

UMA PROPOSTA PARA O ENSINO DE ESTEREOQUÍMICA CIS/TRANS A PARTIR DE UMA UNIDADE DE ENSINO POTENCIALMENTE SIGNIFICATIVA (UEPS) E DO USO DE MODELAGEM MOLECULAR

A Proposal for Teaching Stereochemistry cis/trans from a Potentially Meaningful Teaching Unit (PMTU) and usage of molecular modeling

Adriana de Farias Ramos [adrfram@gmail.com]

Agostinho Serrano [asandraden@gmail.com]

Universidade Luterana do Brasil – ULBRA/RS

Av. Farroupilha, nº 8001. Bairro São José. Cep: 92425-900. Canoas/RS

RESUMO

O aprendizado de ciências ainda é, em grande medida, mecânico; e o aprendizado de Química não é um contra-exemplo desta indesejável situação. Várias reformas propostas recentemente de reestruturação do currículo da Química consideram que para termos um aprendizado mais significativo o estudante deve ser capaz de ver a química como uma ciência preditiva a partir de uma análise estrutural de compostos químicos e também de compreender fenômenos químicos sob a ótica do conceito de energia. Assim, o objetivo deste trabalho é propor a utilização de uma sequência didática, baseada no uso de técnicas de modelagem molecular e construída dentro do modelo de Moreira de UEPS, para o ensino de estereoquímica *cis/trans*. A atividade tem como objetivo realizar uma análise conformacional do n-butano e dos isômeros *cis* e *trans* do 2-buteno. Desta forma, pretende-se oferecer a oportunidade para que o estudante compreenda dois conceitos fundamentais: a) que a energia de uma molécula é determinada pela estrutura que a mesma assume no espaço, e a molécula irá assumir a estrutura tal que a sua energia seja um mínimo e b) que no caso das ligações duplas, existe uma barreira de potencial que impede a rotação espontânea em torno da ligação dupla, sem que a mesma seja rompida. Assim, empregamos a perspectiva teórica ausubeliana de um ensino potencialmente significativo por meio do conceito integralizador da energia molecular dos conformeros *cis/trans*, energia esta obtida por meio de modelagem molecular. Resultados exploratórios parecem indicar que, caso o estudante já saiba visualizar microscopicamente espécies químicas, é possível reordenar sua estrutura conceitual no campo da isomeria por meio de uma aprendizagem significativa combinatória em torno do conceito de energia.

Palavras-chave: sequência didática, aprendizagem significativa, modelagem molecular, ensino de química, isomeria, aprendizagem significativa combinatória.

ABSTRACT

Science learning still is, to a great extent, mechanical; and Chemistry learning does not constitute a counter example of this undesirable situation. Many reforms recently proposed of re-structuring chemistry curriculum ponder that in order to have a more meaning learning the student must be able to see chemistry as a predictive science made upon a structural analysis of chemical compounds and also to be able to understand chemistry phenomena within the framework of the concept of energy. Hence, the goal of this work is to propose the usage of a didactic sequence, based on using Molecular Modeling techniques and built with Moreira's model of PMTU for teaching *cis/trans* stereochemistry. The activity has the objective of performing the conformational analysis of n-butane and the *cis/trans*

isomers of 2-butene. Thus, its intended to offer the opportunity for the student to understand two fundamental concepts: a) that the energy of a molecule is determined by the structure that it assumes in space, and the molecule will assume the structure which has a minimum of energy and b) in case of double bonds, there is a potential barrier which prevents the spontaneous rotation around the double bond, without breaking it. Therefore, we employ the theoretical perspective of Ausubel of a potentially meaningful teaching by means of the integralizing concept of molecular energy of the cis/trans conformers, with such energy obtained by means of molecular modeling. Exploratory results seem to indicate that, if the student is already able to visualize microscopically chemical species, it is possible to reorder his conceptual structure in the field of isomerism by means of a combinatory meaningful learning around the concept of energy.

Key-words: didactical sequence, meaningful learning, molecular modeling, teaching chemistry, isomerism, combinatory meaningful learning.

INTRODUÇÃO

Durante séculos, o ensino tem sido praticado nas escolas de forma mecânica e centrado na transferência e memorização de conceitos e conhecimentos. Em muitos casos, a escola é diretiva assim como as práticas dos professores. No ensino de química, essa realidade não é diferente. Os conceitos da química ainda são transmitidos de forma dogmática e com forte ênfase na memorização de símbolos, propriedades e fórmulas (CHASSOT, 2004). Vários são os relatos da literatura na área de Ensino de Ciências sobre as dificuldades de aprendizagem de estudantes do ensino médio, e isto não seria diferente para o caso particular do ensino de química (CASTILHO et al., 1999; SILVA et al., 2003; ROGADO, 2004).

Quando a aprendizagem é mecânica, o novo conhecimento apresentado ao estudante não interage com a sua estrutura cognitiva e, portanto, não a modifica. A consequência disto é que o estudante não credita significado a esse conhecimento e simplesmente armazena-o mecanicamente por um tempo relativamente curto. Numa breve visita à teoria de aprendizagem significativa de David Ausubel (AUSUBEL, 1968, 1978, 2000) podemos perceber que é o estudante quem define o que quer aprender e que os conhecimentos prévios destes estudantes, chamados por Ausubel de subsunçores, é que são a variável fundamental da aprendizagem significativa. Portanto, para haver aprendizagem significativa, deve existir interação entre a estrutura cognitiva do estudante (conceitos e relações) e o novo conhecimento apresentado em sala de aula, de forma que este último tenha significado para o aprendiz. Por isso a importância de conhecermos minimamente os subsunçores (conhecimentos prévios) dos estudantes para planejarmos a melhor forma de fazer a ancoragem do novo conhecimento aos seus conhecimentos prévios.

A busca por uma prática de ensino onde conceitos sejam aprendidos de uma forma menos mecânica é um dos objetivos de várias propostas de reformas curriculares que são discutidas na área de Educação Química há décadas. Recentemente, Cooper & Klymkovsky (2013) propuseram uma reforma em torno do conceito integralizador de energia, pois, defendem os autores:

Várias propostas de reforma curricular da química sacrificam profundidade por abrangência e deixam os estudantes sem outra escolha a não ser terminar as disciplinas por métodos como reconhecimento de padrões e memorização ao invés de aplicar princípios químicos fundamentais para explicar e prever como um sistema irá se comportar. (COOPER; KLYMKOWSKY, 2013, p. 1117)

Ainda este ano, Schaller et al. (2014) propõem, na mesma linha, uma reforma geral em torno dos conceitos de Estrutura, Reatividade e Quantificação. Este último citando explicitamente conceitos quânticos e química computacional pois, segundo os autores, a química deveria ser ensinada como uma ciência preditiva, portanto, quantificável e profundamente vinculada com a relação entre estrutura e propriedade de moléculas em transformação; ao mesmo tempo que diminui-se a ênfase nas barreiras tradicionais de divisão da química em química analítica, orgânica, inorgânica, etc. Assim, acreditamos que uma proposta de ensino que utilize as técnicas quantificadoras da modelagem molecular – que por si estuda a química de um ponto de vista estrutural – mas em torno do conceito integralizador de energia seja capaz de contribuir de forma produtiva para uma congruência entre estas duas visões do ensino de química propostas.

Uma estratégia eficiente para o desenvolvimento de materiais instrucionais claramente vinculados à ideia central de aprendizagem significativa ausubeliana é o da construção de uma Unidade de Ensino Potencialmente Significativa (UEPS). As Unidades de Ensino Potencialmente Significativas foram introduzidas por Moreira (2011), com o objetivo explícito, segundo o autor, de:

(...) contribuir para modificar, pelo menos em parte, essa situação (de aprendizagem mecânica ubiquamente presente no ensino atual). Propõe-se neste trabalho a construção de Unidades de Ensino Potencialmente Significativas. São sequencias de ensino fundamentadas teoricamente, orientadas à aprendizagem significativa, não à aprendizagem mecânica, que podem estimular a investigação aplicada no ensino. (MOREIRA, 2011, pg. 43).

Com a adoção das UEPS, o autor pretende criar formas de tornar a aprendizagem dos estudantes mais efetiva. Assim, utilizamos dentro de nossa sequencia didática a estratégia proposta de UEPS, utilizando o conceito de energia como conceito integralizador.

MODELOS, MODELAGEM E MODELAGEM MOLECULAR: SITUANDO A QUESTÃO

Gilbert e Boutler, 1995 (*apud* FERREIRA; JUSTI, 2008) abordam a utilização de modelos para o ensino de ciências e fazem a seguinte afirmação:

Um modelo pode ser definido como uma representação parcial de um objeto, evento, processo ou ideia, que é produzida com propósitos específicos como, por exemplo, facilitar a visualização; fundamentar elaboração e teste de novas ideias; e possibilitar a elaboração de explicações e previsões sobre comportamentos e propriedades do sistema modelado (Gilbert e Boutler, 1995, *apud* FERREIRA; JUSTI, 2008, pg. 32)

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

Assim, o termo modelagem pode ser considerado como um processo de construção e reformulação de modelos. Wolff & Serrano (2011) apresentam um estudo aprofundado do uso de modelos e do significado da modelagem a partir dos referenciais da modelagem matemática. Isto porque, na educação matemática é possível se encontrar uma discussão profícua sobre o tema, contando até com encontros e congressos específicos à modelagem matemática, assim como diferentes vertentes de pensamento sobre o que é considerado na modelagem matemática.

Nas outras áreas da ciência, a modelagem tem sido cada vez mais usada para atividades didáticas (REBELLO; RAMOS, 2009; ARAUJO et al., 2012; RODRIGUES, 2012). Na química não

é diferente, pois o uso de modelos e modelagem, principalmente de modelos atômicos, é largamente disseminado (APPELT et al., 2009).

Especificamente em relação às situações didáticas, a apresentação desta UEPS para o ensino de estereoquímica *cis/trans* conta com a introdução do uso de um software de modelagem molecular. Acharmos importante, nesse momento, diferenciar a modelagem molecular das demais modelagens possíveis na química.

A IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), que representa a comunidade internacional de pesquisadores em química, conceitua modelagem molecular como a parte da química que trata da “investigação de estruturas moleculares e propriedades usando a química computacional e técnicas de visualização gráfica, a fim de fornecer uma representação plausível tridimensional sob um determinado conjunto de circunstâncias” (IUPAC, 1997).

A partir da década de 1960, o uso de computadores impulsionou e consolidou a química quântica, pois possibilitou a rápida realização dos cálculos complexos da mecânica quântica (FREITAS, 1999). No entanto, essa utilização ocorreu somente na área da química profissional. Na área da educação, os softwares de modelagem molecular tiveram uma disseminação mais branda devido a vários fatores. Uma excelente discussão desta dificuldade de professores de química utilizarem modelagem molecular foi publicada por Aksela e Lundell (2008): dificuldades dos docentes no uso dos softwares; excesso de estudantes nas salas e de conteúdos a vencer, dentre outras. Contudo, a modelagem molecular é uma realidade crescente dentro do universo da química e seu uso no ensino, segundo a visão de vários educadores, é meramente uma questão de tempo.

Atualmente existem diversas opções de softwares – gratuitos e pagos – que proporcionam a realização de cálculos usando diversos métodos de cálculos, tais como o Hyperchem (HYPERCUBE, 2007) e o Spartan (WAVEFUNCTION, 2014), além dos softwares mais simples, que proporcionam a visualização de moléculas químicas. Além destes, há inúmeras outras ferramentas interativas e aplicativos disponíveis na internet. São ferramentas importantes para desenvolver nos estudantes as habilidades visuoespaciais, como ponto fundamental para a compreensão de diversos conceitos químicos (WU et al., 2001). Uma revisão destes modelos foi discutida por Appelt, Oliveira e Martins (2009) que discute historicamente o uso de modelos moleculares em sala de aula, chegando a mencionar a possibilidade de utilização de modelagem molecular. Com relação a postostas didáticas, há algumas publicadas que fazem uso de *softwares* de visualização com o intuito de contribuir para uma melhoria na visualização espacial de estudantes de química (RAUPP et al., 2009). Contudo, até o momento, não registramos a publicação de uma sequência didática estruturada em torno de um aporte de ensino-aprendizagem, dentro dos objetivos de uma reforma curricular proposta pela área da Educação Química que utilize modelagem molecular, mesmo em uma ampla revisão bibliográfica realizada em periódicos nacionais e internacionais (RAMOS; SERRANO, 2013).

Os *softwares* de modelagem molecular vão muito além de propiciar a visualização das moléculas num espaço tridimensional. A utilização destes *softwares* constitui-se em poderosa ferramenta de processamento externo, sem os quais não seria possível a abordagem de conteúdos específicos que envolvem cálculos mais complexos (RAUPP et al., 2010).

Com estes *softwares* podemos obter rapidamente, e com base em diversos métodos, um conjunto de valores calculados, tais como: o mapa de potencial eletrostático das moléculas, o contorno de densidade eletrônica, as energias potenciais das moléculas, os coeficientes dos orbitais de fronteira, dentre outras informações que não podemos dispor sem o seu uso (RODRIGUES, 2001).

A possibilidade de utilização destes *softwares* nas atividades didáticas pode abrir um horizonte ainda não imaginado por muitos docentes. A possibilidade de visualização de simulações computacionais envolvendo a modelagem molecular possibilita a predição da estabilidade de

moléculas, do mecanismo de reações químicas e de um conjunto importante de conceitos e de difícil compreensão por parte dos estudantes.

O uso de *softwares* de modelagem molecular é didaticamente interessante porque permite melhorar a capacidade de representação dos estudantes. Estes *softwares* mostram algumas propriedades de átomos e moléculas que os modelos físicos ou de visualização não mostram. Além disso, os *softwares* de modelagem molecular fazem cálculos importantes e mostram determinados valores calculados, tais como de função de onda, de ângulos e distâncias de ligação, e de valores de uma série de propriedades interessantes que os demais *softwares* não mostram.

Com essas informações, efetivamente calculadas de forma rápida, o professor pode fazer um paralelo das propriedades das moléculas em função de valores concretos, que foram calculados com o *software* com base na mecânica molecular. Em outras situações, que envolvem o uso do quadro negro ou mesmo de Tecnologias de Informação e Comunicação (TIC), não há disponibilidade de ferramental para isso.

Com o uso destes *softwares*, o professor pode obter em instantes a densidade de carga de moléculas e trabalhar mais efetivamente conteúdos que historicamente são de difícil compreensão. Sem o *software*, que faz esses cálculos, é praticamente impossível mostrar visualmente estas propriedades, pois isso envolve cálculos matemáticos extremamente complexos. Nesse sentido, 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.

O uso de ferramentas de modelagem molecular pode, além de todos os benefícios discutidos anteriormente, oferecer a oportunidade para os estudantes desenvolverem habilidades de pensamento mais complexas, principalmente àqueles que não possuem a habilidade visuoespacial bem desenvolvida (KABERMAN; DORI, 2007). Passamos agora a explicar detalhadamente a sequência didática por nós proposta.

A SEQUÊNCIA DIDÁTICA

A sequência proposta neste trabalho conta com uma situação inicial que apresenta diversos recursos didáticos e que leva os estudantes a externalizar os seus subsunçores. Tendo como base os resultados da situação inicial, o professor necessita introduzir uma ou mais situações-problema com objetivo de preparar a abordagem mais concreta sobre os conteúdos a serem desenvolvidos. Para exemplificar nossa atividade utilizamos, dentre as várias opções existentes no mercado de *softwares* proprietários e livres, o *software Spartan 8* (WAVEFUNCTION, 2014).

Após estas duas etapas introdutórias e preparatórias, o professor pode, com diferentes estratégias, abordar os conteúdos até então trabalhados, iniciando por aspectos mais gerais do conhecimento em foco (diferenciação progressiva ausubeliana) para, posteriormente, tratar os aspectos mais específicos (AUSUBEL et al., 1978).

A sequência se desenrola com uma nova rodada de situações-problema, nas quais são abordados conhecimentos mais complexos e de forma mais aprofundada. A partir desse ponto, o professor pode realizar uma avaliação somativa individual a fim de poder colher informações dos estudantes sobre a necessidade de correções de rumos ou de aprofundamentos dos conhecimentos.

Ao final dessa etapa, e de posse do resultado da avaliação somativa individual, o professor organiza a aula integradora final, que vai fazer o fechamento dos conteúdos abordados no tópico. Após essa etapa, o professor organiza uma avaliação final de aprendizagem da UEPS. A sequência

didática apresentada nesse trabalho (UEPS) foi inspirada no Anexo IV do artigo que define as UEPS (Moreira, 2011), que exemplifica uma UEPS dirigida ao ensino de Equilíbrio Químico¹, e conta com as seguintes etapas:

1) Situação Inicial: Apresentar aos estudantes o roteiro da construção de uma modelagem molecular computacional envolvendo a análise conformacional de uma molécula de alcano (n-butano) na qual haverá a rotação da ligação simples C2-C3 em conjunto com o gráfico da energia da molécula em função do ângulo de torção desta ligação. A partir da manipulação do *software* e da simulação propriamente dita, os estudantes, em duplas, serão convidados a realizar todos os passos para montar a simulação no *software Spartan 8* e observar as etapas do processo de rotação da ligação C2-C3 num ângulo de até 360°, além de relacionar cada ângulo de torção com a energia da molécula. O roteiro, de forma resumida, consiste nos seguintes passos: com a área de trabalho do software aberta, clicar em  para iniciar a composição da molécula. Clicar em  e construir a molécula com 4 carbonos ligados entre si. Após, clicar em  e selecionar os quatro carbonos, clicando em cada um deles. Na parte inferior direita aparecerá a imagem . Clicar sobre o cadeado.

Depois, clicar em  e depois em . Clicar novamente nos quatro carbonos e ajustar o ângulo da molécula para 0°, na parte inferior direita da tela. Envolvendo a ligação C2-C3 há uma forma cor de rosa “constrain”. Clicar sobre essa forma, depois em menu, “display” e “properties”. Selecionar a opção “dynamics” e ajustar os ângulos de rotação da simulação entre 0° e 360° assim como as etapas em 20, fechando a janela após os ajustes. No menu, ir em “setup” e em “calculations”. Na aba “calculate”, selecionar “energy profile”, “ground”, “semi-empirical” e “PM3”. Clicar em “submit” e, depois, em “save” e “ok”. Um novo documento será criado. Neste novo documento, ir em menu, “display” e “spreadsheet”. Clicar em “add” e selecionar “E”. Clicar novamente em , selecionar novamente os quatro átomos de carbono e clicar em , na parte inferior direita. Ir em menu, “display”, “plots”. Selecionar “constrain” para o eixo “x” e “E” para o eixo “y”, fechando a janela. Aparecerá o gráfico e a molécula e a simulação pode ser iniciada com o comando  na parte inferior esquerda da tela. (estimativa de 40 minutos).

Nesta etapa inicial, que pode ser pensada como um organizador prévio, os estudantes poderão relembrar conceitos como: ligações químicas; propriedades dos hidrocarbonetos e suas ligações; geometria das moléculas de alcanos, suas diferentes conformações e relações com a energia.

2) Situação Problema: Depois de observar a simulação em andamento, os estudantes terão que debater no grupo os resultados obtidos e serão convidados a responder aos seguintes questionamentos: Qual a relação entre ângulo de torção e energia para a molécula de n-butano? Em qual ângulo de torção da ligação C2-C3 a conformação é mais estável e porque ocorre a estabilidade da molécula? (estimativa de 20 minutos)

3) Aprofundando Conhecimentos: em uma aula expositivo-dialogada, o professor irá abordar os conhecimentos envolvidos na atividade da situação inicial, levando em consideração as respostas dos estudantes aos questionamentos propostos na situação problema. O conjunto de tópicos que serão abordados nessa etapa vai depender das respostas dos alunos aos questionamentos apresentados, ou seja, vai depender dos conhecimentos prévios que estes estudantes possuem e dos questionamentos apresentados por eles na aula, mas podem ser os que seguem: estrutura dos átomos, ligação química e a relação da estrutura com a energia envolvida na formação das ligações; propriedades das ligações

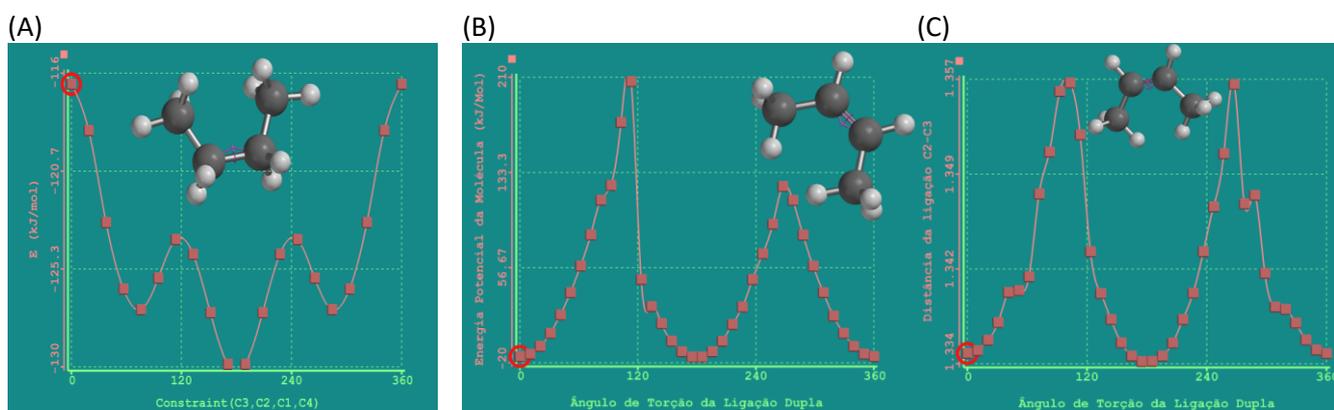
¹ SERRANO, A. Propuesta de UEPS para enseñar equilibrio químico (Anexo 4). In: MOREIRA, M.A. Unidades de Enseñanza Potencialmente Significativas –UEPS. Aprendizagem Significativa/Meaningful Learning Review. V1(2), pp. 43-63, 2011.

do carbono; ligações simples e duplas, suas características e propriedades; diferentes conformações de moléculas orgânicas. (estimativa de 60 minutos)

4) Nova Situação Problema: os estudantes, novamente reunidos em duplas, serão convidados a abrir duas simulações, previamente elaboradas pelo professor, utilizando o *software spartan 8*. Ambas as simulações possuem a mesma arquitetura que a anterior (uma molécula girando e um gráfico ao lado mostrando, em tempo real, a variação de energia ou outra propriedade importante em função do ângulo de torção) e abordam a possível torção da ligação dupla C2=C3 do cis-2-buteno. A primeira simulação mostra a molécula do cis-2-buteno sendo torcionada na ligação dupla em um ângulo de até 360° em conjunto com o gráfico que relaciona o ângulo de torção com a distância da ligação C2=C3. A segunda simulação mostra a mesma molécula torcionando, no entanto agrega a representação dos orbitais HOMO (orbitais moleculares de maior energia – orbitais de ligação), sendo que o gráfico mostra a relação entre a energia da molécula em função do ângulo de torção. Os alunos são incentivados a debater sobre o conteúdo das simulações com o intuito de perceber as mudanças ocorridas na molécula e a existência da barreira de potencial. A primeira simulação de modelagem molecular relaciona a torção da molécula com o aumento do caráter de ligação simples. A presença da representação dos orbitais HOMO na segunda simulação de modelagem molecular é importante, pois será a partir dela que os estudantes poderão visualizar que a barreira de potencial existente para a rotação da molécula na ligação C2=C3 é justamente a quantidade de energia necessária para romper a ligação pi e a representação mostra claramente esse rompimento. (estimativa de 40 minutos)

5) Avaliação Somativa Individual: Após a observação das duas simulações, novamente os estudantes são levados a debater em grupo. Em seguida, os estudantes respondem individualmente às seguintes questões: Depois de observar as simulações do n-butano e do cis-2-buteno, avalie o “custo energético” da rotação da ligação dupla no cis-2-buteno e se é possível a conversão da forma cis em trans e vice-versa. Sabendo que o comprimento das ligações simples do n-butano é de 1,52 angstroms, e da ligação dupla C2=C3 no cis-2-buteno é de 1,342 angstroms, procure explicar a alteração dessa medida ao longo da torção da ligação dupla. De que forma a presença da representação dos orbitais HOMO contribuem para a compreensão do fenômeno envolvido na torção da ligação dupla C2=C3 do cis-2-buteno? (estimativa de 30 minutos). A Figura 1, a seguir, mostra as telas do *software Spartan 8*, com as três simulações computacionais de modelagem molecular realizadas na UEPS.

Figura 1: simulação computacional de modelagem molecular utilizada na unidade de ensino de estereoquímica *cis/trans*. (A) análise conformacional do n-butano, envolvendo a rotação em torno da ligação C2–C3 e com o gráfico de energia das diferentes conformações. (B) avaliação da energia da molécula do cis-2-buteno em função do ângulo de torção da ligação dupla C2=C3. (C) avaliação da distância da ligação dupla C2=C3 em função do seu ângulo de torção.



6) Aula Integradora Final: Nesse momento da sequência didática, há condições para o professor abordar mais profundamente as características e propriedades das ligações químicas do carbono nas moléculas de alcanos e alcenos, as diferenças entre ligações simples e duplas na perspectiva da

energia das moléculas, bem como as barreiras de potencial que conduzem a termos o fenômeno da estereoquímica *cis/trans*. O professor pode se utilizar das respostas dos estudantes aos questionamentos apresentados nas duas simulações, para conduzir essa etapa, buscando corrigir dificuldades e construções equivocadas, assim como apresentar novos exemplos de moléculas, incluindo as moléculas cíclicas.

7) Avaliação da Aprendizagem na UEPS: ao longo do processo, o professor buscará indícios de ganho cognitivo nos estudantes no nível microscópico e das representações (compreensão dos modelos moleculares e de ligações químicas). É importante o professor buscar indícios de que os estudantes consolidaram suas habilidades visuoespaciais com a utilização do *software* de modelagem molecular, assim como compreenderam o papel do conceito de energia das moléculas integrando os outros conceitos e explicando, por meio da barreira de potencial, a isomeria *cis/trans*.

8) Avaliação da UEPS: A aplicação da UEPS deve ser constantemente analisada sob o ponto de vista da efetividade do cumprimento dos seus objetivos. Na medida em que os estudantes conseguem obter um domínio progressivo dos conceitos abordados na sequência didática, a UEPS obteve seu êxito. No entanto, correções de rumos podem ser necessárias e uma abordagem final com os alunos sobre suas percepções acerca da forma da UEPS é importante. (estimativa de 30 minutos).

APLICAÇÃO EXPLORATÓRIA DA MODELAGEM MOLECULAR

A simulação computacional de modelagem molecular presente na UEPS foi aplicada num estudo exploratório com estudantes de primeiro semestre do Curso Técnico em Química do Campus Porto Alegre do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul (IFRS). Tradicionalmente, estereoquímica é apresentada a estes estudantes no primeiro semestre do referido curso e é considerado por eles um tópico de difícil compreensão. Os alunos realizaram esta atividade em um período extraclasse, sendo gentilmente cedidos pela professora titular da disciplina para a atividade.

O estudo envolveu as seguintes etapas: pré-teste individual, entrevista do pré-teste, a simulação de modelagem molecular em dupla, pós-teste individual e entrevista do pós-teste. Como fonte de dados desta contribuição, utilizamos a transcrição das entrevistas realizadas e também os gestos descritivos realizados e filmados em vídeo. Assim, é possível relacionar trechos do discurso do estudante sobre a modelagem com instâncias de observação de gestos descritivos sendo produzidos, que, segundo a literatura (MONAGHAN; CLEMENT, 1999; CLEMENT; STEPHENS, 2010), tem uma relação direta com a geração de imagens mentais.

De forma sucinta, observamos que todos os estudantes obtiveram ganhos na compreensão dos conteúdos envolvidos. Estudantes que tinham dificuldades de visualização desenvolveram essa habilidade, mas não a ponto de dialogar cognitivamente com os conceitos mais específicos de modelagem molecular. Por outro lado, os estudantes que já tinham a habilidade visuoespacial desenvolvida como elementos de subsunçores, passaram a modelar e tiveram indícios de predição do comportamento das moléculas envolvidas, o que se encaixa dentro do esperado para o aprendizado de Química, conforme proposto por Schaller et al. (2014), pois houve a previsão do comportamento de espécies química.

Esse comportamento é evidenciado, por exemplo, pelo estudante “C”. Quando perguntado sobre qual a principal diferença em suas respostas entre o pré-teste e o pós-teste o estudante “C” respondeu:

No caso, agora a única diferença é que agora, da primeira pra essa, foi que **eu consegui imaginar uma mesma molécula rotando e chegando em cis e trans**. Essa foi a principal diferença. Eu consegui **imaginar a mesma molécula mudando, só que essa mudança também causando diferenças nas características dela**

também. Essa rotação mudando característica física dela como polaridade e essas coisas assim, devido à mudança da molécula no espaço, dos seus átomos no espaço. (Estudante “C”).

Em negrito ressaltamos momentos em que o estudante produziu gestos descritivos que, segundo Clement (1999), indicam a produção de imagens mentais, adquiridas após o processo instrucional que fez uso de modelagem molecular. Quando o estudante se referiu à molécula como um todo, colocou a mão esquerda na sua frente como se estivesse segurando a molécula. Assim que seguiu a explicação de que via a mesma molécula girando e mudando a conformação, fez um gesto de fixar uma mão e girar somente a outra. E, por fim, no momento em que falou que esse giro intramolecular mudava as propriedades da molécula, como a polaridade, fez um gesto de contorno de uma superfície, demonstrando que a polaridade é alterada quando a molécula muda a conformação. Os gestos estão mostrados na Figura 2, a seguir.

Figura 2: gestos descritivos do estudante “C” no momento em que respondia qual a diferença nas respostas do pré-teste e pós-teste. (A) gesto de uma única mão “segurando a molécula”. (B) gesto com ambas as mãos, mostrando apenas parte da molécula torcionando. (C) gesto de contorno da molécula, quando se referiu à polaridade da mesma.



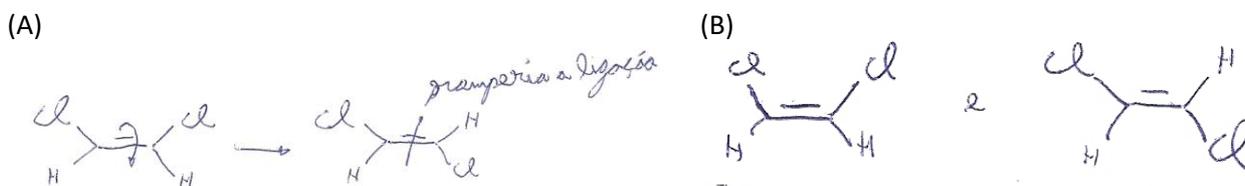
A modelagem molecular é um método de ensino que utiliza representações visuais tridimensionais que são aparentemente mais eficazes (Raupp et al., 2010) para o desenvolvimento de habilidades de visualização em química que métodos mais tradicionais e, portanto, são rapidamente subsumidas pela estrutura cognitiva do estudante.

Quando perguntado qual a sua avaliação sob o ponto de vista da energia, o mesmo estudante responde corretamente a relação da energia com a conformação que a molécula pode assumir:

É de para **visualizar também que essa rotação cis e trans ela até ocorreria se a energia não fosse tão alta, né?** Se não fosse necessário... se não fosse muita energia para molécula, ela até poderia ocorrer. E que, dependendo da conformação dela no espaço, eu também tenho uma energia muito baixa. Eu tenho uma molécula mais estável, no caso. (grifo nosso). (Estudante “C”).

Essas afirmações são comprovadas nos apontamentos do pré-teste deste estudante, apresentados na Figura 3, seguir:

Figura 3: Desenhos feitos pelo estudante “C” no pré-teste (A) e no pós-teste (B). O primeiro ilustra uma impossibilidade de mudança conformacional enquanto o segundo não resalta esta impossibilidade.



Além dos desenhos acima, o estudante explica textualmente no pré-teste: “a rotação de uma molécula *cis* para *trans* ou vice-versa que tenha ligação dupla não é possível, pois necessitaria muita energia para fazer essa rotação, o que faria com que a ligação ‘pi’ se quebre”.

No pós-teste, o estudante modifica sensivelmente sua forma de pensar a questão: “a rotação em torno da ligação dupla poderia ocorrer desde que fosse cedida energia a molécula, no entanto, na prática ocorreria que essa energia deveria ser muito alta o que acabaria por romper essa molécula impedindo a conversão *cis* em *trans* e o oposto também”.

Nesse sentido, verificamos que o estudante modifica sua forma de pensar, pois nos resultados do pré-teste este estudante indicou que concebia que a forma *cis* e *trans* eram diferentes e que não poderia haver a transformação entre uma e outra. Após utilizar a simulação computacional de modelagem, este mesmo estudante passa a perceber que é possível essa conversão, pois ele começa a imaginar uma mesma molécula girando no espaço e se convertendo da forma *cis* em *trans*. Além disso, o estudante demonstra compreender de forma implícita o conceito de barreira de potencial, na medida em que afirma que a conversão é possível, “desde que fosse cedida energia à molécula”, e que esta energia, por ser muito alta, acabaria por romper a ligação. Assim, o estudante também está reestruturando seus conceitos prévios em torno do conceito mais generalizador e integralizador de energia, revelando uma forma de aprendizado que parece se encaixar perfeitamente na proposta de reforma curricular de Cooper & Klymkovsky (2013), discutida previamente.

Em nossa opinião, essa aprendizagem, que consideramos significativa para o estudante, foi proporcionada pela manipulação do *software* de modelagem molecular, aliada à sua habilidade visuoespacial. Esta aprendizagem está evidenciada no momento em que o estudante revela a importância do uso da simulação computacional de modelagem molecular, quando afirma que não apenas visualiza a molécula em 3D com mais detalhes – o que pode ser conseguido com um bom *software* de visualização molecular (Raupp, Serrano, Moreira; 2009) – mas também o gráfico da energia por ângulo de rotação, obtido por meio de modelagem molecular e também ambos ao mesmo tempo, e de forma integrada:

Eu acredito que a simulação ajudou bastante porque tu consegues visualizar... ao mesmo tempo que **tu estás vendo um gráfico da energia, tu consegues visualizar ela... como é que ela está em 3D e ver ela nos diversos ângulos**. Coisa que, as vezes, tu até consegues imaginar... assim, **tu consegues girar ela, tu podes ver realmente o que está acontecendo** (...) mais por causa de eu conseguir fazer a comparação... conseguir ver ela no gráfico e ver ela em 3D ao mesmo tempo. Sabe, a intercomunicação entre as diversas coisas da estereoisomeria, os diversos assuntos dela. (grifo nosso). (Estudante “C”).

Analisando as palavras do próprio estudante, ao observar o gráfico de energia e as estruturas tridimensionais da molécula ao mudar de conformação, aparentemente o estudante percebe a integração entre conceitos químicos em torno do conceito integralizador de energia.

Ramos e Serrano (2013), trazem à tona o debate sobre a modelagem molecular no ensino de ciências, em extensa revisão de literatura. Em suas conclusões, os autores identificam que o uso de representações computacionais propicia internalização de conceitos e, com isso, a evolução conceitual dos estudantes. Com relação à modelagem molecular, fica evidenciado que pode se caracterizar numa poderosa ferramenta didática para melhorar o “*pensamento crítico e analítico dos estudantes*”. Por fim, os autores deixam um questionamento no ar: “*Mas o que mais a modelagem molecular propriamente dita pode trazer ao ensino de química*”? Acreditamos que os diversos efeitos benéficos do uso de modelagem molecular na Educação Química ainda sequer foram identificados e quanto mais estudados dentro do Ensino de Ciências.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Com os resultados obtidos, verificamos que a visualização é condição inicial para propiciar os estudantes a possibilidade de pensar na modelagem molecular. Os estudantes que já possuíam habilidades de visualização molecular, é que puderam ter a integralização reconciliadora (dentro de uma perspectiva Ausubeliana), proporcionada pela modelagem molecular. Os estudantes que não possuíam habilidades de visualização molecular já desenvolvida a contento, apresentaram uma melhora nestas atividades, mas não apresentaram ganhos como os supra descritos. Isso nos leva a concordar com Jones, Jordan & Stillings (2005), quando afirmam que a visualização é condição necessária à modelagem molecular, como uma atividade com profundos ganhos didáticos.

O resultado mais importante, contudo, que podemos apresentar é o início da resposta à pergunta que foi deixada como desafio para os pesquisadores de ensino de ciências (RAMOS; SERRANO, 2013). A modelagem molecular pode ser a ferramenta didática que propicia aos estudantes a aprendizagem significativa combinatória ausubeliana, pois aparentemente o significado dos conhecimentos envolvidos na modelagem molecular surgem da “*interação com a estrutura cognitiva como um todo*” (MOREIRA et al., 1997). Melhor explicado: durante o pré-teste, o caso considerava que, por razões energéticas, a estrutura *cis* de uma determinada espécie não poderia ser convertida em uma estrutura *trans*, porque resultaria em uma quebra de ligações. Esta informação é precisamente o que usualmente é ensinado em sala de aula e foi corretamente assimilado pelo estudante. Também ressaltamos que, dentro de uma perspectiva química, estas estruturas, de fato, não são conversíveis (dentro da energia livre disponível no meio ambiente). Após a atividade de modelagem molecular, o estudante afirma que as estruturas “em princípio são conversíveis, porém, a quantidade de energia necessária para tal conversão iria quebrar a molécula”. Esta segunda afirmação também é verdadeira. Contudo, utiliza o conceito de energia de uma forma integralizadora, e o conhecimento novo não é nem subsumido pelo subsunçor, nem superordena o subsunçor, mas fornece novos significados de uma forma mais abrangente e integralizadora dentro do *framework* de energia, um exemplo que consideramos indicativo de uma aprendizagem significativa do tipo combinatória.

REFERÊNCIAS

- AKSELA, M.; LUNDELL, J. Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 9, n. 4, p. 301, 2008. Disponível em: <<http://xlink.rsc.org/?DOI=b818464j>>. Acesso em: 16/8/2011.
- APPELT, H. R.; OLIVEIRA, J. S.; MARTINS, M. M. Modelos Moleculares: passado e presente. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 4, n. 3, p. 7–16, 2009.
- ARAUJO, I. S.; VEIT, E. A.; MOREIRA, M. A. Modelos Computacionais no Ensino-aprendizagem de Física: um referencial de trabalho. **Istigações em Ensino de Ciências**, v. 17, n. 2, p. 341–366, 2012.
- AUSUBEL, D. P. **Educational Psychology - a cognitive view**. New York, 1968.
- AUSUBEL, D. P. **The aquisition and Retention of Knowledge: a cognitive view**. Dordrecht, 2000.
- AUSUBEL, D. P.; NOVAK, J. D.; HANESIAN, H. **Educational Psychology: a cognitive veiw**. 2^a Ed. ed. New York, 1978.
- BARNEA, N.; DORI, Y. J. Computerized molecular modeling-the new technology for enhancing model perception among chemistry educators and learners. **Chemistry Education Research and**

Practice, v. 1, n. 1, p. 109–120, 2000. Disponível em:

<http://www.uoi.gr/cerp/2000_January/pdf/16barneaf.pdf>. Acesso em: 1/10/2012.

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

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

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

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

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

FREITAS, L. Prêmio Nobel de Química 1998: Walter Kohn a John Pople. **Química Nova**, v. 22, n. 2, p. 293–298, 1999.

HYPERCUBE, I. Hyperchem. ,2007. Gainesville, FL.

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

JONES, L.; JORDAN, K.; STILLINGS, N. A. Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 6, n. 3, p. 136–149, 2005. Disponível em: <<http://xlink.rsc.org/?doi=b5rp90005k>>. Acesso em: 16/3/2012.

KABERMAN, Z.; DORI, Y. J. Question posing, inquiry, and modeling skills of chemistry students in the case-based computerized laboratory environment. **International Journal of Science and Mathematics**, v. 7, n. 3, p. 597–625, 2007. Springer. Disponível em: <<http://www.springerlink.com/index/78803714871R16N4.pdf>>. Acesso em: 16/3/2012.

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

MOREIRA, M. A.; CABALLERO, M. C.; RODRIGUES, M. L. Aprendizagem Significativa: um conceito subjacente. Actas del Encuentro Internacional sobre el Aprendizaje Significativo. Burgos, España. **Anais...** p.19–44, 1997.

RAMOS, A. DE F.; SERRANO, A. Modelagem Molecular no Ensino de Ciências : Uma revisão da literatura no Período 2001-2011 acerca da sua aplicabilidade em atividades de ensino. **Acta Scientiae**, v. 15, n. 2, p. 348–367, 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**, v. 4, n. 1, p. 65–78, 2009.

- RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C.; SOUZA, B. C. DE. Uso de um software de construção de modelos moleculares no ensino de isomeria geométrica : um estudo de caso baseado na teoria de mediação cognitiva. **Enseñanza de las Ciencias**, v. 9, n. 1, p. 18–34, 2010.
- REBELLO, A. P.; RAMOS, M. G. Simulação Computacional e Maquetes na Aprendizagem de Circuitos Elétricos: um olhar sobre a sala de aula. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 4, n. 1, p. 23–33, 2009.
- RODRIGUES, C. R. Modelagem Molecular. **Química Nova - Cadernos Temáticos**, , n. N° 3, maio, 2001.
- RODRIGUES, R. F. O Uso de Modelagens Representativas como Estratégia Didática no Ensino da Genética: um estudo de caso. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 7, n. 2, p. 53–66, 2012.
- ROGADO, J. A Grandeza Quantidade de Matéria e sua Unidade, o Mol: algumas considerações sobre dificuldades de ensino e aprendizagem. **Ciência & Educação**, v. 10, n. 1, p. 63–73, 2004.
- SCHALLER, C. P.; GRAHAM, K. J.; JOHNSON, B. J.; et al. Developing and Implementing a Reorganized Undergraduate Chemistry Curriculum Based on the Foundational Chemistry Topics of Structure, Reactivity, and Quantitation. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 3, p. 321–328, 2014. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed400336d>>. .
- SILVA, S. M. DA; EICHLER, M. L.; PINO, J. C. DEL. As Percepções dos Professores de Química Geral sobre a Seleção e a Organização Conceitual em sua Disciplina. **Química Nova**, v. Vol. 26, n. n° 4, p. pg. 585–594, 2003.
- WAVEFUNCTION, I. Spartan. ,2014. Irvine, CA.
- WOLFF, J. F. S.; ANDRADE NETO, A. S. O Significado da Modelagem utilizada no Ensino de Física e Química conforme lido a partir de Referências da Educação Matemática. VIII ENPEC - I CIEC. **Anais...** p.v.1, p. 1–12, 2011. Campinas.
- WU, H.-K.; KRAJCIK, J. S.; SOLOWAY, E. Promoting understanding of chemical representations: students' use of a visualization tool in the classroom. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 38, n. 7, p. 821–842, 2001. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1002/tea.1033>>. .