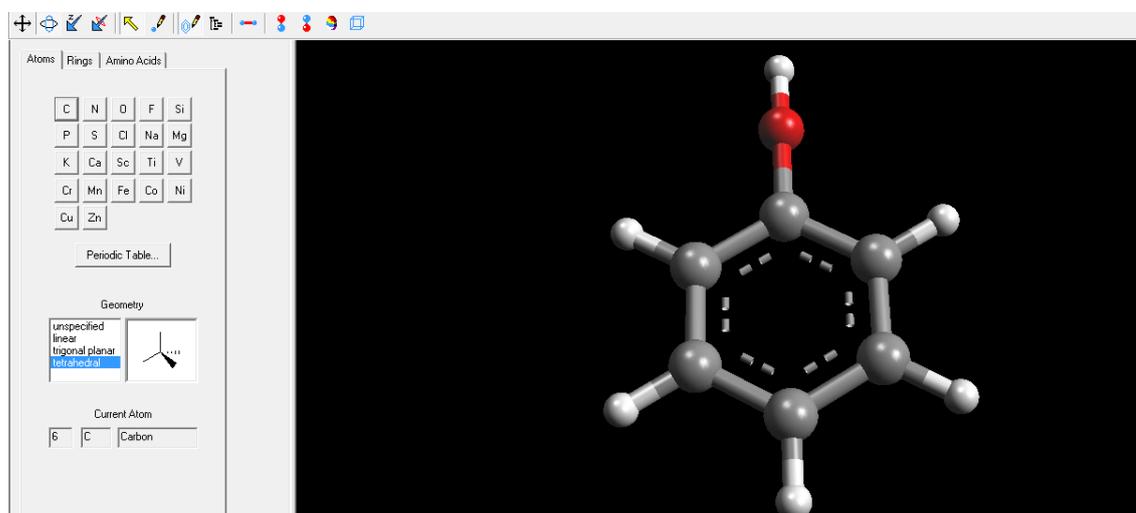
Exercício 2

Otimizar a Geometria da molécula do Fenol no Arguslab

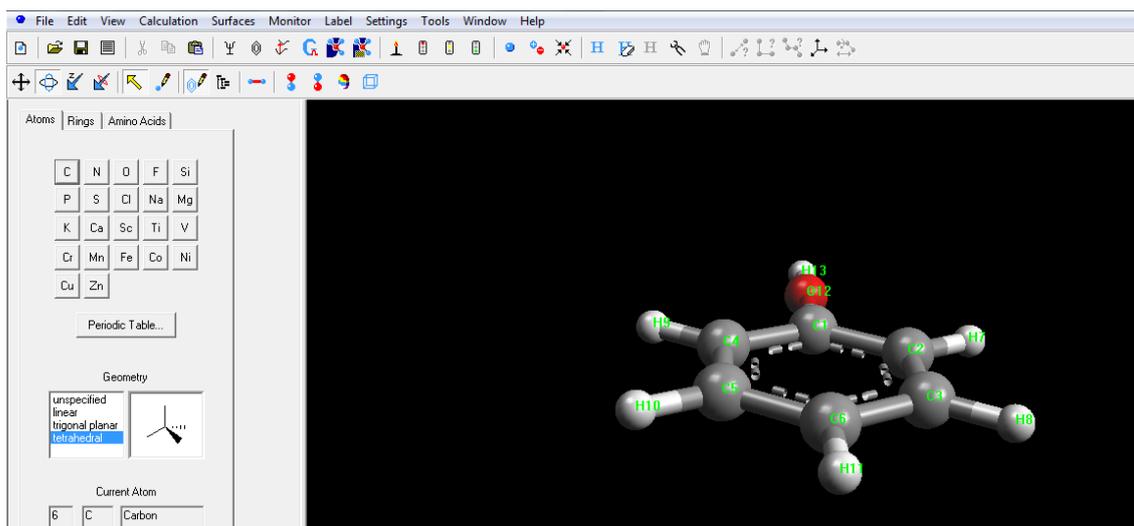
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



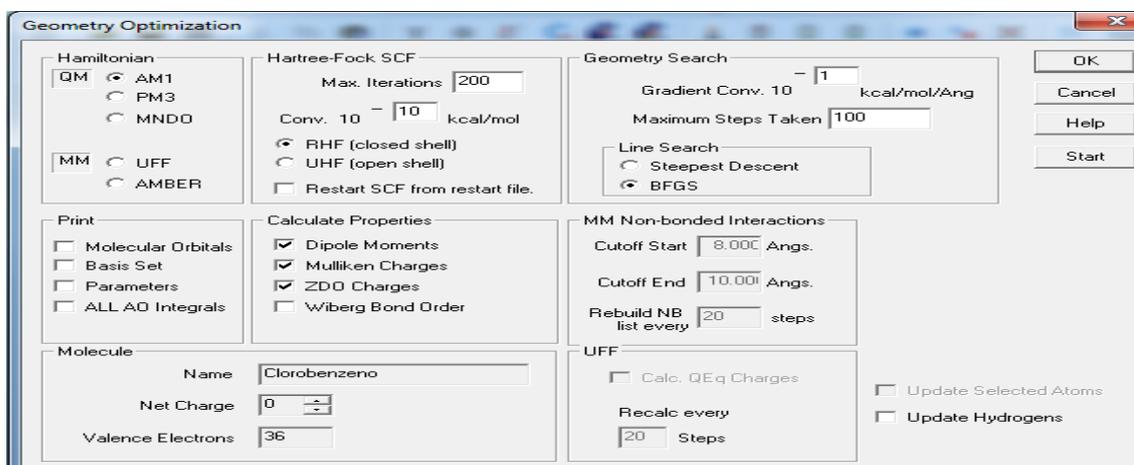
- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:



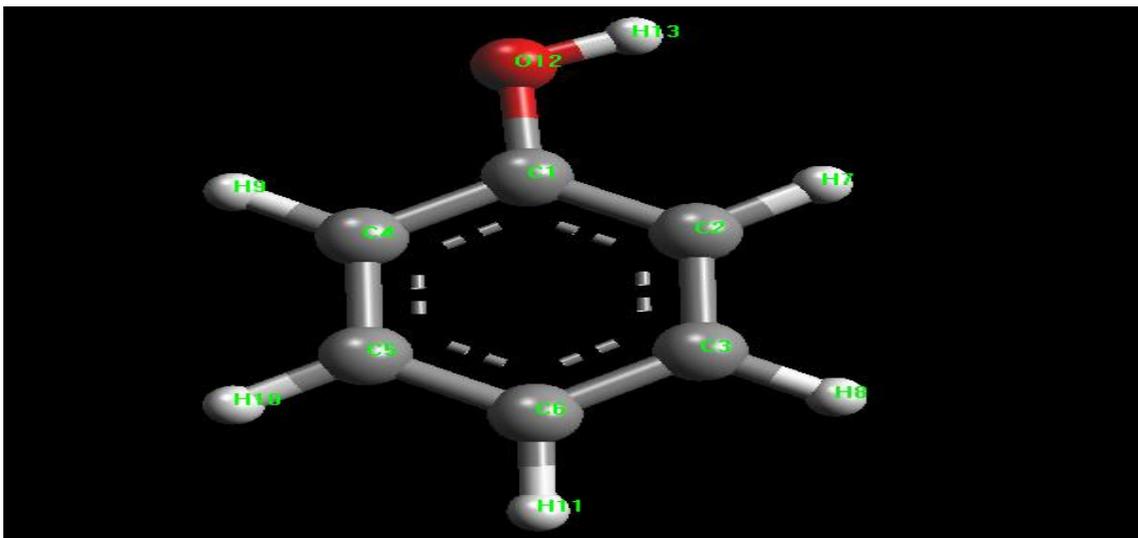
- 4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



- 5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



- 6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



- 7) Selecione a opção  Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Fenol.out.txt.
- 8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção  na Barra de Ferramentas:
- 9) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

Exercício 3

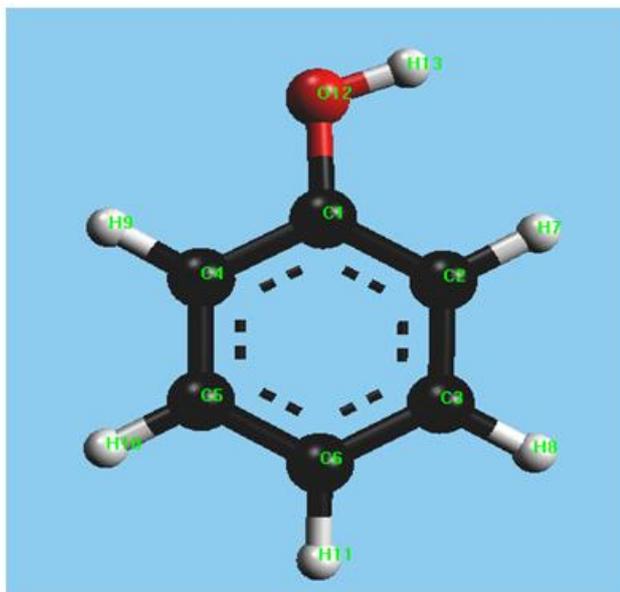
Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Fenol

- 1) Abra o arquivo texto Fenol.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Muliken, faça um Print Sreen da tela onde se encontram os valores das cargas:

Mulliken Atomic Charges

1	C	0.0728
2	C	-0.2720
3	C	-0.1503
4	C	-0.2108
5	C	-0.1586
6	C	-0.2260
7	H	0.1938
8	H	0.1940
9	H	0.2163
10	H	0.1961
11	H	0.1954
12	O	-0.3074
13	H	0.2568

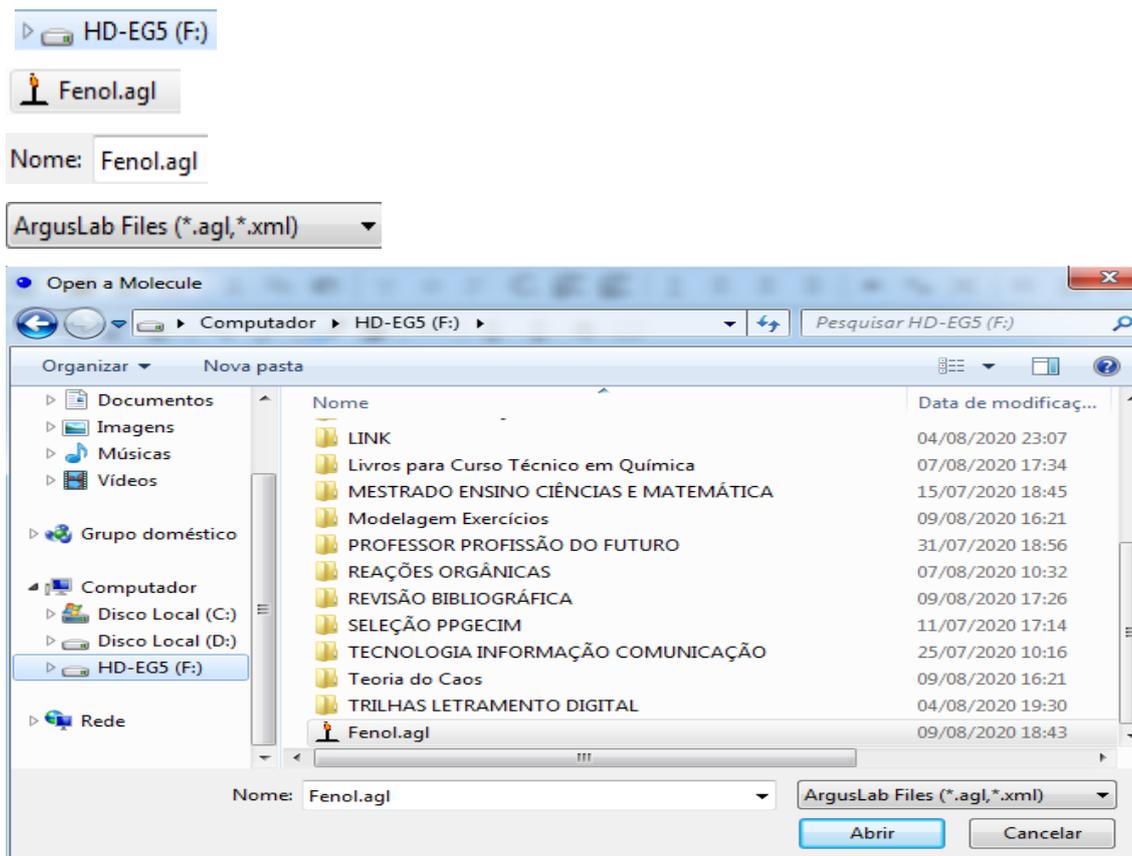
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



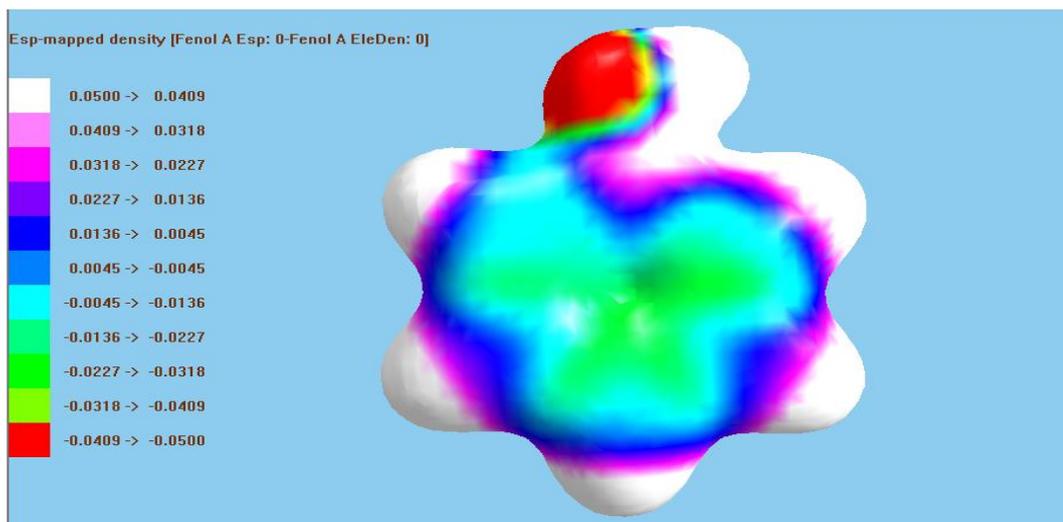
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Fenol no Arguslab

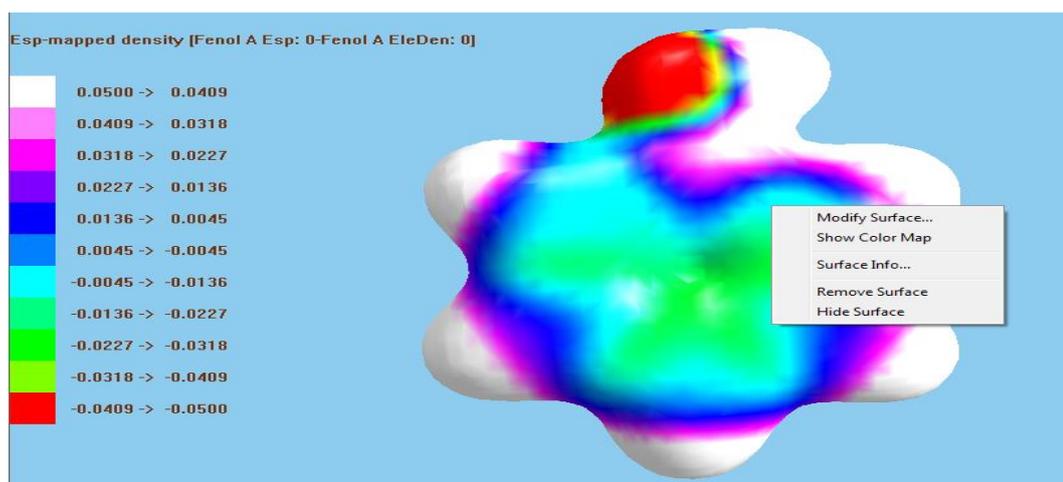
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



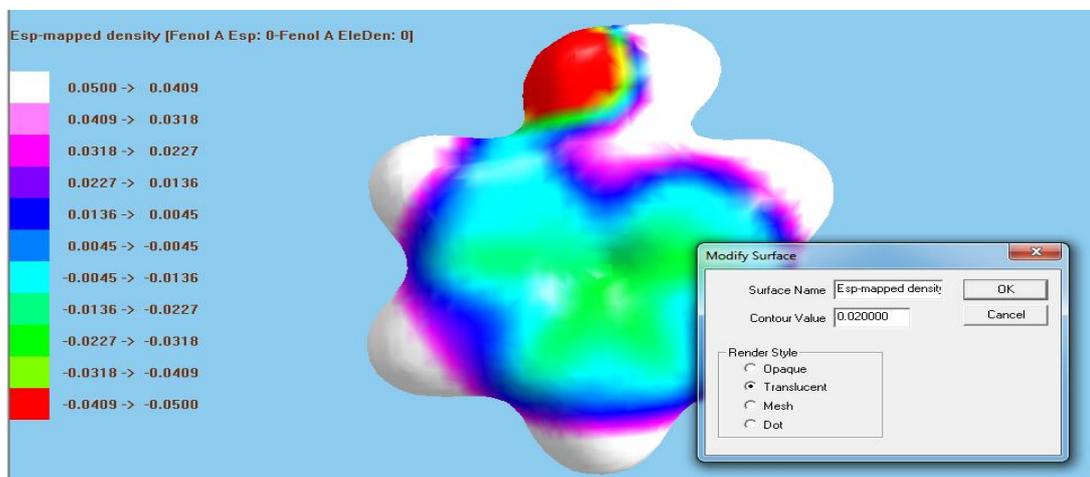
- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula do Fenol ficará com o seguinte aspecto:

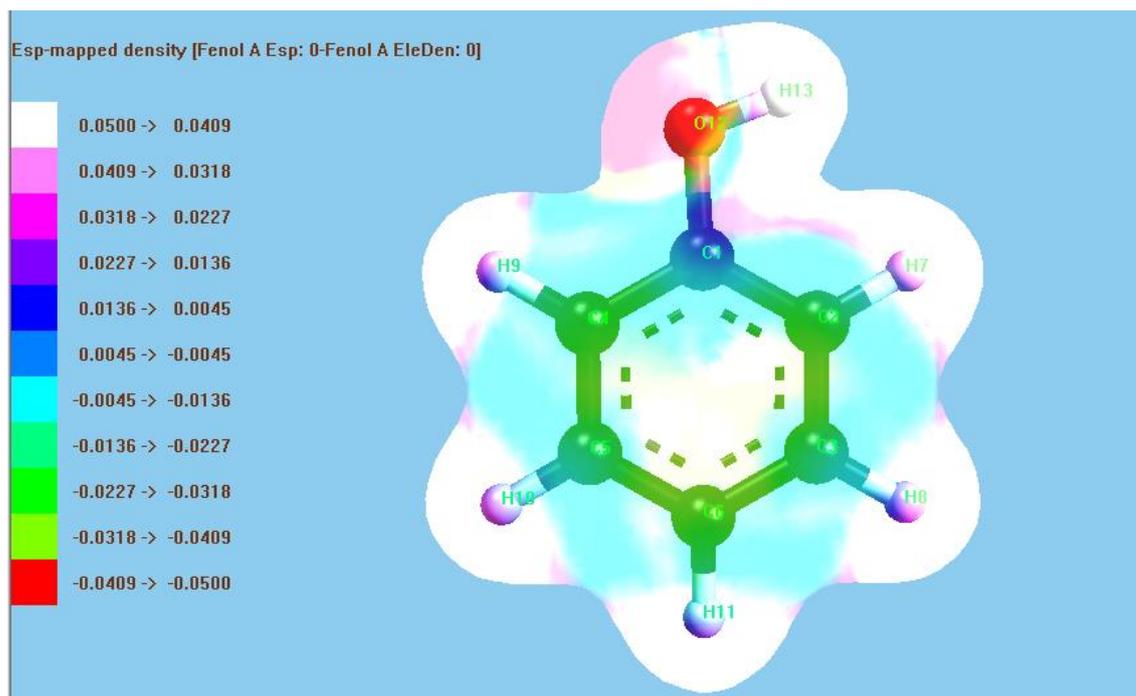


- 4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:



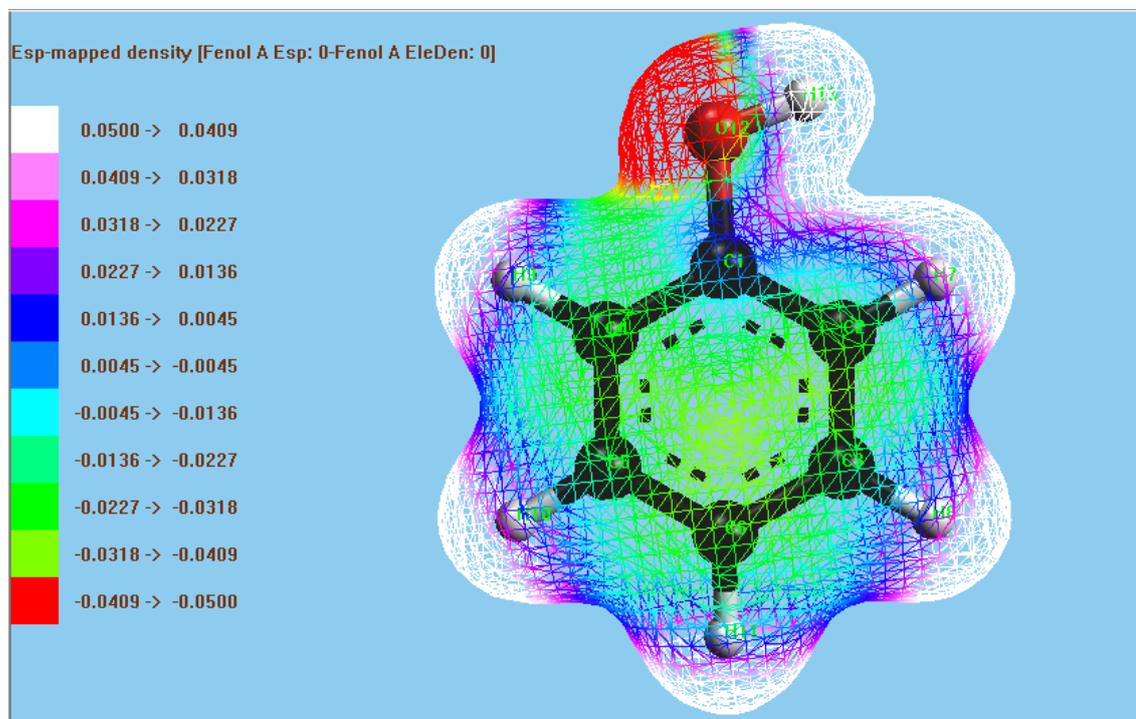
- 5) Altere o valor de contorno para 0.020000 e escolha a opção Translucent:





6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:

7) Selecione a opção Mesh:



8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE K - Construindo Molécula Nitrobenzeno no Arguslab 11



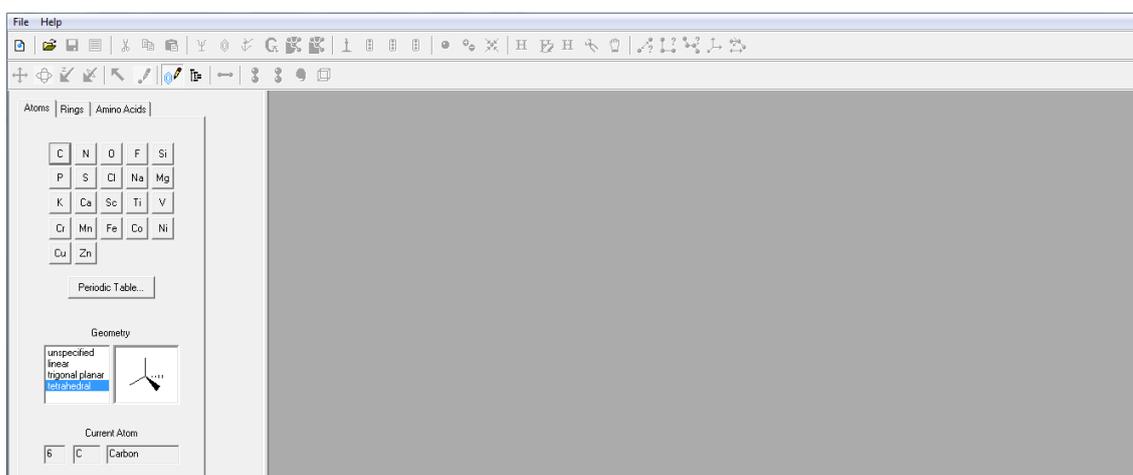
Exercício 1

Nome:

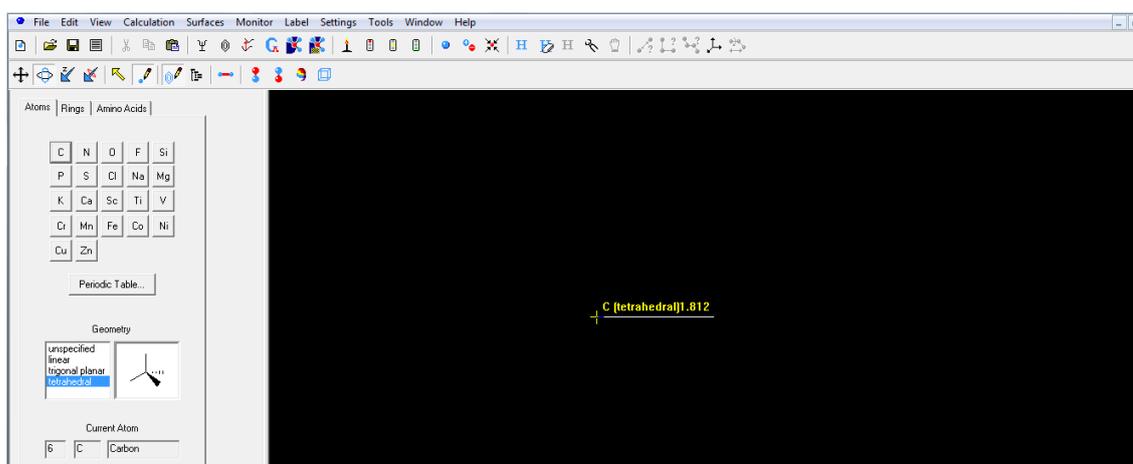
Data:

Construindo a molécula do Nitrobenzeno no Arguslab

1) Clicar na opção File na Barra de Ferramentas:

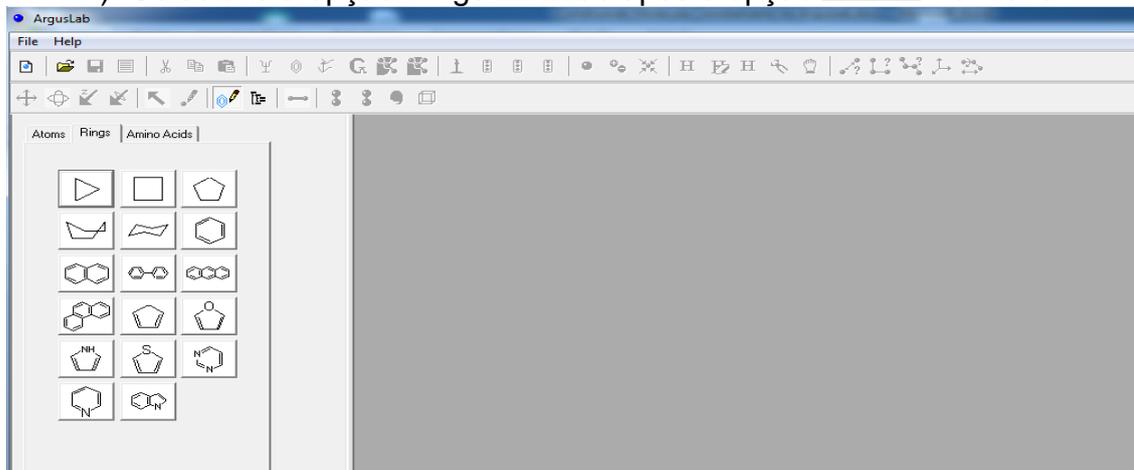


2) Clicar na opção New na Barra de Ferramentas:

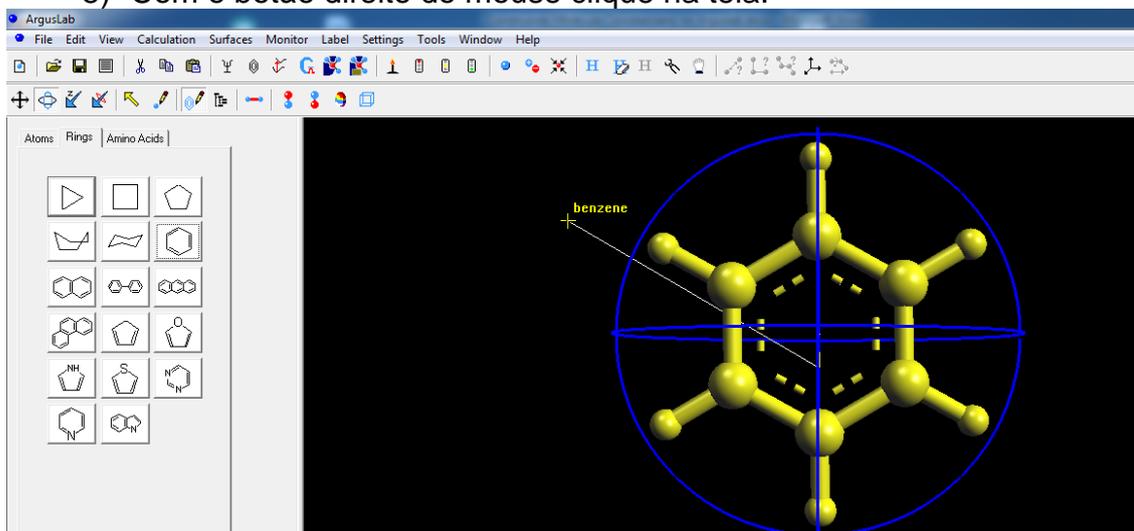


3) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas. O mouse permanecerá no modo seleção até você alterá-lo

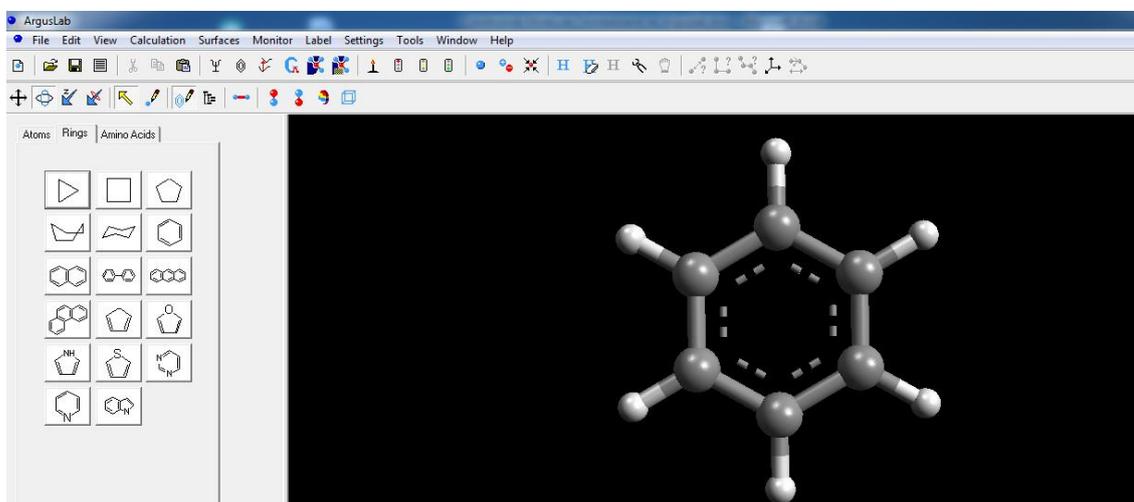
4) Selecione a opção Rings  e após a opção  Benzeno:



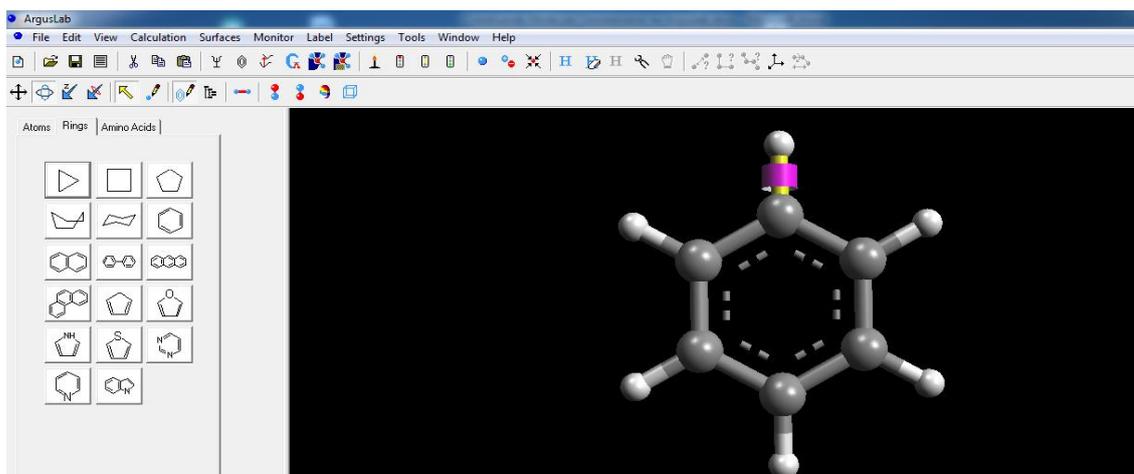
5) Com o botão direito do mouse clique na tela:



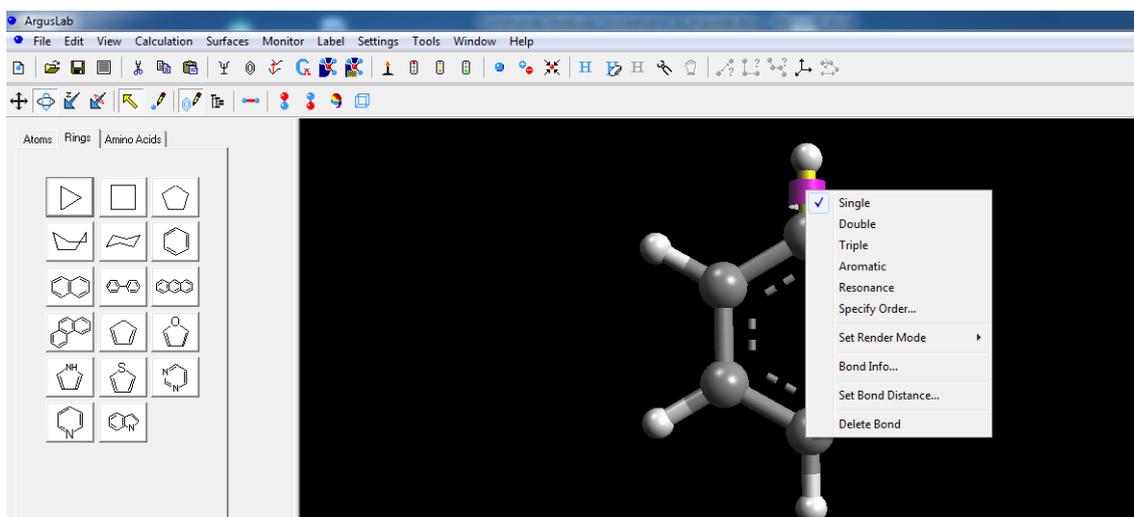
6) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas e com o botão esquerdo do mouse clique na tela fora da molécula:



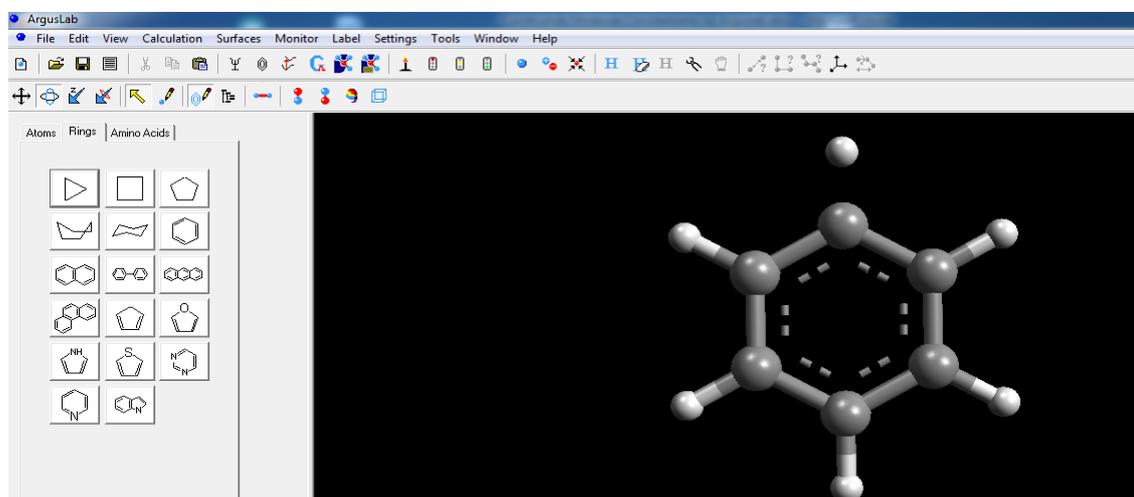
7) Com o botão esquerdo do mouse clique na ligação Carbono - Hidrogênio:



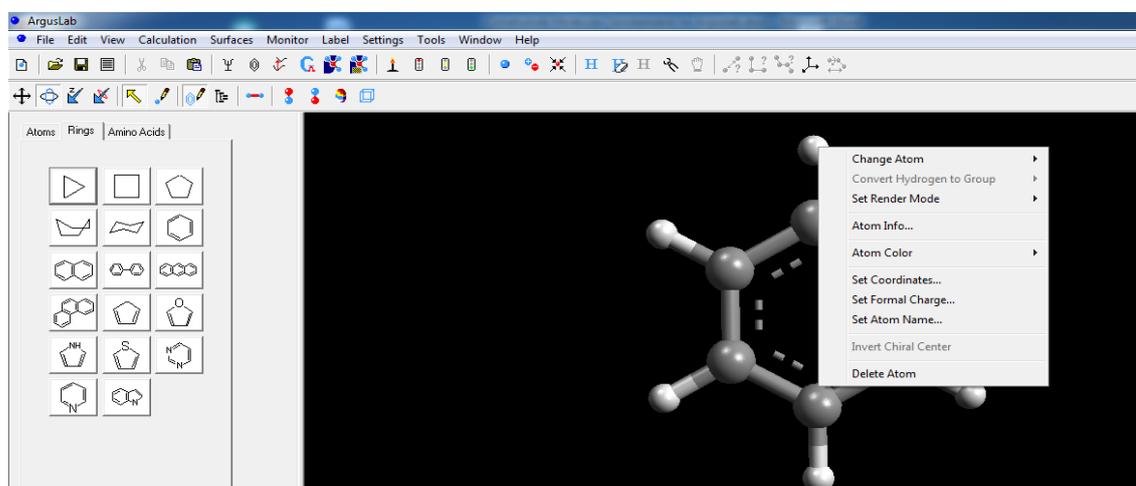
8) Clique com o botão direito do mouse sobre a ligação selecionada:



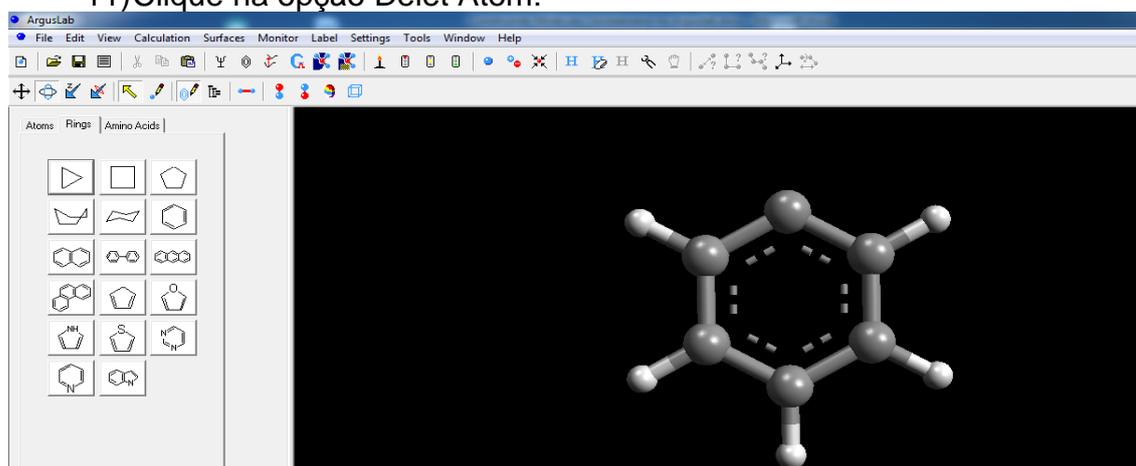
9) Clique na opção Delet Bond:



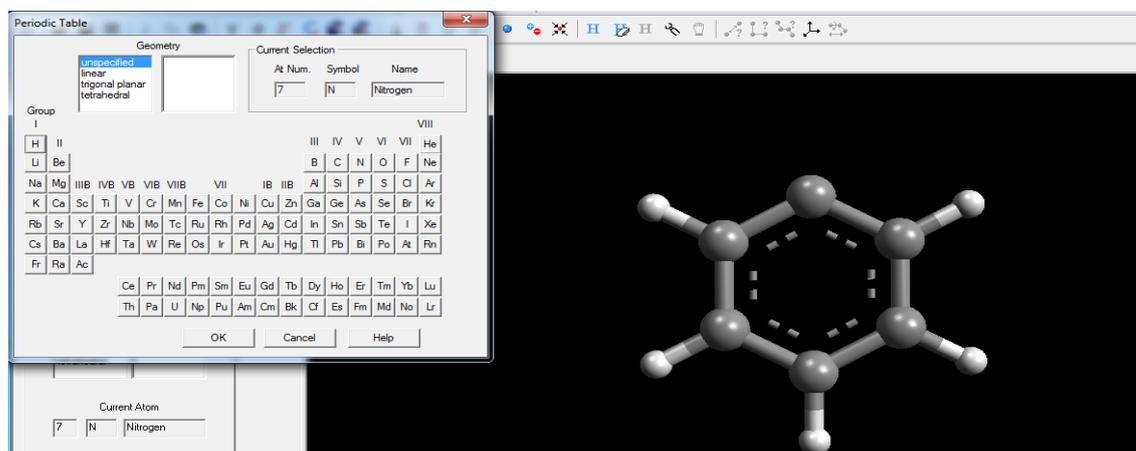
10) Clique com o botão direito do mouse sobre o átomo de Hidrogênio selecionado:



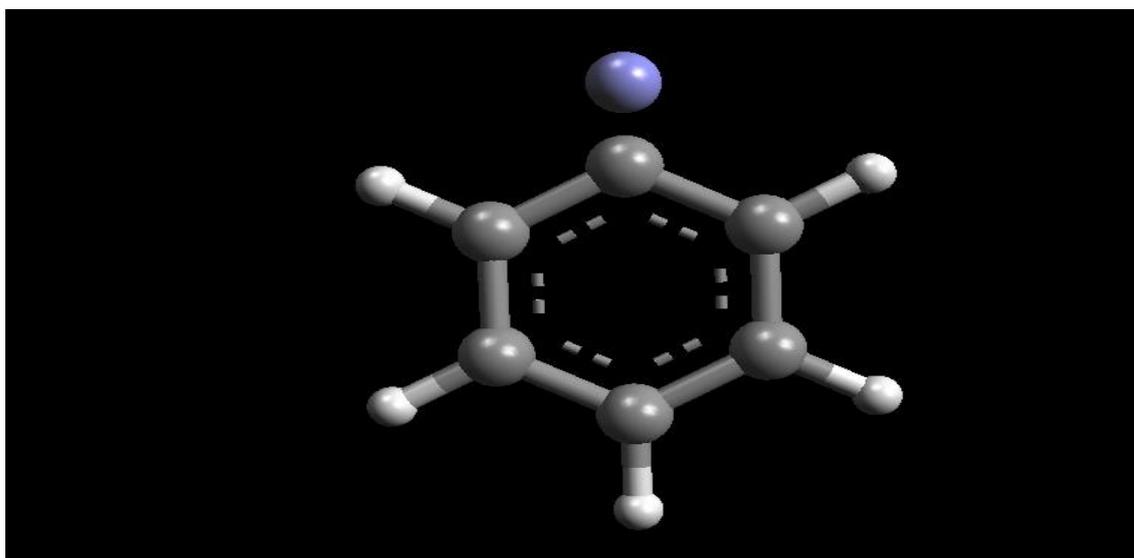
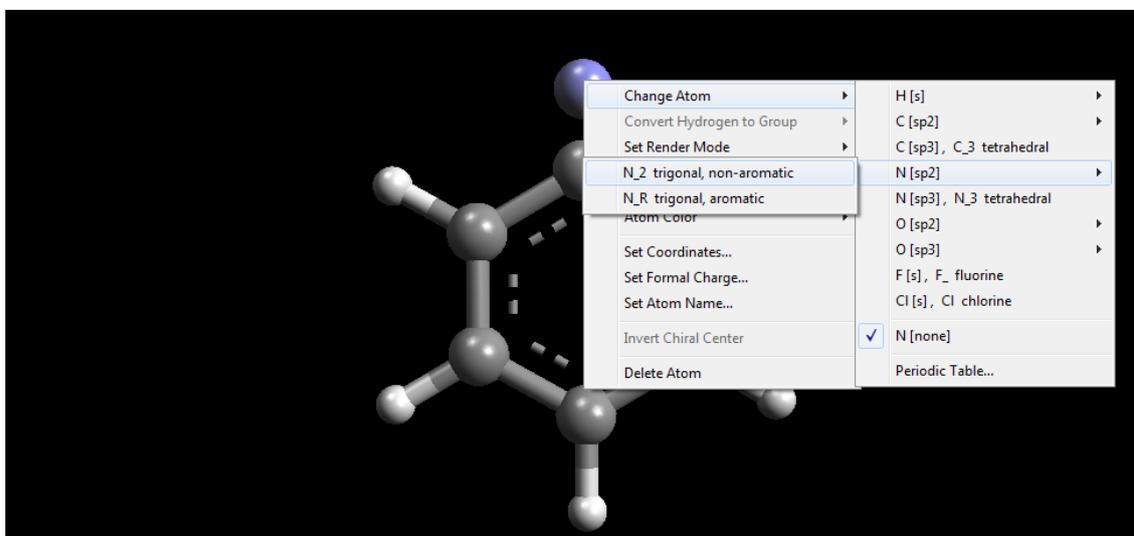
11) Clique na opção Delet Atom:



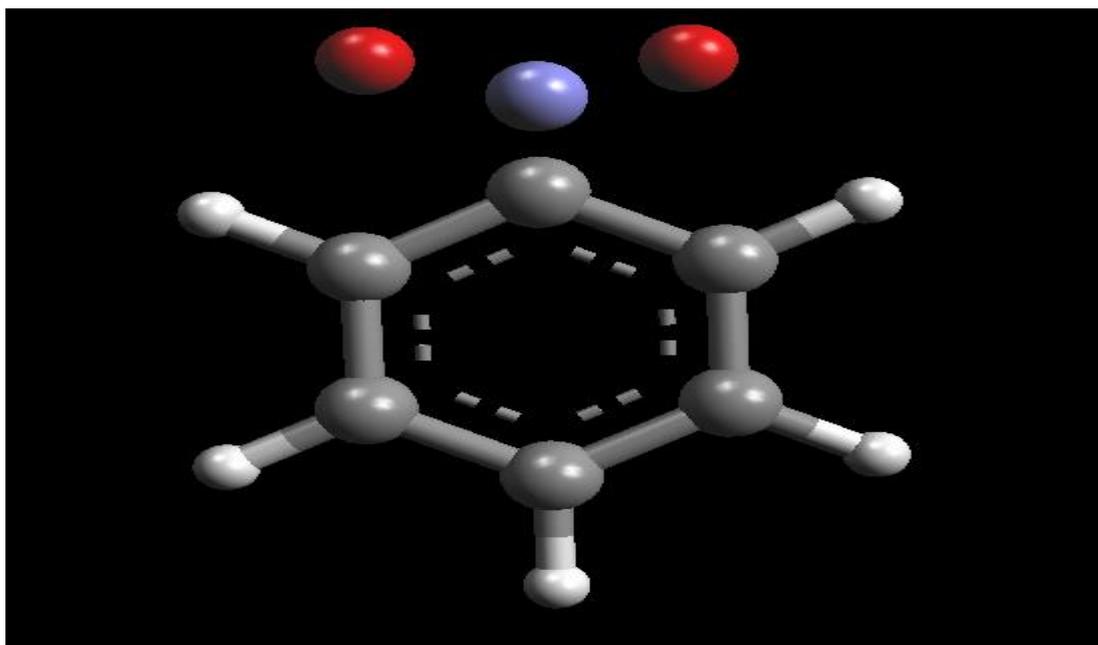
12) Selecione novamente  na Barra de Ferramentas, selecione a Tabela periódica, e após clique no átomo de Nitrogênio com a opção unspecified e clique em OK:



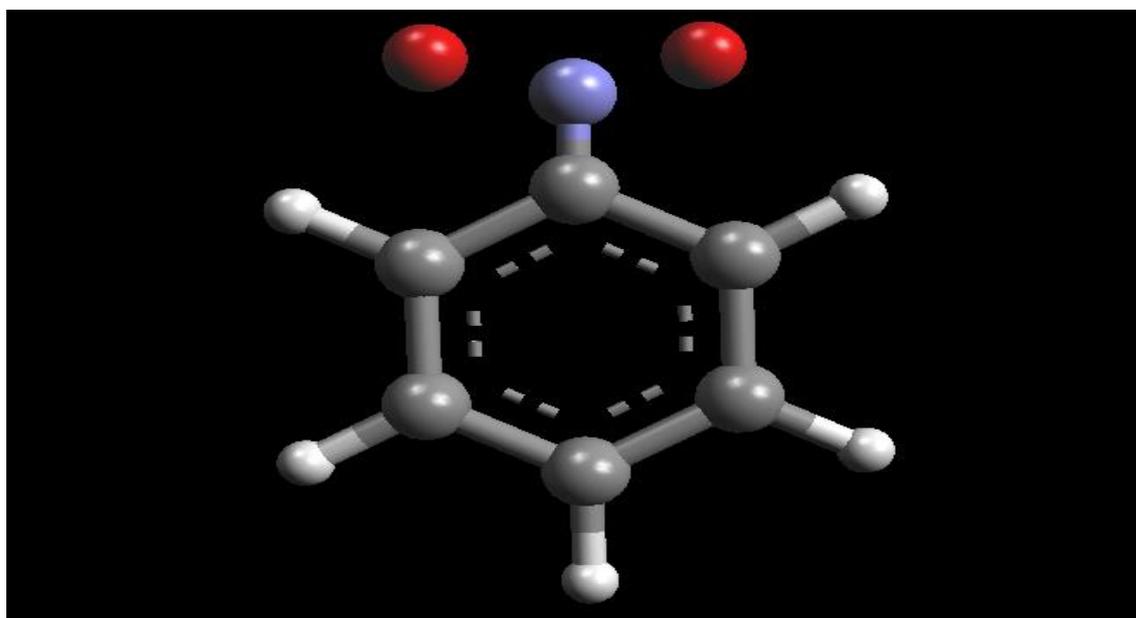
- 13) Com o botão direito do mouse clique no local do átomo de Hidrogênio que foi deletado. Ainda com o botão direito do mouse clique no átomo de Nitrogênio, escolha a opção Chang Atom, clique em N (sp^2) e após clique em N₂ trigonal non-aromatic:



- 14) Clicar no botão  na Barra de Ferramentas. Escolha a opção Tabela Periódica, clique no Átomo de Oxigênio, selecione a opção unspiecified e clique em OK. Na tela dê dois cliques para inserir dois Oxigênios e formar o grupo nitro (NO_2):

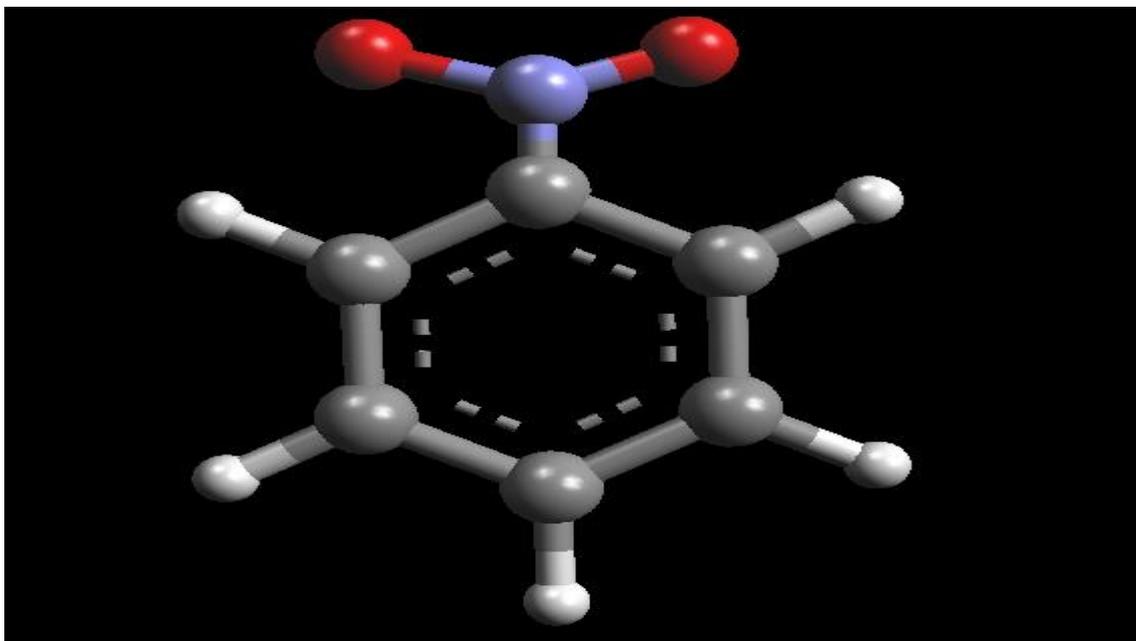


15) Para inserir a ligação entre o átomo de Nitrogênio e o Carbono: selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo de Nitrogênio e Carbono, a ligação é inserida:



16) Para inserir a ligação entre o átomo de Nitrogênio e os de Oxigênio:

selecione a opção  e clique na opção  vinculação automática ativa/desativa na Barra de Ferramentas. Após clique sobre o átomo de Nitrogênio e Oxigênio, a ligação é inserida:

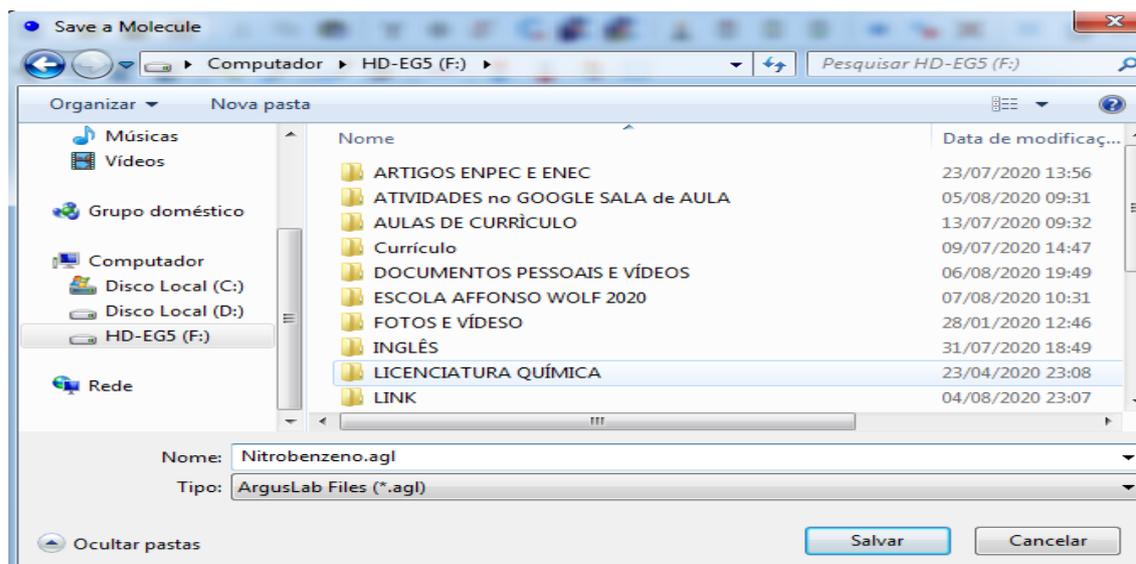


17) Feche o arquivo clicando na caixa de diálogo File e selecione a opção Save As

18) Dê o nome para o arquivo de Nitrobenzeno.agl

19) Escolha a pasta

20) Salve na opção ArgusLab Files (*.agl):



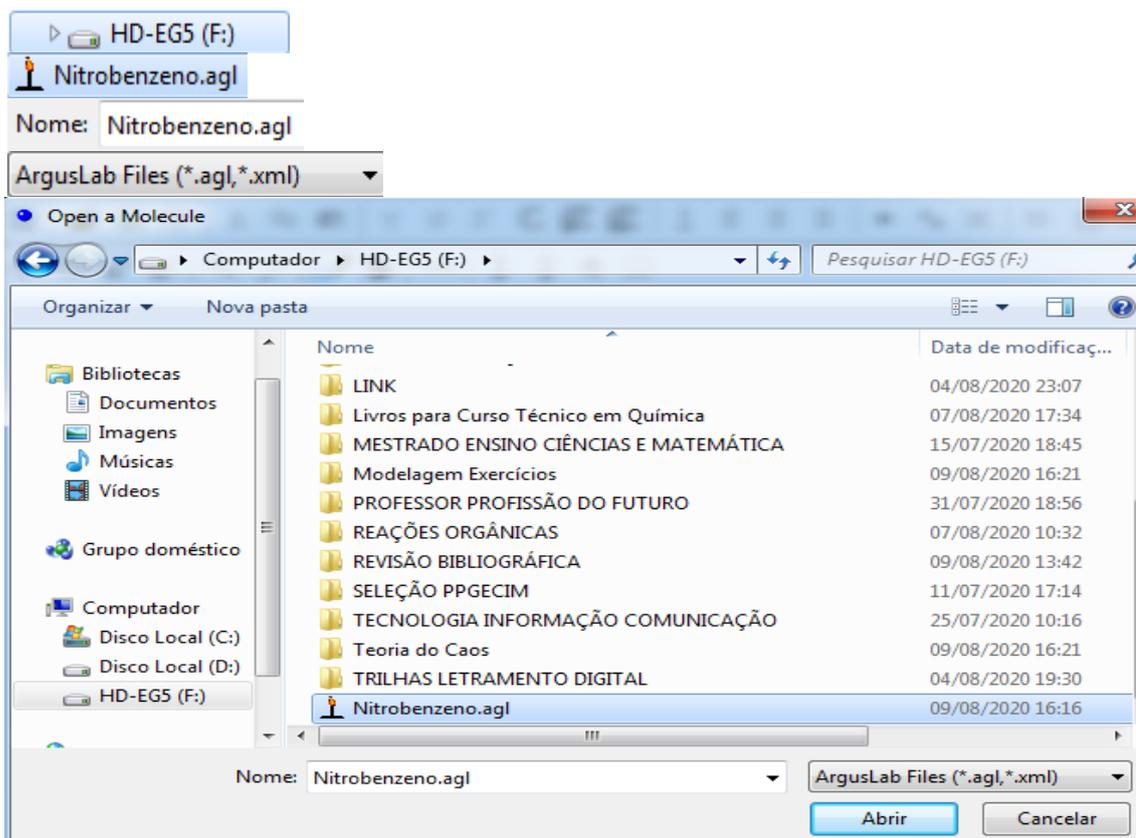
Nome: Nitrobenzeno.agl

Tipo: ArgusLab Files (*.agl)

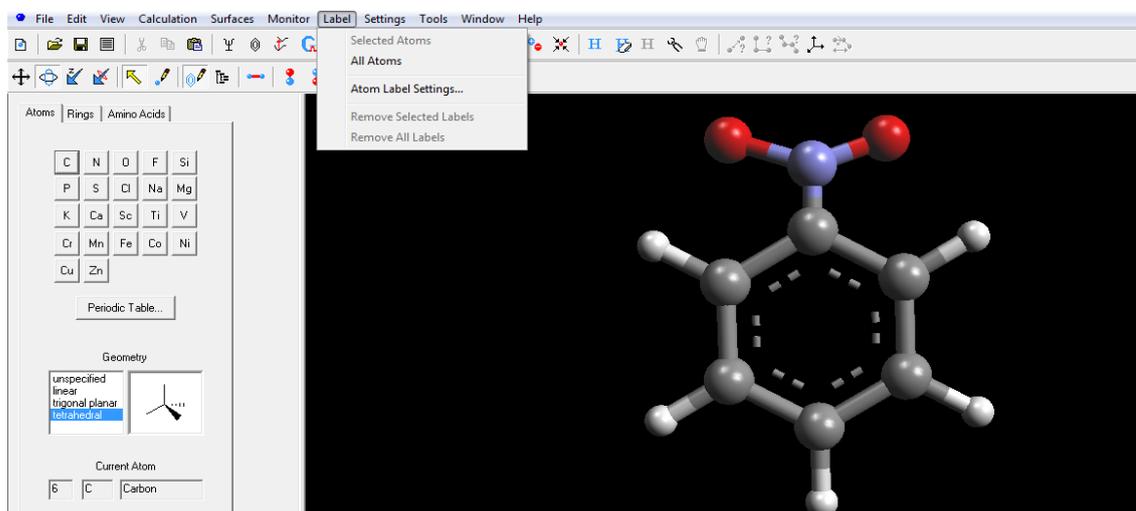
Exercício 2

Otimizar a Geometria da molécula do Nitrobenzeno no Arguslab

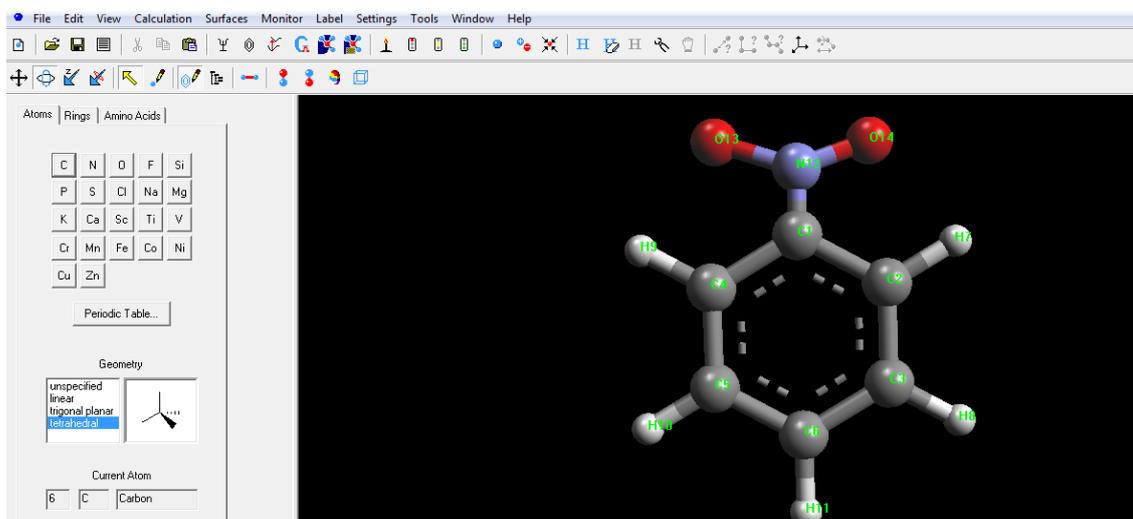
- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:



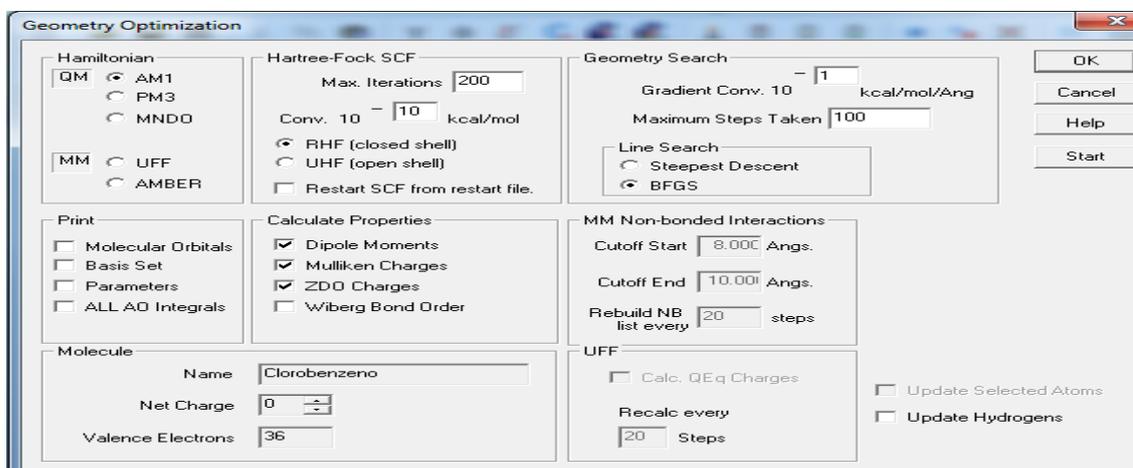
- 3) Com o arquivo aberto, selecione a opção Label e após a opção All Atoms na Barra de Ferramentas:



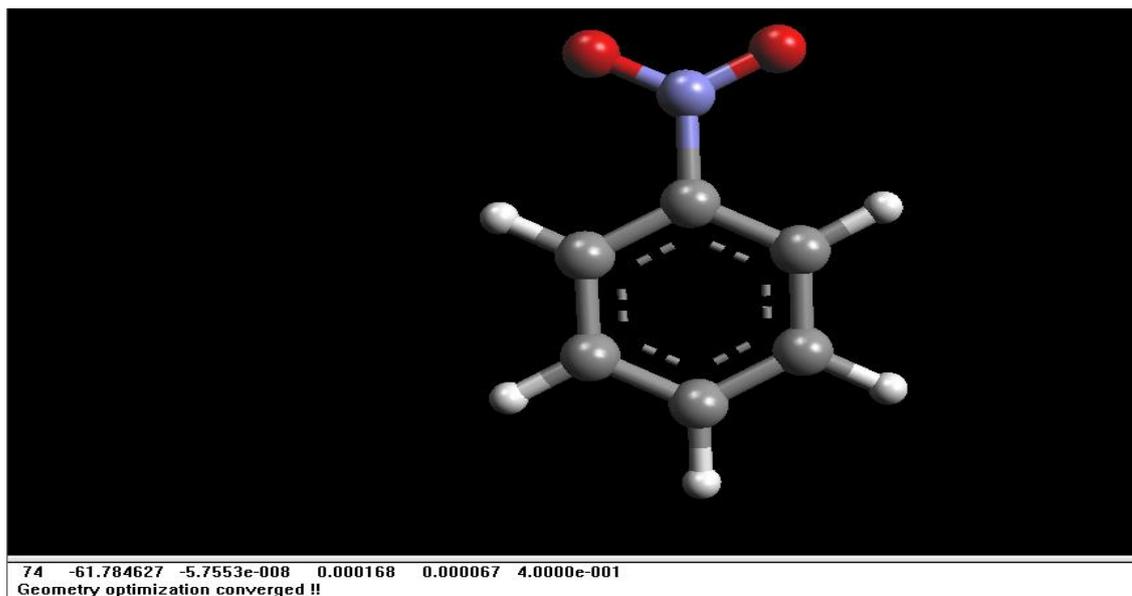
4) Clique na opção All Atoms para numerar os átomos da molécula:



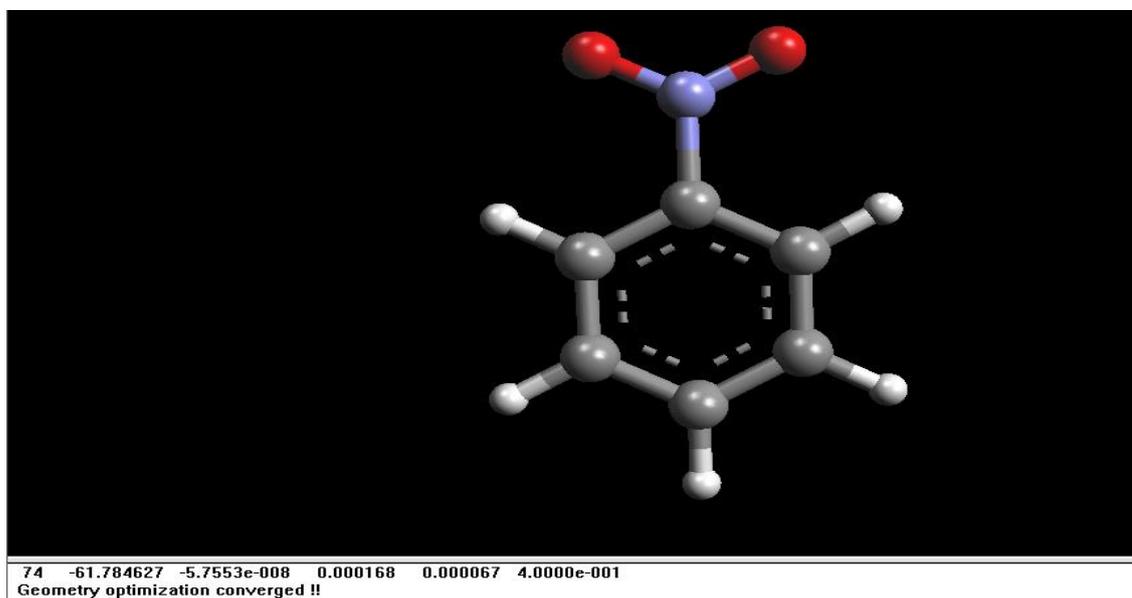
5) Clique no botão Otimizar Geometria na Barra de Ferramentas . Exibirá a caixa de diálogo Otimizar Geometria. Na caixa do grupo Hamiltoniano no canto superior esquerdo da caixa de diálogo clique no botão de opção AM1. Escolha as opções Dipole Moment, Mulliken Charges e ZDO Charges:



6) Após clique em OK. Um cálculo de AM1 será executado e você deverá ver a geometria da molécula mudar à medida que o progresso do cálculo for exibido na metade inferior da janela da molécula:



- 7) Selecione a opção  Resultado de Cálculos na Barra de Ferramentas e abra o arquivo. Salve o arquivo como Nitrobenzeno.out.txt.
- 8) Para Centralizar a molécula na tela clique na opção  na Barra de Ferramentas:



- 9) Clique no botão Save  na Barra de Ferramentas para salvar a estrutura final.

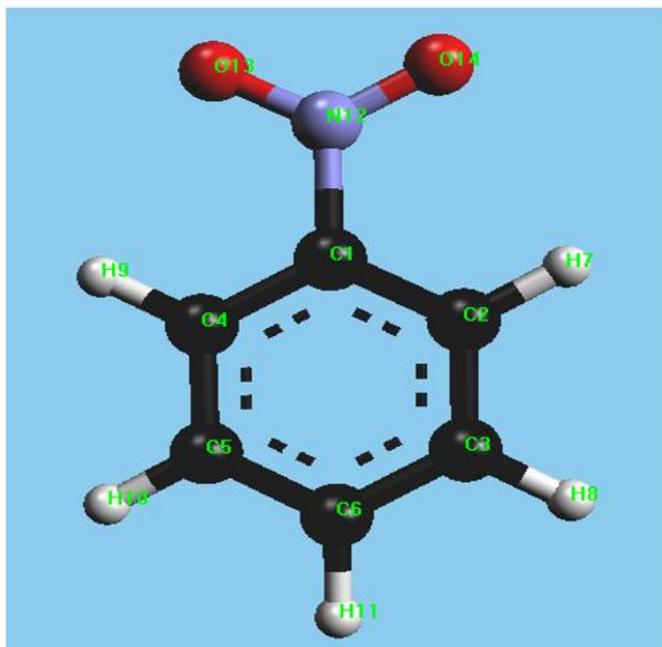
Exercício 3

Coloque as cargas parciais sobre os átomos de carbono na molécula do Nitrobenzeno

- 1) Abra o arquivo texto Nitrobenzeno.out.txt
- 2) Importe os dados das Cargas de Muliken, faça um Print Screenshot da tela onde se encontram os valores das cargas:

```
Mulliken Atomic Charges
*****
      1   C   -0.1256
      2   C   -0.1255
      3   C   -0.2033
      4   C   -0.1255
      5   C   -0.2033
      6   C   -0.1532
      7   H    0.2434
      8   H    0.2147
      9   H    0.2434
     10   H    0.2147
     11   H    0.2095
     12   N    0.5122
     13   O   -0.3508
     14   O   -0.3508
```

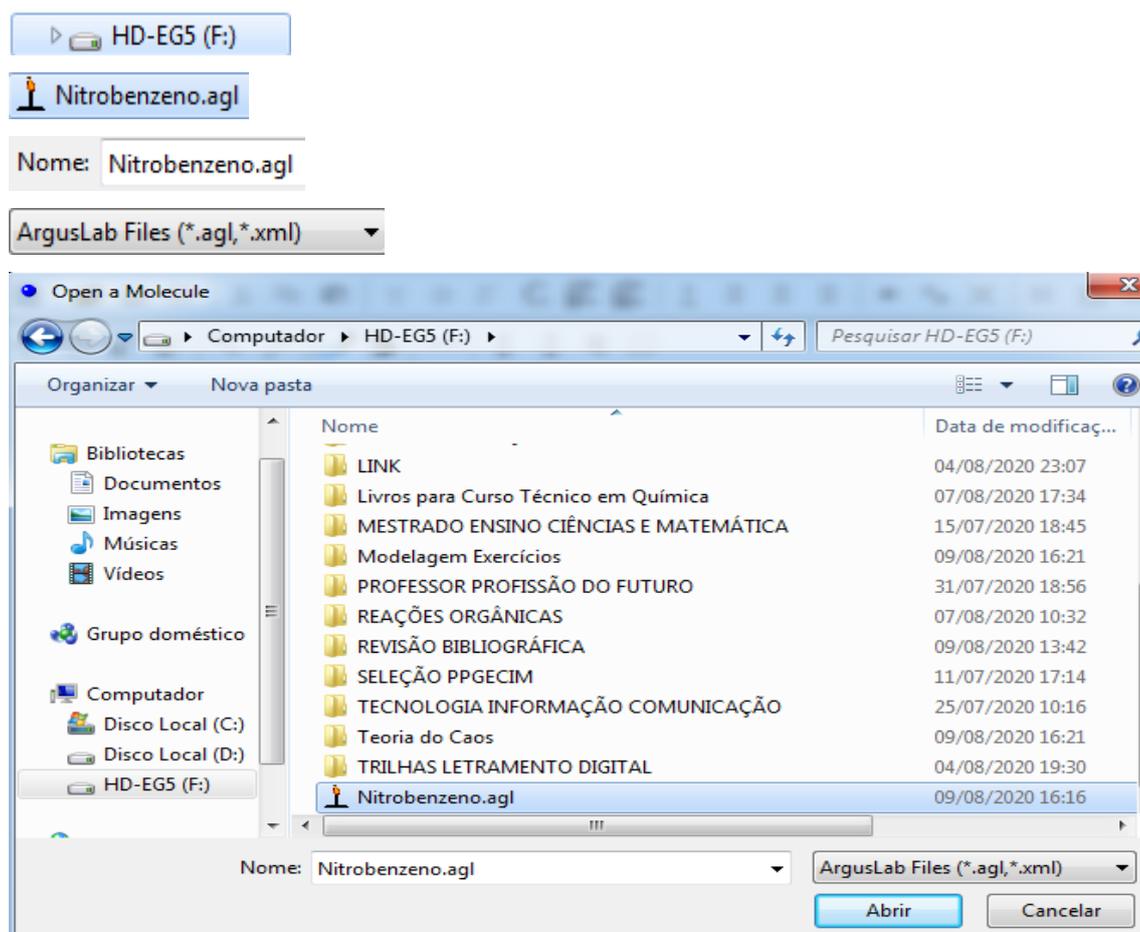
- 3) Preencha as lacunas dos respectivos carbonos com o valor da carga:



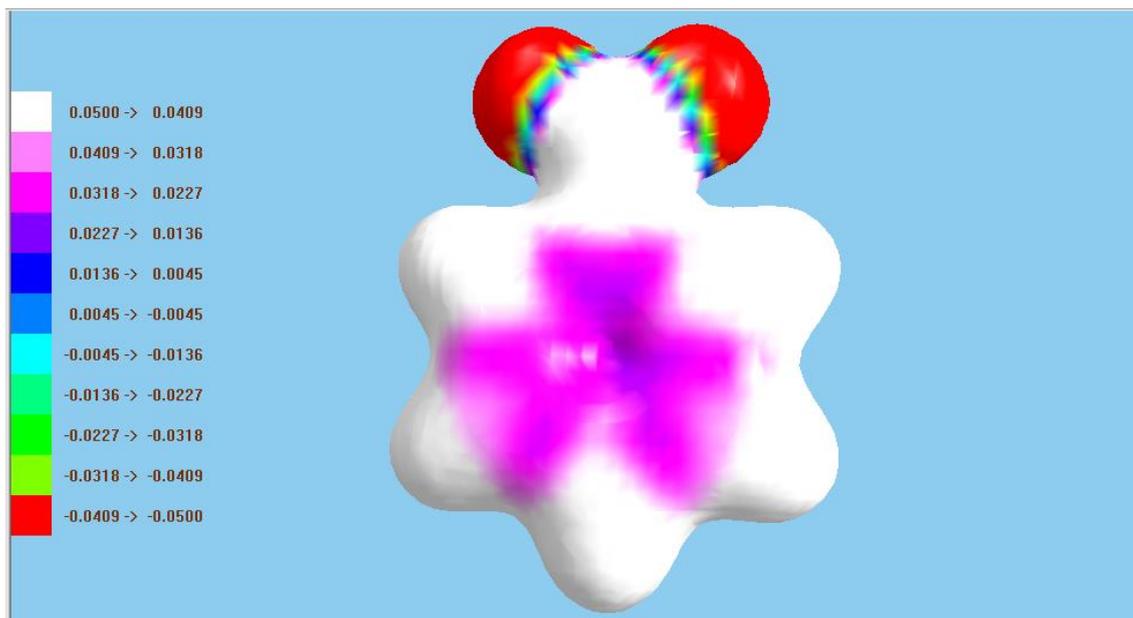
Exercício 4

Construindo o mapa de densidade eletrônica do Nitrobenzeno no Arguslab

- 1) Na caixa de diálogo File selecione a opção Open
- 2) Selecione a pasta onde o arquivo foi salvo, o tipo de arquivo, o nome do arquivo e clique em abrir:

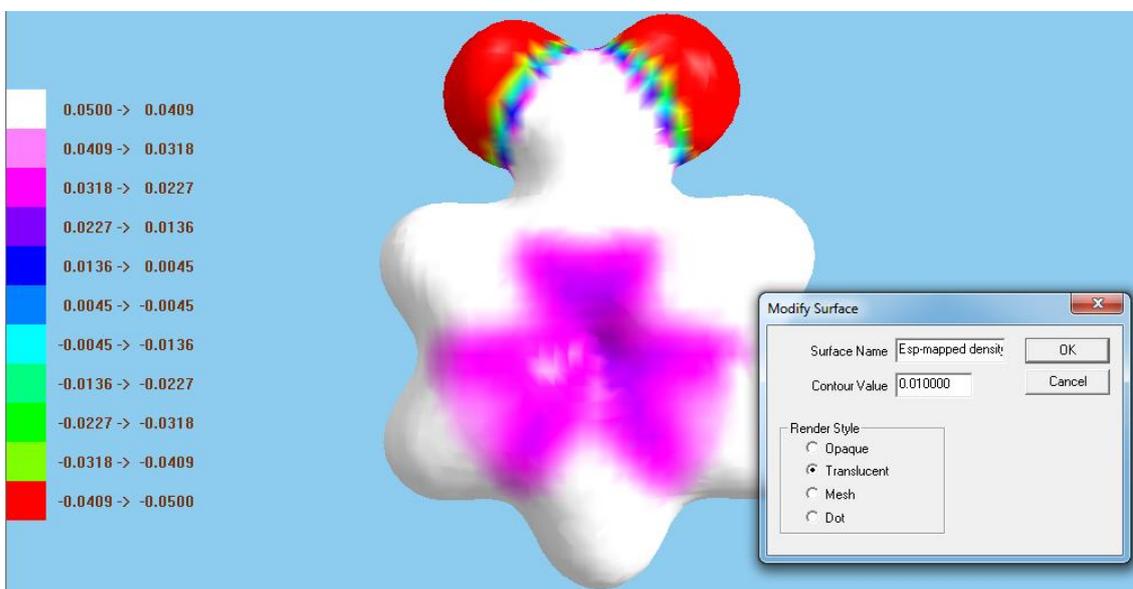


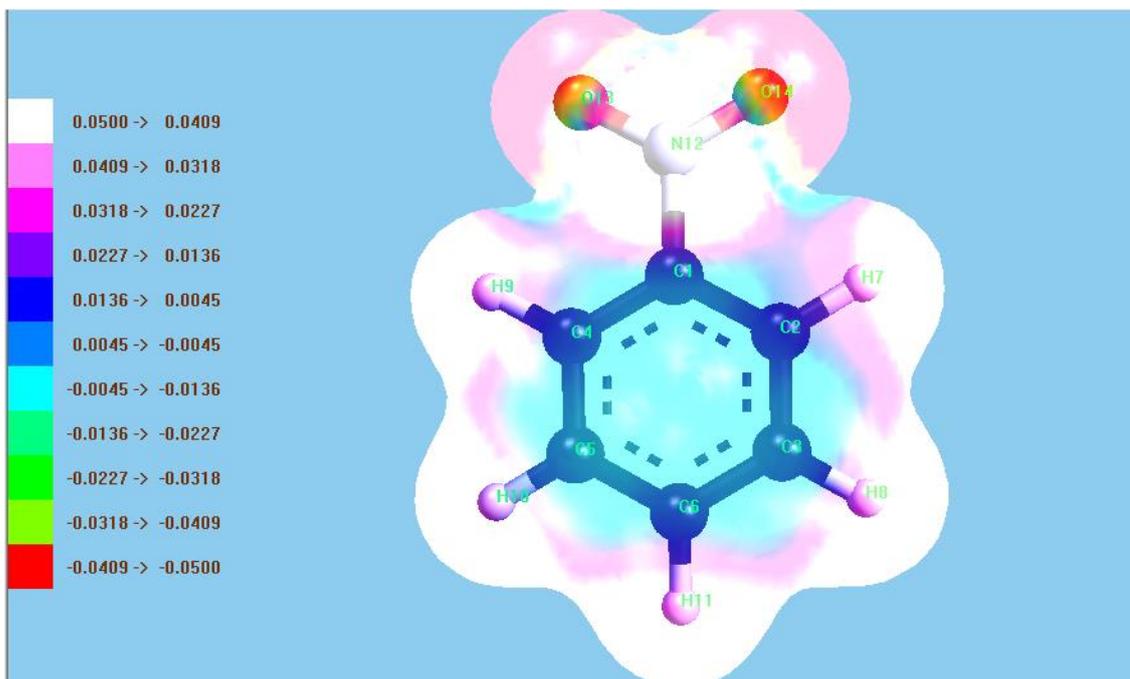
- 3) Selecione a opção  Quick Plot EPP – mapped density surface na Barra de Ferramentas. Aguarde alguns segundos até a conclusão do cálculo de potencial. A molécula de Nitrobenzeno ficará com o seguinte aspecto:



4) Com o botão direito do mouse clique sobre a molécula e após escolha a opção Modify Surface:

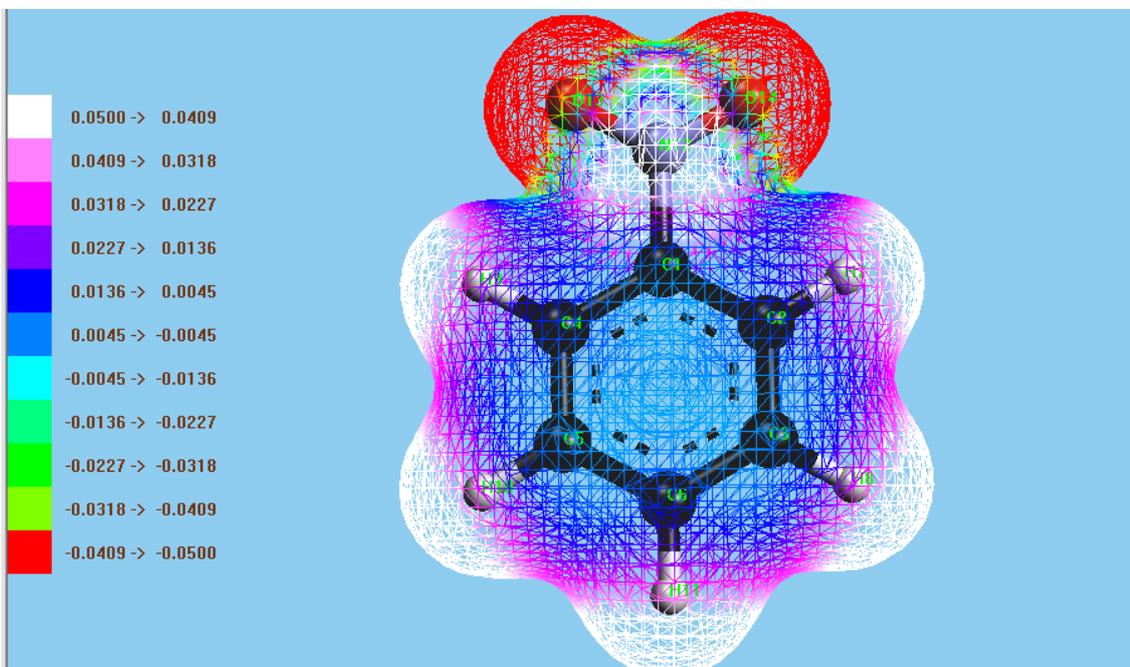
5) Altere o valor de contorno para 0.010000 e escolha a opção Translucent:





6) Clique novamente com o botão direito do mouse na molécula e após escolha a opção Modify Surface:

7) Selecione a opção Mesh:



8) Selecione a opção File na Barra de Ferramentas e clique em Save. Após feche o arquivo.

APÊNDICE L – Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO

1. IDENTIFICAÇÃO DO PROJETO DE PESQUISA

Título do Projeto: Uso de Modelagem na Educação Química: Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica	
Área do Conhecimento: Ciências e Matemática	Número de participantes: 15
Curso: Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática	Unidade: Programa de Pós-Graduação de Ensino de Ciências e Matemática (PPGECIM)
Projeto Multicêntrico	<input type="checkbox"/> Sim <input checked="" type="checkbox"/> Não
Nacional	<input type="checkbox"/> Nacional <input type="checkbox"/> Internacional
Cooperação Estrangeira	<input type="checkbox"/> Sim <input checked="" type="checkbox"/> Não
Patrocinador da pesquisa: Pesquisador	
Instituição onde será realizado: Escola Estadual Técnica Affonso Wolf	
Nome dos pesquisadores e colaboradores: Cleitor Jacob Konrad (pesquisador)	

Seu filho (**e/ou menor sob sua guarda**) está sendo convidado(a) para participar do projeto de pesquisa acima identificado. O documento abaixo contém todas as informações necessárias sobre a pesquisa que estamos fazendo. Sua autorização para que ele participe neste estudo será de muita importância para nós, mas, se retirar sua autorização, a qualquer momento, isso não lhes causará nenhum prejuízo.

2. IDENTIFICAÇÃO DO PARTICIPANTE DA PESQUISA E/OU DO RESPONSÁVEL

Nome do Menor:		Data de Nasc.:	Sexo:
Nacionalidade:	Estado Civil:	Profissão:	
RG:	CPF/MF:	Telefone:	E-mail:
Endereço:			

3. IDENTIFICAÇÃO DO PESQUISADOR RESPONSÁVEL

Nome: Cleitor Jacob Konrad		Telefone: (51) 99967 9654
Profissão: Professor	Registro no Conselho Nº:	E-mail: cleitorkonrad24@gmail.com
Endereço: Avenida Farroupilha, 8001 – prédio 14, bairro: São José – Canoas-RS.		

Eu, responsável pelo menor acima identificado, após receber informações e esclarecimento sobre este projeto de pesquisa, autorizo, de livre e espontânea vontade, sua participação como voluntário(a) e estou ciente:

1. Da justificativa e dos objetivos para realização desta pesquisa.

(explicar os motivos que justificam a pesquisa, a relevância social e científica do estudo, bem como os objetivos para realização do estudo.)

A área de educação de Química provavelmente pode se beneficiar deste tipo de pesquisa, pois é sabido que são raros os relatos de pesquisa envolvendo as contribuições da modelagem molecular para o ensino médio, segundo recente revisão de literatura realizada. Acreditamos que a pesquisa pode trazer benefícios para a área da cognição, porque a habilidade visuoespacial pode ser um facilitador do processo de criação de novas representações e modelos mentais de acordo com a TMC. Em relação a área do currículo, será a introdução da modelagem molecular no currículo do ensino médio. Nesse contexto, de acordo Ramos (2015, apud KABERMAN; DORI, 2007) defendem o uso da modelagem molecular para o desenvolvimento da habilidade de pensamento de alta ordem, que envolve capacidades tais como: análise, de síntese, 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. Em relação aos objetivos é investigar o aprendizado de conceitos químicos após uso de *software* de modelagem molecular para modelagem da reação de Substituição Aromática Eletrofílica sobre o Clorobenzeno, Nitrobenzeno e Fenol. Nesse contexto, os objetivos serão interpretar a produção de gestos descritivos combinados ao discurso verbal dos estudantes afim de obter as imagens mentais oriundas de diferentes mediações durante a resolução de problemas propostos; levantar as representações mentais proposicionais e analógicas dos estudantes bem como os seus drivers utilizados durante a atividade; investigar de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem; entender quais mediações vão proporcionar uma produção maior de imagens mentais, ou seja, identificar as mediações predominantes.

2. Do objetivo da participação de meu filho.

(descrever o **objetivo** da participação do participante da pesquisa.)

Participar de um projeto de modelagem molecular onde o aluno irá investigar o aprendizado de conceitos químicos após uso de *software* de modelagem molecular para modelagem da reação de Substituição Aromática Eletrofílica sobre o Clorobenzeno, Nitrobenzeno e Fenol. Acreditamos que o durante o projeto o aluno poderá ter benefícios na área da cognição, porque a habilidade visuoespacial pode ser um facilitador do processo de criação de novas representações e modelos mentais.

3. Do procedimento para coleta de dados.

(descrever, passo a passo, o **procedimento** para a coleta de dados, inclusive o(s) local(is) e/ou instituição(ões) onde será realizada a pesquisa. Se for o caso, substitua a expressão coleta de dados por **coleta de amostras**, constante no projeto de pesquisa.)

Os encontros serão semanais no horário da disciplina de Química Orgânica. Todas as aulas serão montadas seguindo as primeiras etapas da Unidade Didática.

Estão previstos sete encontros semanais on line (todos os alunos tem acesso através da plataforma google Sala de Aula), onde cada encontro o pesquisador ministrará teoria intercalada com a realização de exercícios de modelagem molecular (encontrada no anexo do projeto) por parte dos estudantes.

As etapas finais, que são: Aula expositiva final, Avaliação da aprendizagem da Unidade Didática e Avaliação da própria Unidade Didática, serão realizadas posteriormente à aplicação das Unidades Didáticas. Devido a pandemia provocada pelo Coronavírus (COVID-19) à realização das aulas serão remotas.

A seguir a essa primeira parte da aplicação da Unidade Didática, realizaremos um pós-teste com os discentes. O pós-teste será baseado em questões dos livros didáticos de Ciências do Ensino Médio, que foram analisados por nós. Os alunos terão a oportunidade de responder as questões através de desenhos e textos, como se estivessem explicando para um colega sobre os conceitos envolvidos sobre a reação em estudo.

Após a aplicação do pós-teste, os estudantes serão entrevistados conforme a adaptação da técnica "Think Aloud" (VAN-SOMEREN et al., 1994), o protocolo "Report Aloud" (RAMOS, 2015). A diferença entre os métodos é que no "Think Aloud" o entrevistador e o entrevistado mantêm um constante diálogo a respeito do que o entrevistado está pensando durante a execução de uma tarefa, ou seja, enquanto o estudante responde o questionário, e pensa em voz alta. Já, no "Report Aloud", o estudante reporta ao entrevistador o seu processo de pensamento enquanto estava respondendo as questões, isto é, o estudante resolve as questões e só depois, ao finalizá-las, reporta o seu processo de processamento.

As entrevistas serão gravadas e transcritas para análise. Para analisar os gestos descritivos será baseado na linha de trabalho que revela o conhecimento implícito inerente à visualização interna, mediante externalização por análise gestual (MONOGHAN; CLEMENT, 1999). A partir dessa metodologia, é presumível identificar padrões de gestos e relacioná-los com os conhecimentos implícitos existentes na estrutura cognitiva dos alunos (CLEMENT; STEPHENS, 2010). O que Clement e Stephen chamam de imagens mentais e simulações mentais interpretamos aqui, no contexto de nosso referencial teórico, como representações e drivers. Este procedimento fundamenta-se no fato em que um vínculo estabelecido entre gestos descritivos e imagens mentais.

4. Da utilização, armazenamento e descarte das amostras.

(explicar como serão utilizadas as amostras e/ou os dados coletados. Esclarecer se serão utilizados apenas nesta pesquisa e/ou serão (e/ou poderão) ser utilizados em outras pesquisas. Informar como será feito o armazenamento e/ou descarte do material coletado. Se for o caso, substitua a expressão **coleta de amostras** por **coleta de dados**.)

Em relação a utilização dos dados, no momento creio que serão utilizados somente para o projeto do mestrado. Talvez em algum momento futuro se o pesquisador decidir cursar o doutorado, talvez alguns dados possam ser utilizados, mas também dependerá da posição do orientador. A princípio os dados não serão descartados, ficarão armazenados no computador do pesquisador Cleitor Jacob Konrad.

5. Dos desconfortos e dos riscos.

(descrever os **desconfortos** e os **riscos**, prováveis e/ou esperados, **para os participantes da pesquisa**, não para o pesquisador.)

Em relação aos riscos pode ocorrer a quebra accidental de confidencialidade, uma vez que os dados ficarão armazenados em computador e poderá haver vazamento de dados. A participação no projeto não contempla riscos físicos aos participantes. Outro risco que pensamos ser possível é de que os estudantes fiquem desconfortáveis em alguns momentos da entrevista, mas estarão livres de não participarem a qualquer momento.

6. Dos benefícios.

(descrever o(s) **benefício(s)**, para o participante da pesquisa, para a sociedade e para a ciência, em linguagem leiga, simples e acessível, de fácil compreensão para os participantes da pesquisa.)

Para o participante da pesquisa creio que agregará maior conhecimento e entendimento em relação ao estudo das reações orgânicas com a utilização de um *software* de modelagem molecular à nível de ensino médio. O aluno poderá compreender melhor o mecanismo da reação orgânica estudada ao invés de somente decorar ou pesquisar o conteúdo nos livros didáticos, sem ter a explicação plausível para tal mecanismo. Para a sociedade (principalmente a estudantil) a possibilidade futura da inserção da disciplina ou conteúdos de modelagem molecular no ensino médio. Já para a ciência, tenho a convicção que projetos de modelagem molecular poderão instigar os alunos a pesquisa, o interesse pela Química Orgânica, Química Computacional, e o possível interesse dos alunos as carreiras (STEM), principalmente na Química, Física e Engenharia Química.

8. Da isenção e ressarcimento de despesas.

(por exemplo: "A minha participação é isenta de despesas e não receberei ressarcimento porque não terei despesas na realização dos exames, com locomoção, com medicamentos, etc., quando for o caso".)

No meu caso não se aplica. O projeto é de baixo custo, bancado pelo pesquisador. Todos os alunos tem notebook e acesso ao Google Sala de Aula. As despesas, no valor de 3.175,00, serão custeadas pelo próprio autor do projeto Cleitor Jacob Konrad.

9. Da forma de acompanhamento e assistência.

(descrever os direitos e garantias do participante de pesquisa, específicos para o estudo que está sendo realizado. No caso de o participante da pesquisa receber, ou ser encaminhado para, tratamento e/ou assistência, deve constar o nome da instituição - hospital, clínica, etc. - onde será tratado e/ou assistido.)

No meu caso não se aplica. Os alunos estão matriculados na Escola Estadual Técnica Affonso Wolf localizada na cidade de Dois Irmãos-RS. Os responsáveis são os pais e a pesquisa é totalmente on line. Se em algum momento durante a pesquisa algum estudante desistir ou adoecer e não puder participar mais, o mesmo terá a confidencialidade dos dados.

10. Da liberdade de recusar, desistir ou retirar meu consentimento.

Tenho a liberdade de recusar, desistir ou de interromper a colaboração nesta pesquisa no momento em que desejar, sem necessidade de qualquer explicação. A minha desistência não causará nenhum prejuízo à minha saúde ou bem-estar físico. Não irá interferir no andamento da pesquisa e terei a confidencialidade dos dados preservada.

11. Da garantia de sigilo e de privacidade.

Os resultados obtidos durante este estudo serão mantidos em sigilo, mas concordo que sejam divulgados em publicações científicas, desde que meus dados pessoais não sejam mencionados.

12. Da garantia de esclarecimento e informações a qualquer tempo.

Tenho a garantia de tomar conhecimento e obter informações, a qualquer tempo, dos procedimentos e métodos utilizados neste estudo, bem como dos resultados finais, desta pesquisa. Para tanto, poderei consultar o **pesquisador responsável (acima identificado)**. Em caso de dúvidas não esclarecidas de forma adequada pelo(s) pesquisador(es), de discordância com os procedimentos, ou de irregularidades de natureza ética poderei ainda contatar o **Comitê de Ética em Pesquisa em Seres Humanos da Ulbra Canoas (RS)**, com endereço na Rua Farroupilha, 8.001 – Prédio 14 – Sala 224, Bairro São José, CEP 92425-900 - telefone (51) 3477-9217, e-mail comitedeetica@ulbra.br.

Declaro que obtive todas as informações necessárias e esclarecimento quanto às dúvidas por mim apresentadas e, por estar de acordo, assino o presente documento em duas vias de igual conteúdo e forma, ficando uma em minha posse.

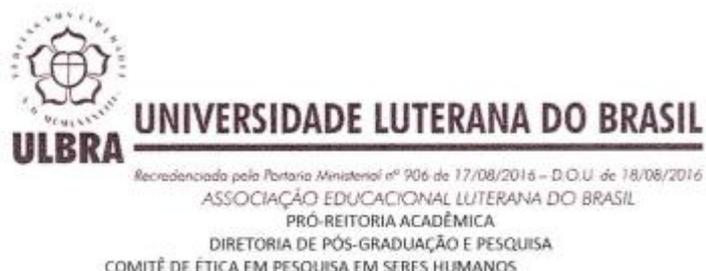
Dois Irmãos, 01 novembro de 2021.

Participante da Pesquisa

Responsável pelo Participante da Pesquisa

Pesquisador Responsável pelo Projeto

APÊNDICE M - Termo de Compromisso para Utilização de Dados 13

**TERMO DE COMPROMISSO PARA UTILIZAÇÃO DE DADOS**

Título do Projeto: Uso de Modelagem Molecular na Educação Química: Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica.

Os autores do projeto de pesquisa se comprometem a manter o sigilo dos dados coletados referentes aos participantes atendidos na Universidade Luterana do Brasil.

Concordam, igualmente, que estas informações serão utilizadas única e exclusivamente com finalidade científica, preservando-se integralmente o anonimato dos participantes.

Dois Irmãos, 01 de novembro de 2021.

Autores do Projeto	
Nome	Assinatura
Cleitor Jacob Konrad	<i>Cleitor Jacob Konrad</i>

APÊNDICE N - Termo Livre e Esclarecido para Menores 14

TERMO DE ASSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO (PARA MENORES DE 12 a 18 ANOS - Resolução 466/12)

Convidamos você, após autorização dos seus pais [ou dos responsáveis legais], para participar como voluntário (a) da pesquisa: (Uso de Modelagem Molecular na Educação Química: Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica). Esta pesquisa é da responsabilidade do pesquisador Cleitor Jacob Konrad (Avenida Farroupilha, 8001, CEP: 92425-000, Canoas-RS, prédio 14 – sala 224, cleitorkonrad24@rede.ulbra.br). Esta pesquisa está sob a responsabilidade do Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto (agostinho.serrano@ulbra.br).

Este Termo de Consentimento pode conter informações que você não entenda. Caso haja alguma dúvida, pergunte à pessoa que está lhe entrevistando para que esteja bem esclarecido (a) sobre sua participação na pesquisa. Você não terá nenhum custo, nem receberá qualquer pagamento para participar. Você será esclarecido(a) sobre qualquer aspecto que desejar e estará livre para participar ou recusar-se. Após ler as informações a seguir, caso aceite participar do estudo, assine ao final deste documento, que está em duas vias. Uma delas é para ser entregue aos seus pais para guardar e a outra é do pesquisador responsável. Caso não aceite participar, não haverá nenhum problema se desistir, é um direito seu. Para participar deste estudo, o responsável por você deverá autorizar e assinar um Termo de Consentimento, podendo retirar esse consentimento ou interromper a sua participação a qualquer momento, sem nenhum prejuízo.

INFORMAÇÕES SOBRE A PESQUISA:

Descrição da pesquisa: informar os objetivos, detalhamento dos procedimentos da coleta de dados, forma de acompanhamento (informar a possibilidade de inclusão em grupo controle ou placebo, se for o caso).

A área de educação de Química provavelmente pode se beneficiar deste tipo de pesquisa, pois é sabido que são raros os relatos de pesquisa envolvendo as contribuições da modelagem molecular para o ensino médio, segundo recente revisão de literatura realizada. Acreditamos que a pesquisa pode trazer benefícios para a área da cognição, porque a habilidade visuoespacial pode ser um facilitador do processo de criação de novas representações e modelos mentais de acordo com a Teoria da Mediação Cognitiva (TMC). Em relação a área do currículo, será a introdução da modelagem molecular no currículo do ensino médio. Nesse contexto, de acordo Ramos (2015, apud KABERMAN; DORI, 2007) defendem o uso da modelagem molecular para o desenvolvimento da habilidade de pensamento de alta ordem, que envolve capacidades tais como: análise, de síntese, 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. Em relação aos objetivos é investigar o aprendizado de conceitos químicos após uso de *software* de modelagem molecular para modelagem da reação de Substituição Aromática Eletrofílica sobre o Clorobenzeno, Nitrobenzeno e Fenol. Nesse contexto, os objetivos serão interpretar a produção de gestos descritivos combinados ao discurso verbal dos estudantes afim de obter as imagens mentais oriundas de diferentes mediações durante a resolução de problemas propostos; levantar as representações mentais proposicionais e analógicas dos estudantes bem como os seus drivers utilizados durante a atividade; investigar de que forma o raciocínio visuoespacial dos estudantes foi modificado com o uso da modelagem; entender quais mediações vão proporcionar uma produção maior de imagens mentais, ou seja, identificar as mediações predominantes.

Os encontros serão semanais no horário da disciplina de Química Orgânica. Todas as aulas serão montadas seguindo as primeiras etapas da Unidade Didática. Estão previstos sete encontros semanais on line (todos os alunos tem acesso através da plataforma google Sala de Aula), onde cada encontra o pesquisador ministrará teoria intercalada com a realização de exercícios de modelagem molecular (encontrada no anexo do projeto) por parte dos estudantes. As etapas finais, que são: Aula expositiva final, Avaliação da aprendizagem da Unidade Didática e Avaliação da própria Unidade Didática, serão realizadas posteriormente à aplicação das Unidades Didáticas. Devido a pandemia provocada pelo Coronavírus (COVID-19) à realização das aulas serão remotas. A seguir a essa

primeira parte da aplicação da Unidade Didática, realizaremos um pós-teste com os discentes. O pós-teste será baseado em questões dos livros didáticos de Ciências do Ensino Médio, que foram analisados por nós. Os alunos terão a oportunidade de responder as questões através de desenhos e textos, como se estivessem explicando para um colega sobre os conceitos envolvidos sobre a reação em estudo. Após a aplicação do pós-teste, os estudantes serão entrevistados conforme a adaptação da técnica “Think Aloud” (VAN-SOMEREN et al., 1994), o protocolo “Report Aloud” (RAMOS, 2015). A diferença entre os métodos é que no “Think Aloud” o entrevistador e o entrevistado mantêm um constante diálogo a respeito do que o entrevistado está pensando durante a execução de uma tarefa, ou seja, enquanto o estudante responde o questionário, e pensa em voz alta. Já, no “Report Aloud”, o estudante reporta ao entrevistador o seu processo de pensamento enquanto estava respondendo as questões, isto é, o estudante resolve as questões e só depois, ao finalizá-las, reporta o seu processo de processamento. As entrevistas serão gravadas e transcritas para análise. Para analisar os gestos descritivos será baseado na linha de trabalho que revela o conhecimento implícito inerente à visualização interna, mediante externalização por análise gestual (MONOGHAN; CLEMENT, 1999). A partir dessa metodologia, é presumível identificar padrões de gestos e relacioná-los com os conhecimentos implícitos existentes na estrutura cognitiva dos alunos (CLEMENT; STEPHENS, 2010). O que Clement e Stephen chamam de imagens mentais e simulações mentais interpretamos aqui, no contexto de nosso referencial teórico, como representações e drivers. Este procedimento fundamenta-se no fato em que um vínculo estabelecido entre gestos descritivos e imagens mentais.

□□ Esclarecimento do período de participação do voluntário na pesquisa, início, término e número de visitas para a pesquisa. Em caso de pesquisa onde o voluntário está sob qualquer forma de tratamento, assistência, cuidado ou acompanhamento, explicar procedimentos, intervenções ou tratamentos a que será submetido e quais os métodos alternativos (atualmente empregados no atendimento aos pacientes que não estão em pesquisas).

OBS: Em caso de coleta de material biológico, esclarecer com detalhes a quantidade e procedimentos para sua obtenção (Ex.: serão colhidos 20 ml de sangue – 1 colher de sopa – da veia do braço).

Os encontros serão semanais no horário da disciplina de Química Orgânica. Todas as aulas serão montadas seguindo as primeiras etapas da Unidade Didática. Estão previstos sete encontros semanais on line (todos os alunos tem acesso através da plataforma google Sala de Aula), onde cada encontra o pesquisador ministrará teoria intercalada com a realização de exercícios de modelagem molecular (encontrada no anexo do projeto) por parte dos estudantes. As etapas finais, que são: Aula expositiva final, Avaliação da aprendizagem da Unidade Didática e Avaliação da própria Unidade Didática, serão realizadas posteriormente à aplicação das Unidades Didáticas. Devido a pandemia provocada pelo Coronavírus (COVID-19) à realização das aulas serão remotas. Não se aplica o caso de tratamento.

RISCOS diretos para o voluntário (prejuízo, desconforto, constrangimento, lesões que podem ser provocados pela pesquisa), informar as formas de amenizar os riscos bem como indenização, ressarcimento de despesas em caso de dano.

Em relação aos riscos pode ocorrer a quebra accidental de confidencialidade, uma vez que os dados ficarão armazenados em computador e poderá haver vazamento de dados. A participação no projeto não contempla riscos físicos aos participantes. Outro risco que pensamos ser possível é de que os estudantes fiquem desconfortáveis em alguns momentos da entrevista, mas estarão livres de não participarem a qualquer momento.

BENEFÍCIOS diretos e indiretos para os voluntários.

OBS.: Em casos de pesquisas para avaliação de prevalência ou de diagnóstico de doenças, especificar onde será o acompanhamento do paciente após o diagnóstico.

Para o participante da pesquisa creio que agregará maior conhecimento e entendimento em relação ao estudo das reações orgânicas com a utilização de um *software* de modelagem molecular à nível de ensino médio. O aluno poderá compreender melhor o mecanismo da reação orgânica estudada ao invés de somente decorar ou pesquisar o conteúdo nos livros didáticos, sem ter a explicação plausível para tal mecanismo. Para a sociedade (principalmente a estudiantil) a possibilidade futura da inserção da disciplina ou conteúdos de modelagem molecular no ensino médio. Já para a ciência, tenho a convicção que projetos de modelagem molecular poderão instigar os alunos a pesquisa, o interesse pela Química Orgânica, Química Computacional, e o possível interesse dos alunos as carreiras (STEM), principalmente na Química, Física e Engenharia Química.

As informações desta pesquisa serão confidenciais e serão divulgadas apenas em eventos ou publicações científicas, não havendo identificação dos voluntários, a não ser entre os responsáveis pelo estudo, sendo assegurado o sigilo sobre a sua participação. Os dados coletados nesta pesquisa

pré-testes, pós-testes e entrevistas ficarão armazenados no computador pessoal, sob a responsabilidade do Cleitor Jacob Konrad sob a orientação do professor orientador Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto, no endereço (acima informado), pelo período de no mínimo 5 anos. Nem você e nem seus pais [ou responsáveis legais] pagarão nada para você participar desta pesquisa. Se houver necessidade, as despesas para a sua participação e de seus pais serão assumidas ou ressarcidas pelos pesquisadores. Fica também garantida indenização em casos de danos, comprovadamente decorrentes da sua participação na pesquisa, conforme decisão judicial ou extrajudicial.

Este documento passou pela aprovação do Comitê de Ética em Pesquisa Envolvendo Seres Humanos que está no endereço:

Av. Farroupilha, nº 8.001 – prédio 14, sala 224 – Bairro: São José – Canoas/RS, CEP: 92425-900, Tel.: (51) 3477-9217 – e-mail: comitedeetica@ulbra.br.

Assinatura do pesquisador (a)

ASSENTIMENTO DO MENOR DE IDADE EM PARTICIPAR COMO VOLUNTÁRIO

Eu, _____, portador (a) do documento de Identidade _____ (se já tiver documento), abaixo assinado, concordo em participar do estudo “Uso de Modelagem Molecular na Educação Química: Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica”, como voluntário (a). Fui informado (a) e esclarecido (a) pelo (a) pesquisador (a) sobre a pesquisa, o que vai ser feito, assim como os possíveis riscos e benefícios que podem acontecer com a minha participação. Foi-me garantido que posso desistir de participar a qualquer momento, sem que eu ou meus pais precisemos pagar nada.

Dois Irmãos, 01 novembro de 2021.

Assinatura do (da) menor: _____

Presenciamos a solicitação de assentimento, esclarecimentos sobre a pesquisa e aceite do/a voluntário/a em participar. 2 testemunhas (não ligadas à equipe de pesquisadores):

Nome:

Nome:

Assinatura:

Assinatura:

APÊNDICE O - Termo de Consentimento para Utilização de Dados 15



UNIVERSIDADE LUTERANA DO BRASIL

Recredenciada pela Portaria Ministerial nº 906 de 17/08/2016 – D.O.U. de 18/08/2016
 ASSOCIAÇÃO EDUCACIONAL LUTERANA DO BRASIL
 PRÓ-REITORIA ACADÊMICA
 DIRETORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
 COMITÊ DE ÉTICA EM PESQUISA EM SERES HUMANOS

TERMO DE COMPROMISSO PARA UTILIZAÇÃO DE DADOS

**Título do Projeto: Uso de Modelagem Molecular na Educação Química:
 Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica.**

Os autores do projeto de pesquisa se comprometem a manter o sigilo dos dados coletados referentes aos participantes atendidos na Escola Estadual Técnica Affonso Wolf.

Concordam, igualmente, que estas informações serão utilizadas única e exclusivamente com finalidade científica, preservando-se integralmente o anonimato dos participantes.

Dois Irmãos, 01 de novembro de 2021.

Autores do Projeto	
Nome	Assinatura
Cleitor Jacob Konrad	<i>Cleitor Jacob Konrad</i>

APÊNDICE P - Carta de Anuência 16

Escola Estadual Técnica Affonso Wolf

CARTA DE ANUÊNCIA DO LOCAL DA COLETA DE DADOS



Ao Comitê de Ética em Pesquisa em Seres Humanos da Universidade Luterana do Brasil/RS

Prezados Senhores,

Declaro que tenho conhecimento e autorizo a realização do projeto de pesquisa intitulado "**Uso de Modelagem Molecular na Educação Química: Regioquímica da Reação de Substituição Aromática Eletrofílica**", proposto pelo(s) pesquisador (es) **Cleitor Jacob Konrad**.

O referido projeto será realizado de forma voluntária, na modalidade presencial, com alunos do terceiro ano de uma turma da Escola Estadual Técnica Affonso Wolf, localizada na cidade de Dois Irmãos e só poderá ocorrer a partir da apresentação do Parecer de Aprovação do Colegiado do Comitê de Ética em Pesquisa em Seres Humanos da Universidade Luterana do Brasil/RS.

Dois Irmãos, 01 novembro de 2021.

Nome: PAULO RENATO DAPPERFunção na Instituição: DIRETOREndereço: Rua Renato Vier, 205, Bairro Vale Verde

Assinatura e carimbo
Paulo Renato Dapper
Diretor
It. F. 1536276/02
D.O. 27/12/18 PG. 1621