

Artigo

Modelagem Molecular como Ferramenta Motivadora no Ensino-Aprendizagem em Mecanismos de Reações de Diels-Alder

Ramos, C. M.; Ramos, L. A.; Lobato, C. C.; Hage Melim, L. I. S e Santos, C. B. R.*

Rev. Virtual Quim., 2016, 8 (6), 2026-2041. Data de publicação na Web: 26 de dezembro de 2016

<http://rvq.sbq.org.br>

Molecular Modeling as Motivating Tool in Teaching and Learning in Mechanisms of Diels-Alder Reactions

Abstract: The study had as objective show the potentialities of modeling molecular as a didactic and pedagogical tool motivating in the process teaching and learning in the elucidation of mechanisms of organic reactions of Diels-Alder. The performed field research with academics from two different classes of Chemistry demonstrated that none possess in their curricular matrix, disciplines associated to computational chemistry and molecular modeling, and only 20% of undergraduate students knew describe its purpose and half never had contact with the softwares studied. Posteriorly, it was observed that 75% of the students have had their perspectives catered in relation to molecular modeling, being categorical (100%) in stating that the same can be a viable and valid motivating tool. The dynamism of the teaching-learning process makes the passing years, some aspects and didactic resources should be replaced, demanding constant perfectioning, the search for new and change in old paradigms for that if may arise innovative teachers practices.

Keywords: Molecular modeling; Motivation; Teaching and learning; Diels-Alder reaction.

Resumo

O estudo teve como objetivo mostrar as potencialidades da modelagem molecular como ferramenta didático-pedagógica motivadora no processo de ensino e aprendizagem na elucidação dos mecanismos de reações orgânicas de Diels-Alder. A pesquisa de campo realizada com acadêmicos de duas turmas distintas de Química demonstrou que nenhuma possui em sua matriz curricular, disciplinas obrigatórias associadas à química computacional e modelagem molecular, e apenas 20% dos graduandos souberam descrever sua finalidade e metade nunca tiveram contato com os softwares estudados. Posteriormente, foi observado que 75% dos estudantes tiveram suas perspectivas atendidas em relação à modelagem molecular, sendo categóricos (100%) em afirmar que a mesma pode ser uma ferramenta motivadora no processo de ensino-aprendizagem viável. O dinamismo do processo de ensino-aprendizagem faz com que o passar dos anos, alguns aspectos e recursos didáticos devem ser substituídos, exigindo aperfeiçoamento constante, a busca de novos e a mudança de velhos paradigmas para que se possa surgir práticas docentes inovadoras.

Palavras-chave: Modelagem molecular; Motivação; Ensino-aprendizagem; Reação Diels-Alder.

* Universidade Federal do Amapá, Laboratório de Modelagem e Química Computacional, Departamento de Ciências Biológicas e da Saúde, Campus Marco Zero, CEP 68902-280, Macapá-AP, Brasil.

✉ breno.unifap@gmail.com

DOI: [10.21577/1984-6835.20160136](https://doi.org/10.21577/1984-6835.20160136)

Modelagem Molecular como Ferramenta Motivadora no Ensino-Aprendizagem em Mecanismos de Reações de Diels-Alder

Cristiano M. Ramos, Leonardo de A. Ramos, Cleison C. Carvalho, Lorane Izabel da S. Hage Melim, Cleydson Breno R. dos Santos*

Universidade Federal do Amapá, Laboratório de Modelagem e Química Computacional, Departamento de Ciências Biológicas e da Saúde, Campus Marco Zero, CEP 68902-280, Macapá-AP, Brasil.

* breno.unifap@gmail.com

Recebido em 15 de junho de 2016. Aceito para publicação em 26 de dezembro de 2016

1. Introdução

2. Materiais e Métodos

- 2.1. Local da pesquisa e Público alvo
- 2.2. Construção dos questionários
- 2.3. Etapas metodológicas
- 2.4. Programas computacionais de química utilizados na intervenção
- 2.5. Coleta e análise dos dados
- 2.6. Material de apoio pedagógico
- 2.7. Modelagem molecular dos compostos estudados

3. Resultados e Discussão

- 3.1. Concepções dos acadêmicos em relação à modelagem molecular com base no questionário pré-intervenção
- 3.2. Verificação das potencialidades da modelagem molecular no processo de ensino aprendizagem e do nível de satisfação dos acadêmicos com base no questionário pós-intervenção

4. Conclusões

1. Introdução

No processo de ensino-aprendizagem de química não é difícil identificar o desânimo de muitos acadêmicos/alunos que não percebem a finalidade da maioria dos

assuntos ensinados nas aulas de química, porque não há uma diversidade, uma dinâmica na maneira de se ensinar, conseqüentemente não haverá interesse em se aprender. A desmotivação interfere negativamente no processo de ensino-aprendizagem, e entre as causas da falta de

motivação, o planejamento e o desenvolvimento das aulas realizadas pelo professor são fatores determinantes. O professor deve fundamentar seu trabalho conforme as necessidades de seus alunos, considerando sempre o momento emocional e as ansiedades que permeiam a vida do aluno naquele momento.¹

De acordo com Salta e Koulougliotis,² a motivação é um estado interno e esta interage estreitamente com a cognição, ao se manifestar, produz efeitos sobre o comportamento, influenciando a aprendizagem. No que tange o ensino de química, a motivação pode ser um fator preponderante na aquisição do conhecimento químico, porém, para que a faça despertar no ensino de química, quatro fatores relevantes podem influenciar positivamente a mudança de comportamento dos estudantes: abordagens de ensino, ferramentas didáticas, materiais educativos não formais e atividades.

Segundo Novak,³ toda aprendizagem está diretamente ligada ao modo de pensar, sentir e agir das pessoas, envolvendo em maior ou menor grau essas três ações. Na aprendizagem habitual, baseada na memorização, percebe-se muito pouco o envolvimento emocional que não seja as recordações de informações anteriormente apresentadas e a motivação extrínseca que vem com obtenção da resposta certa. Este tipo de aprendizagem, faz com que o aluno tenha pouco ou nenhum esforço para integrar novos conceitos e proposições com conceitos e proposições relevantes já conhecidas, enquanto, na aprendizagem significativa, o estudante procura integrar novos conhecimentos com conhecimentos relevantes anteriormente preestabelecidos, para facilitar sua compreensão, neste tipo de aprendizagem, ocorre uma maior participação do estudante dentro processo de aprendizagem, devido a importância que dão ao conhecimento, pois desfrutam de sentimentos de escolha e liberdade pessoal, motivação intrínseca, tornando a ciência mais interessante e agradável. Na Europa, novas ferramentas e procedimentos são testados e

introduzidos, incluindo mecanismos de motivação para promover a excelência no ensino.⁴

No caso da Química, um dos obstáculos enfrentados pelos discentes para um aprendizado mais eficaz está na dificuldade em transitar nos diferentes níveis de representação desta Ciência, o que é base e essencial para seu desenvolvimento e compreensão.⁵ Dificuldades essas, também constatada por Souza *et al.*⁶ que em seu estudo apontam a necessidade de abstração de conceitos químicos pelos estudantes ingressos no curso de Química, sendo a formação básica uma das principais causas.

Considerando essas dificuldades, muitas pesquisas voltadas ao ensino de química têm como propósito comum, ajudar os alunos a desenvolver uma compreensão dos conceitos e representações químicas, a níveis macroscópico, microscópico e simbólico. No nível macroscópico, os processos químicos são observáveis. No nível microscópico, os fenômenos químicos são explicados em termos de arranjo e movimento de moléculas, átomos ou partículas subatômicas. Quanto ao nível simbólico, é representado por símbolos, números, fórmulas, equações e estruturas. Dentre diversas abordagens pedagógicas sugeridas pelos pesquisadores para facilitar o entendimento da química nos três níveis, destacam-se as que usam modelos e tecnologias concretas como ferramentas de aprendizagem bastante promissoras, pois permitem a visualização de animações dinâmicas e tridimensionais, proporcionando aos alunos a aprenderem a usar representações simbólicas microscópicas e para descrever e explicar um processo químico. Através de programas computacionais, é possível obter diversos tipos de representações, bem como visualizar a interação das moléculas e compreender os conceitos químicos relacionados.⁷ Portanto, a manipulação de modelos físicos permite que educadores e alunos consigam desenvolver a compreensão conceitual dos temas abordados, não mais fazendo uso apenas mecânico dos conceitos químicos.⁸

O progresso computacional vem propiciando o desenvolvimento de programas modernos capazes de formular imagens em três dimensões (3D) e projetá-las em duas dimensões, facilitando a visualização dos arranjos atômicos, os cálculos das propriedades químicas, assim como a representação e interpretação de diversos fenômenos químicos. A química busca através da ciência da computação permitir ferramentas voltadas tanto para a pesquisa como o ensino que facilitem a compreensão de teorias a partir de modelos científicos sobre um mundo inacessível a percepção humana.⁹

Estudos têm relatado o impacto do uso de modelos bidimensionais, virtuais e tridimensionais como instrumento para o ensino da estrutura molecular dos compostos orgânicos. Os resultados dessas pesquisas mostram que abordagens utilizando uma mistura dos três tipos são muito eficazes.^{10,11}

A melhor forma de se tornar algo inacessível em uma ferramenta didático-pedagógica que facilite a assimilação de conceitos, por parte dos discentes, é tentar sistematizar os métodos de ensino, ou seja, fazer um aparato de técnicas para que os conteúdos sejam destrinchados e escalonados, procurando sempre uma melhor aceitação dos conhecimentos advindos dos docentes, embora esta não seja uma tarefa simples. Assim, os avanços nos programas de Modelagem Molecular têm transformado e possibilitado de maneira significativa uma maior compreensão no ensino-aprendizagem da química.¹² A maioria dos programas voltados para modelagem molecular são capazes de realizar as seguintes funções: desenhar, visualizar em 3D, manipular, nomear diversas moléculas, além de realizar cálculos de otimização geométrica e estudos de análise conformacional.^{13,14}

Resultados obtidos por Ramos *et al.*¹⁵ evidenciaram também as potencialidades da modelagem molecular no processo de ensino-aprendizagem, uma vez que foram bem aceitas pelos acadêmicos, sendo um

notável aliado na compreensão da química orgânica. É importante salientar que a ferramenta em questão é apenas um componente que tende a acrescentar dentro das abordagens pedagógicas, o professor na mediação do conhecimento científico e sintonia com a ferramenta pode propiciar um aprendizado mais amplo e significativo dos conteúdos quando comparado com aqueles adquiridos por livros ou através da aula expositiva tradicional

Em Química há uma preocupação muito grande com o processo de ensino-aprendizagem dos mecanismos de reações. De certa maneira, os acadêmicos ainda recorrem muito ao método imaginário, aquele ligado a “intuição química”. O ensino dos mecanismos de reações em disciplinas de Química Orgânica para os alunos dos cursos de graduação e pós-graduação em Química e áreas afins, ainda representa um desafio. Os mecanismos desenhados em 2D são simples de se compreender, mas as ideias dos alunos sobre reações orgânicas em 3D estão ainda muito relacionadas à um conhecimento compartimentalizado. O entendimento de uma reação química envolve conceitos microscópicos (em nível molecular) e macroscópicos (coleção de muitas moléculas) dos sistemas químicos investigados (reagentes, estados de transição e produtos) e o que se espera é que o aluno consiga correlacionar estes vários conceitos. Dentre os principais fatores macroscópicos que influenciam o mecanismo das reações temos dois: a variação da energia livre do sistema que atua no controle termodinâmico da reação e a velocidade de conversão de reagentes em produtos (relacionada ao controle cinético). A nível molecular, é possível fazer uma abordagem enfocando conceitos fundamentais, como comprimentos de ligações, ângulo de torção, análise conformacional, superfícies de energia potencial, estruturas de mínimo e máximo de energia, estrutura do estado de transição e modos vibracionais relacionados à quebra e formação de ligações. A correlação destes conceitos induz a uma aprendizagem química na sua integralidade, em vez de uma

compreensão fragmentada do conhecimento.¹²

A reação de Diels-Alder é assim denominada, em homenagem aos dois químicos alemães, Otto Paul Hermann Diels e Kurt Alder, que em 1928, desenvolveram uma reação de cicloadição 1,4 de dienos que desde então tem levado seus nomes. É também chamada por alguns cientistas de Síntese do dieno. Provou-se que a reação é de uma versatilidade e utilidade sintética tão grande que Diels e Alder foram premiados com o prêmio Nobel de química de 1950.¹⁶

Devido à facilidade com que ligações C-C e anéis de seis membros podem ser formados, a reação de Diels-Alder é muito usada mesmo tendo sido descoberta no início do século, elas continuam sendo extensivamente estudadas até hoje.¹⁷

Em termos gerais, a reação de Diels-Alder é dita uma reação pericíclica de cicloadição [4+2] entre um dieno conjugado (um sistema com quatro elétrons π) e um segundo componente alceno (um sistema com dois elétrons π), chamado de dienófilo. O produto de uma reação de Diels-Alder é frequentemente chamado aduto. Na reação de Diels-Alder, são formadas duas novas ligações σ à custa de duas ligações π do dieno e do dienófilo. O aduto contém um novo anel de seis membros com uma ligação dupla. Uma vez que as ligações são geralmente mais fortes do que as ligações π , a formação do aduto é normalmente favorecida em termos de energia, mas a maioria das reações de Diels-Alder é reversível.^{16, 18}

O exemplo mais simples de uma reação de Diels-Alder é aquela que ocorre entre o 1,3-butadieno e o eteno. No entanto, essa reação ocorre muito mais lentamente do que a reação do butadieno com o anidrido maléico e também deve ser realizada sob pressão, uma determinada temperatura para que seus rendimentos sejam satisfatórios em nível sintético e industrial, uma vez que a reação é muito disseminada pelos químicos sintéticos teóricos inseridos em grandes indústrias e polos universitários espalhados por todo o mundo.¹⁶

Na perspectiva de buscar melhoras na qualidade do ensino de química orgânica, assim como nos mecanismos de reações orgânicas e torná-la mais compreendida e significativa. O trabalho direcionou-se aos acadêmicos de duas turmas distintas do curso de Licenciatura Plena em Química da Universidade do Estado do Amapá (UEAP), respectivamente denominadas de “Turma A”, composta por alunos do quarto semestre e “Turma B” oitavo semestre, para identificar quais suas concepções e o nível de compreensão acerca do uso e das aplicações da modelagem molecular como ferramenta didático-pedagógica motivadora no processo de ensino-aprendizagem na elucidação dos mecanismos de reação de Diels-Alder.

2. Materiais e Métodos

2.1. Local da pesquisa e Público alvo

A pesquisa foi realizada na Universidade Federal do Amapá (UNIFAP) localizada no município de Macapá-AP, Brasil. Em que 20 acadêmicos do curso de Licenciatura Plena em Química da Universidade do Estado do Amapá (UEAP) foram selecionados aleatoriamente, sendo 10 da turma A e 10 da turma B.

2.2. Construção dos questionários

O estudo possui características voltadas para a pesquisa de campo, com coleta de dados no meio acadêmico e pesquisa experimental, onde procura-se verificar os efeitos decorrentes da aplicação de uma variável independente sobre um ou mais grupos de sujeitos, analisar estatisticamente as diferenças entre dois testes procurando controlar outras variáveis que poderiam influir nos resultados.¹⁹

A pesquisa de cunho qualitativo com característica quantitativa, aborda os dados obtidos por meio de dois questionários

distintos (um pré e outro pós-intervenção) constituídos por perguntas abertas e fechadas, ver Quadro 1.

O primeiro objetivo é a verificação das concepções dos acadêmicos das turmas A e B em relação à modelagem molecular e suas aplicações, especificamente, se os acadêmicos participantes da pesquisa adquiriram conhecimentos químicos a partir da disciplina que trabalha informática,

verificar se os acadêmicos absorveram alguma informação da disciplina existente em sua matriz curricular a respeito de programas de modelagem molecular, verificar o conhecimento que tinham sobre a modelagem molecular e se os acadêmicos já tinham contato com alguns programas de modelagem molecular, como por exemplo, os programas ChemSketch ou HyperChem.

Quadro 1. Questões que nortearam a coleta de dados

Questionário pré-intervenção	Questionário pós-intervenção
1- A disciplina Introdução à Informática presente em sua matriz curricular está adaptada ao curso de Química?	1- Os programas de modelagem molecular utilizados são difíceis de trabalhar?
2- A disciplina que envolve informática abordou ou fez uso de programas voltados para química?	2- Você acredita que a modelagem molecular pode ser uma ferramenta motivadora no processo de ensino-aprendizagem dos mecanismos de reações Diels-Alder?
3- O que você acha que trabalha a modelagem molecular?	3- As reações de Diels-Alder são também conhecidas como?
4- Você já ouviu falar ou teve contato com os programas ChemSketch ou HyperChem?	4- O que são orbitais HOMO e LUMO? Qual o conceito de GAP?

No segundo momento, buscou verificar se a intervenção atendeu as perspectivas dos acadêmicos, de forma geral, se os mesmos compreenderam o conceito de modelagem molecular e suas aplicações e que se trata de

uma ferramenta didática aceitável, se os acadêmicos, após a intervenção, adquiriram competências e habilidades para utilizar os programas de modelagem molecular como instrumento de ensino-pesquisa-extensão,

além de verificar se os acadêmicos conseguiram explorar as potencialidades dos programas de modelagem na compreensão dos mecanismos de reações de Diels-Alder.

2.3. Etapas metodológicas

Este trabalho foi desenvolvido em três etapas metodológicas:

Na primeira, aplicou-se o questionário pré-intervenção avaliando o conhecimento de ambas as turmas “A” e “B” sobre modelagem molecular e como a computação está inserida no curso de licenciatura em Química da UEAP.

Na segunda etapa, realizou-se a aula expositiva às turmas “A e B” do curso de Química, abordando as origens, os conceitos e aplicações da Química Computacional e da modelagem molecular, assim como, os conceitos da reação de Diels-Alder, verificando a energia de seus dienos, dos dienófilo e dos seus produtos, cujos nomes são chamados sinteticamente de adutos. Foram estudadas três reações que envolviam a síntese do dieno. A primeira foi a que o dieno (2,3-dimetilbuta-1,3-dieno) reage com o dienófilo (pro-2-enal), originando o aduto (3,4-dimetilcicloex-3-ene-1-carbaldeído) com rendimento de 100%, a segunda reação o dieno (1,3-butadieno) reage com o dienófilo cis-2-butenodioato de dimetila (maleato de dimetila) originando o aduto (cis-4-ciclohexeno-1,2-dicarboxilato de dimetila, com um rendimento de 68%) e por último a reação entre um dieno (1,3-butadieno) que reage com um dienófilo (trans-2-butenodioato de dimetila (fumarato de dimetila) originando um aduto com 95% de rendimento chamado: trans-4-ciclohexeno-1,2-dicarboxilato de dimetila.

Na terceira etapa, foi ministrado um minicurso de modelagem molecular juntamente com as duas turmas, em que as quatro reações estudadas, foram desenhadas com o programa ChemSketch e com o Hyperchem. O primeiro foi usado para desenhar as moléculas em 2D e o segundo foi

usado para desenhar as moléculas em 3D e calcular seus respectivos descritores moleculares.

Após o minicurso aplicou-se o questionário pós-intervenção às duas turmas para avaliação das potencialidades da modelagem molecular no processo de ensino aprendizagem e do nível de satisfação dos acadêmicos.

2.4. Programas computacionais de química utilizados na intervenção

Os programas computacionais de química ChemSketch (<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>), versão gratuita e Hyperchem (<http://www.hyper.com/>), versão demo foram usados na intervenção como ferramentas didáticas motivadora no processo de ensino-aprendizagem dos mecanismos de reações de Diels-Alder.

O ChemSketch é um programa que apesar de ter um layout simples, é bastante avançado no desenho de estruturas químicas e aliado a isso, fornece propriedades moleculares, otimização e visualização em 2D, boa capacidade de nomear as moléculas, conforme a nomenclatura oficial da União Internacional de Química Pura e Aplicada.

O programa calcula automaticamente a valência de cada átomo e restringe a construção da molécula com base na regra do octeto, podendo não permitir esta função também. É possível solicitar a construção da forma espacial 3D da espécie estudada, o que aciona outra janela onde o estudante pode rotacionar tridimensionalmente a espécie estudada, além de observar estas espécies em diferentes visualizações com possibilidade de visualizar ligações e arranjo espacial das espécies de forma realçada em cada uma destas representações.²⁰

O Hyperchem é uma ferramenta de visualização e otimização 3D na área de modelagem molecular, construção de gráficos e projetos na área de pesquisa de fármacos, é uma ferramenta em 3D

especializada em estruturas de interesse para a medicina, indústria farmacêutica e química orgânica. O programa permite desenhar moléculas mais complexas. Este software é, também, uma alternativa na área de espectroscopia, que além da capacidade para a simulação a priori de espectros RMN através de métodos quânticos, contém uma base de dados com cerca de 10.000 moléculas, aplicável a macromoléculas assim como moléculas pequenas. O software também possui animações, além de cálculos de química quântica e mecânica molecular.²¹

2.5. Coleta e análise dos dados

A coleta de dados foi realizada em duas etapas distintas através da aplicação dos questionários pré-intervenção e pós-intervenção, ambos formados por perguntas abertas e fechadas para as duas turmas de Química (A e B). Os pesquisadores estavam presentes para inibir a interação entre os acadêmicos durante o levantamento. Durante a intervenção foram identificadas quais as concepções dos acadêmicos em relação a modelagem molecular e suas aplicações e, após a intervenção, avaliou-se suas potencialidades dentro do processo de ensino-aprendizagem, sendo abordadas discussões e opiniões sobre o assunto, e logo em seguida foi investigado o nível de satisfação dos acadêmicos.

2.6. Material de apoio pedagógico

Para os acadêmicos terem um embasamento pedagógico, foi lhes fornecido um material didático contendo as reações de Diels-Alder e um roteiro elaborado pelos pesquisadores sobre os programas, ver material suplementar. Neste tutorial consta como proceder desde o momento que se

inicia o programa, até o seu salvamento. Por meio de várias informações moleculares, os programas permitem contemplar o quão didáticos são, e como ocorre a aplicabilidade nos quesitos de estabilidade conformacional, cálculo de propriedades estéreo-eletrônicas, mapas de potencial eletrostático molecular, otimização, variações estruturais, localização de centros reativos e conseqüentemente entender como ocorrem o mecanismo de reação de Diels-Alder.

2.7. Modelagem molecular dos compostos estudado

As moléculas deste estudo foram desenhadas e visualizadas em 2D com auxílio do programa ChemSketch e salvas no formato sk2, e em seguida foram convertidas para o formato mol para serem visualizadas em 3D no HyperChem. Neste último, as moléculas foram submetidas aos cálculos de propriedades moleculares via o método semi-empírico PM3 (Parametric Method 3), que utiliza o mesmo formalismo mecânico-quântico que empregam conjuntos de base incluindo apenas os elétrons da camada de valência do sistema.²²

As principais propriedades moleculares calculadas neste trabalho foram: energia total, momento dipolar, comprimento de ligação e ângulos de torção, energia dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO) e o GAP cuja obtenção se dá pela diferença entre o orbital HOMO-LUMO, sendo este um indicador de estabilidade molecular e reatividade química,²³ bem como, a construção dos mapas de potencial eletrostático molecular dos reagentes e produtos para a reação de Diels-Alder.

As reações químicas, os orbitais de fronteiras e seus respectivos MEP's estão representados na Figura 1.

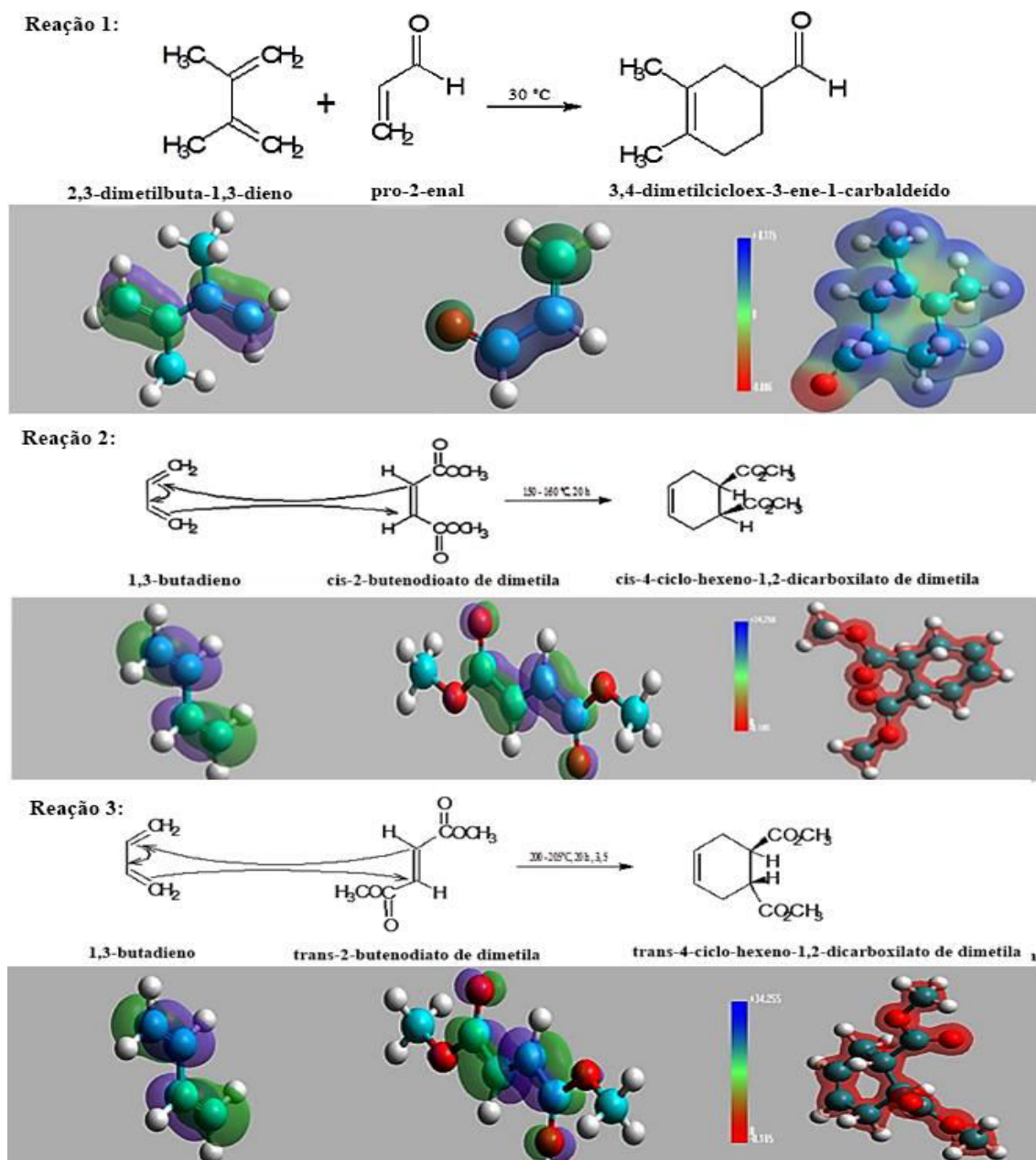


Figura 1. Reações 1, 2 e 3. Orbitais de fronteira (HOMO e LUMO) sendo o HOMO dos dienos (reagentes 1) e o LUMO dos dienófilos (reagentes 2), originando os adutos (produtos) todos sendo visualizados por seus mapas de potencial eletrostático molecular (MEP's)

Na Tabela 1 são mostradas as energias totais (Kcal/mol), a energia dos orbitais de fronteira HOMO (eV), LUMO (eV) e GAP (eV). Para a reação 1 estudada, entre dieno (2,3-dimetilbuta-1,3-dieno) reage com o dienófilo (pro-2-enal), originando o aduto (3,4-dimetilcicloex-3-ene-1-carbaldeído) de acordo com a literatura apresenta rendimento de 100%.²⁴ Sendo que esta reação obteve-se maior valor de GAP igual a -

10,0549742 eV, confirmando a maior estabilidade molecular e baixa reatividade química em relação ao produto. A reação 1 é mais estável em relação as reações 2 e 3, tendo uma variação de $\pm 0,7662922$ e $0,711218$ respectivamente. A diferença chega a $8,62 \times 10^{-5}$.

Os orbitais moleculares têm sido utilizados nos cálculos de diversos parâmetros de interesses químicos e

farmacológicos. A energia do HOMO está ligada fortemente ao caráter elétron-doador de um composto e a energia do LUMO mede a capacidade elétron-aceitador. Quanto maior a energia do HOMO, maior a capacidade elétron-doadora, quanto maior a energia do LUMO, menor será a resistência para aceitar elétrons. E não se pode deixar de considerar a importância do GAP, pois moléculas com baixo valor de gap, são reativas, e as com alto valor são bastante

estáveis e menos reativa.²⁵

Alguns conceitos da literatura, como por exemplo, postulados não se podem tomar como certeza, pois não tem experimentação de qualquer espécie física ou química ou laboratorial. Assim a química computacional, pode ser uma aliada e importante ferramenta na confrontação de algumas informações da literatura com a experimentação, assim tem-se mais credibilidade em uma dada informação do sistema a nível molecular.

Tabela 1. Valores das propriedades de estabilidade e reatividade química dos compostos estudados

Produto das Reações	Energia total (Kcal/mol)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	GAP	Rendimento (%)
1	-2664.2910	-9.28239	0.7725842	-10.0549742	100%
2	-2838.5120	-10.0620	0.7042922	-10.7662922	68%
3	-2838.5120	-10.0619	0.7042922	-10.7661922	95%

3. Resultados e Discussão

3.1. Concepções dos acadêmicos em relação a modelagem molecular com base no questionário pré-intervenção

A discussão apresentada a seguir objetiva a verificação das concepções dos acadêmicos das turmas (A e B) do curso de Licenciatura em Química da UEAP em relação a modelagem molecular e suas aplicações.

A questão 1 “A disciplina Introdução à Informática presente em sua matriz curricular está adaptada ao curso de Química?” buscou verificar se a disciplina de informática ofereceu recursos específicos aos acadêmicos participantes da pesquisa para o aprendizado em química.

Em relação a disciplina de informática existente na matriz curricular do curso de Química, verificou-se que todos os vinte (20) entrevistados, isto é, as duas turmas “A e B” foram unânimes (100%) em afirmar que a disciplina em questão “não” proporcionou meios que os ajudassem na aquisição do conhecimento químico, além das noções básicas de informática, que muitos já possuíam antes mesmo de entrar no curso, evidenciando assim um distanciamento, um tratamento compartimentalizado e a falta de interdisciplinaridade desta disciplina.

Nesse sentido, os Parâmetros Curriculares Nacionais do Ensino Médio enfatizam a utilização da interdisciplinaridade como estratégia de ensino, que é a capacidade de integrar os conhecimentos de várias disciplinas para solucionar um problema

concreto ou compreender um determinado fenômeno sob diferentes pontos de vista.²⁶

A questão 2 “A disciplina que envolve informática abordou ou fez uso de programas voltados para química?” buscou verificar se os acadêmicos absorveram alguma informação da disciplina Introdução à Informática existente em sua matriz curricular a respeito de programas de modelagem molecular.

A esse respeito, os acadêmicos sem exceção (100%), ainda não haviam tido nenhuma abordagem e tido contato com programas voltados para química na disciplina de informática no curso de Química da UEAP, demonstrando novamente a falta de estratégias de ensino dentro desta disciplina que viabilize sua integração com a química.

A informática tem se tornado um grande alicerce no desenvolvimento da Química, Biologia e Farmácia proporcionando equipamentos essenciais que facilitam a interpretação dos dados a partir de aparelhos utilizados nos laboratórios de pesquisa, permitindo a realização de cálculos avançados em diversas áreas da ciência Química, com destaque para Físico-Química, Química Analítica, Química Orgânica e Bioquímica.^{27, 28}

A questão 3 “O que você acha que trabalha a modelagem molecular?” busca verificar as concepções dos acadêmicos com relação a modelagem molecular e suas aplicações. O histograma da Figura 2 apresenta os dados da questão 3.

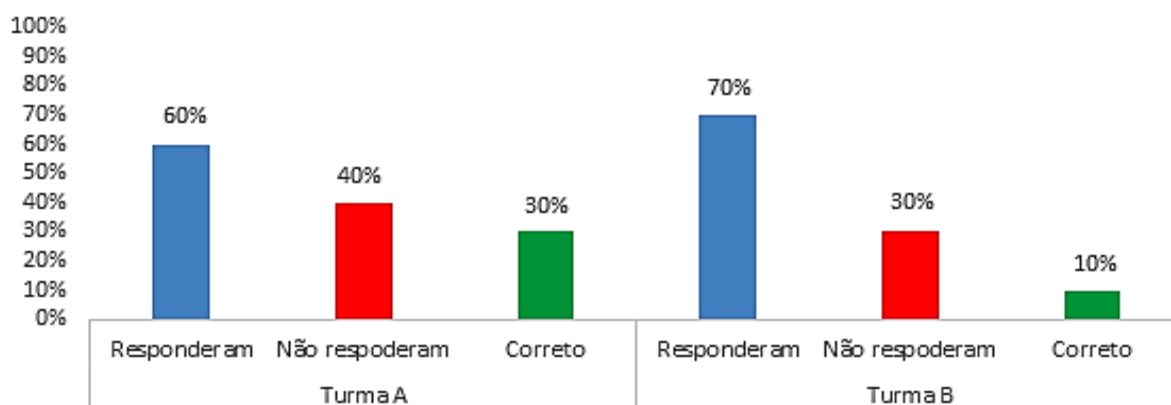


Figura 2. Histograma referente ao conceito dos acadêmicos sobre modelagem molecular e suas aplicações

A Figura 2 mostra que houve um baixo índice de respostas positivas, sendo que apenas três estudantes (30%) realmente souberam descrever a modelagem molecular, dos que julgavam saber no início (60%) na turma A. Enquanto, somente um estudante (10%) acertou do que se tratava o assunto, dos 70% que achavam que sabiam na turma B. Essa diferença pode estar relacionada nos dois anos de diferença de uma turma para outra. Enfim, os dados analisados mostram que a maioria dos acadêmicos não tinham

um conceito ideal formado em relação a modelagem molecular, 70% da turma A e 90% da turma B, isto significa dizer que 80% dos discentes desconheciam sobre o assunto modelagem molecular.

A modelagem molecular, resultado do desenvolvimento científico e tecnológico, surgiu da necessidade de representar os fenômenos físico-químicos e propriedades da matéria na sua mínima composição e com um alto grau de precisão, para isso, houve a junção de teorias físico-químicas com base

em átomos e moléculas, a ciência computacional, levando-os a criação de modelos capazes de reproduzir, controlar, estudar as reações químicas e suas interações e desenvolver novos materiais.²⁹ Trata-se de um ramo de pesquisa dentro da Física e da Química que utiliza como ferramenta o computador para construir e manipular os modelos. Através dos modelos pode-se representar resumidamente objetos e fenômenos físicos reais, para isso

empregam-se os estudos da química teórica e a computação gráfica, de modo a facilitar a visualização, manuseio, análise e informação de determinada molécula.²⁸

A questão 4 “Você já ouviu falar ou teve contato com os programas ChemSketch ou HyperChem?” buscou verificar se os acadêmicos já tinham tido contato com alguns programas de modelagem molecular. O histograma da Figura 3 apresenta os dados da questão 4.

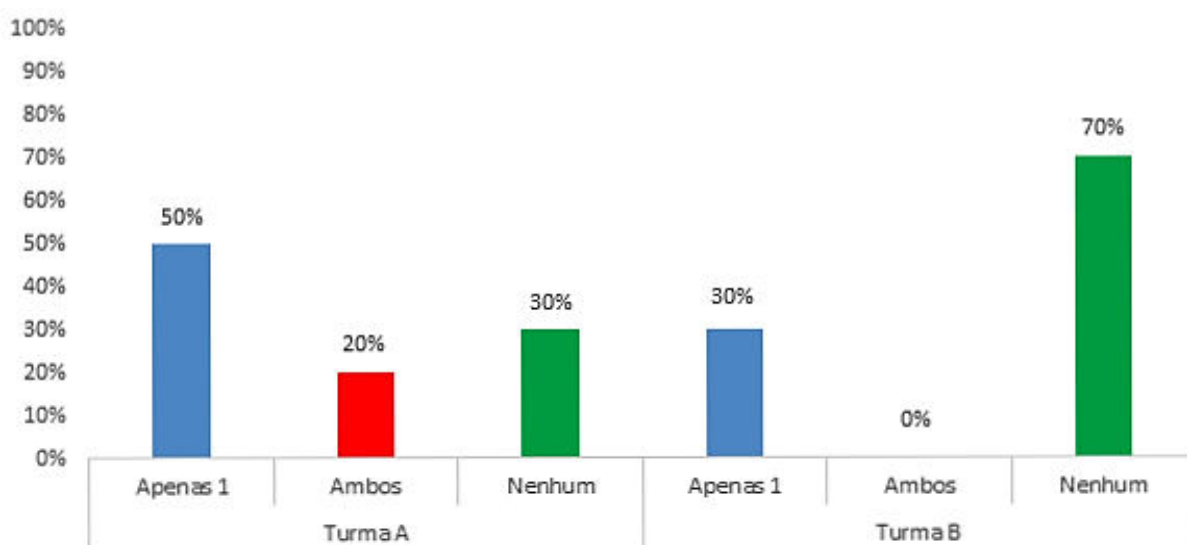


Figura 3. Histograma referente ao contato dos acadêmicos com os programas de modelagem molecular

De acordo com a Figura 3, evidencia-se que dez (50%) dos graduandos naquele momento durante o curso de Química ainda não haviam ouvido falar e nem tido contato com nenhum dos programas estudados posteriormente na terceira etapa da intervenção, sendo três (30%) da turma A e sete (70%) da turma B. A respeito dos acadêmicos que haviam ouvido falar ou mesmo tido contato com um ou com os dois programas mencionados, nota-se um percentual de 20% a mais para a turma A em relação a turma B, esses índices indicam que metade dos graduandos não possuíam conhecimentos sobre os programas, muito menos a prática.

3.2. Verificação das potencialidades da modelagem molecular no processo de ensino aprendizagem e do nível de satisfação dos acadêmicos com base no questionário pós-intervenção

A discussão apresentada a seguir objetiva a verificação das potencialidades da modelagem molecular no processo de ensino aprendizagem e do nível de satisfação dos acadêmicos das turmas A e B do curso de Licenciatura Plena em Química da UEAP.

A questão 1, “Os programas de modelagem molecular utilizados são difíceis de trabalhar?” busca verificar se a

intervenção atendeu as perspectivas dos acadêmicos participantes, de forma geral, se os mesmos compreenderam o conceito de modelagem molecular e suas aplicações e

que se trata de uma ferramenta didática aceitável. O histograma da Figura 4 apresenta os dados da questão 1.

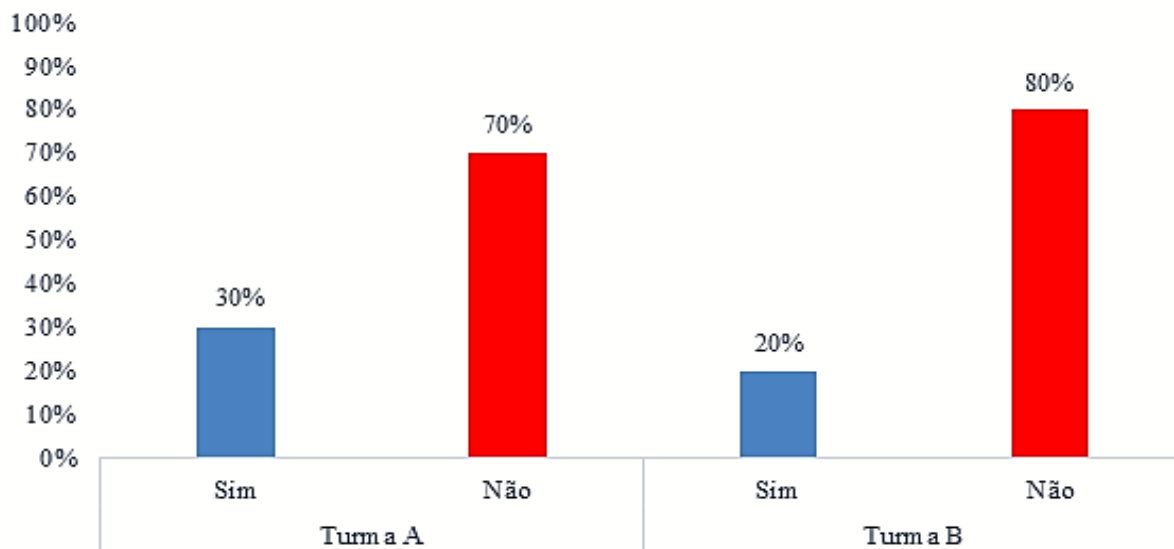


Figura 4. Histograma referente a perspectivas dos acadêmicos sobre a intervenção

Com base no histograma acima (Fig. 4), percebe-se que o esclarecimento teórico e a realização do minicurso foram fundamentais para novas concepções dos acadêmicos, pois ampliaram seus horizontes sobre a modelagem molecular e suas aplicações, onde quinze (75%) dos vinte discentes tiveram suas perspectivas atendidas completamente, sendo que destes, sete (70%) dos dez acadêmicos da turma A, foram categóricos em afirmar que “não” e oito (80%) dos dez acadêmicos da turma B também “não” acharam a modelagem molecular uma ferramenta difícil de se trabalhar, evidenciando assim a aceitação desta ferramenta pelos discentes.

A questão 2, “Você acredita que a modelagem molecular pode ser uma ferramenta motivadora na melhora do entendimento dos mecanismos de reações?” buscou verificar se os acadêmicos, após a intervenção, adquiriram competências na manipulação dos programas utilizados no minicurso.

A satisfação dos acadêmicos em relação ao curso de modelagem molecular foi averiguada e constatou-se que as duas turmas foram unânimes (100%) em afirmar que a modelagem molecular pode ser uma ferramenta motivadora viável e válida na melhora do entendimento dos mecanismos de reações orgânicas, além do conhecimento teórico assimilado, tiveram a prática através do minicurso de modelagem, nesta etapa, aprenderam a manusear os programas propostos e explorar suas potencialidades, sendo que estas, foram determinantes para mudanças de comportamentos diante do assunto abordado, ampliando seu campo de visão, oferecendo recursos antes imagináveis, desenvolvendo competências e habilidades dentro do processo de ensino/aprendizagem que facilitasse a compreensão dos mecanismos de reações orgânicas.

Fica bem claro que, quando se parte para a prática e se abandona ou deixa-se parcialmente de lado o legado do tradicionalismo, e busca-se uma inovação no ensino das moléculas estudadas, a realização

e a compreensão conceitual melhoram as concepções dos envolvidos, haja vista, que muitos assuntos, ainda não são muito bem absorvidos pelos acadêmicos durante sua vida universitária.

A questão 3 “As reações de Diels-Alder é também conhecida como?” buscou verificar se os acadêmicos conseguiram absorver pontos importantes da intervenção sobre a reação de Diels-Alder.

Nesta parte da intervenção constatou-se que os acadêmicos de ambas turmas participantes da pesquisa (100%) acertaram esta pergunta, nesta fase, os mesmos já haviam assimilado os conceitos da reação de Diels-Alder, estudado as três reações que envolviam a síntese do dieno, as energias de seus reagentes (dienos e dienófilos) e de seus produtos (adutos) e posteriormente, através do minicurso, as moléculas em 2D foram desenhadas e visualizadas com o auxílio do programa ChemSketch e convertidas para o formato do programa HyperChem, sendo que neste, as moléculas são visualizadas em 3D e foram realizados os cálculos de algumas propriedades como: energia total, momento dipolar, comprimento de ligação e ângulos de torção, energia dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), os mapas de potencial eletrostático molecular e o GAP.

A questão 4 “O que são HOMO e LUMO? Como se calcula e qual o conceito de GAP?” buscou verificar se os acadêmicos conseguiram compreender os mecanismos de reações de Diels-Alder.

Em relação a essa questão, verificou-se que todos os acadêmicos que participaram do curso (100%) se sobressaíram e conseguiram compreender os mecanismos da reação de Diels-Alder, demonstrando assim que os programas utilizados podem ser um aliado na confrontação de algumas informações da literatura com a experimentação, assim tem-se mais credibilidade em uma dada informação do sistema a nível molecular.

4. Conclusões

Analisando os dados obtidos no questionário pré-intervenção, percebe-se que nenhuma das turmas participantes da pesquisa (100%) tiveram no curso disciplinas associadas a química computacional, e apenas quatro (20%) dos vinte graduandos souberam descrever com o que a modelagem molecular trabalha e dez (50%) dos vinte graduandos nunca tiveram contato com os programas de modelagem molecular ChemSketch e HyperChem.

Averiguando os dados obtidos no questionário pós-intervenção, constata-se que 75% dos acadêmicos tiveram suas perspectivas atendidas em relação a modelagem molecular, posteriormente, os estudantes das duas turmas foram categóricos (100%) em afirmar que a modelagem molecular pode ser uma ferramenta motivadora viável e válida no entendimento dos mecanismos de reações. Em seguida, obteve-se um percentual de 100% de acertos das duas turmas em relação as reações de Diels-Alder, em que os mesmos puderam aliar a teoria com a prática. Por fim, registrou-se novamente o índice de 100% de acertos para ambas turmas, demonstrando assim que os programas utilizados podem ser uma importante ferramenta na confrontação de algumas informações da literatura com a experimentação, principalmente a nível molecular.

O ensino não é estático, isolado, limitado, estando sempre em constante transformação, exigindo sempre soluções que oportunize e desenvolva habilidades ao aluno de construir o conhecimento. Portanto, é imprescindível buscar alternativas que possibilite desenvolver práticas docentes inovadoras e eficientes, que possam tornar o ensino mais construtivo, como a utilização da química computacional, proporcionando a relação entre teoria e o computador como ferramenta, ressaltando o papel do professor como o facilitador no processo de ensino-aprendizagem.¹² Para isso, tanto o professor

da academia quanto do ensino básico, não podem se alienar ao tempo e suas transformações, precisam acompanhar as mudanças e inovações exigidas pela sociedade, de modo, a se qualificarem e adaptarem na sua metodologia de ensino.³⁰

Na tentativa de alcançar uma educação de qualidade, pesquisadores da área estão aderindo e disseminando em seus trabalhos a importância da utilização de recursos computacionais, para tornar o processo de ensino e aprendizagem mais eficaz, especificamente, os softwares de simulação. Com base em estudos realizados por Souza *et al.*³¹ e Oliveira *et al.*³² o computador e seu respectivo software de simulação desponta como recurso ou ferramenta didática a ser inserida no ensino de química por apresentarem tais características: animações, visualizações, simulações de fenômenos químicos, interpretação de dados qualitativos e quantitativos, características essas importantes na construção do conhecimento a partir de um determinado conteúdo, pois proporciona uma intensa interatividade entre o usuário e conhecimento a ser construída, a capacidade de investigação e podem promover novas percepções e concepções, objetivos esses almejados e alcançados no trabalho desenvolvido.

Referências Bibliográficas

- ¹ Moraes, C.R.; Varela, S. Motivação do aluno durante o processo de Ensino-Aprendizagem. *Revista Eletrônica de Educação* **2007**, 1. [[Link](#)]
- ² Salta, K.; Koulougliotis, D. Students' Motivation to Learn Chemistry: the greek case. In: International Conference "New Perspective In Science Education", 1., 2012, Florence. [[Link](#)]
- ³ Novak, J. D. A theory of education: meaningful learning underlies the constructive integration of thinking, feeling, and acting leading to empowerment for commitment and responsibility. *Aprendizagem Significativa em Revista/Meaningful Learning Review* **2011**, 1. [[Link](#)]
- ⁴ Maciejowska, I.; Frankowicz, M. *Academic teacher at the crossroads of innovation highways in Facilitating effective student learning through teacher research and innovation*; Zuljan, M. V.; Vogrinc, J., eds.; Ljubljana: Slovenia, 2010. [[Link](#)]
- ⁵ Farias, F. M. C.; Del-Vecchio, R. R.; Caldas, F. R. R.; Gouveia-Matos, J. A. M. Construção de um Modelo Molecular: Uma Abordagem Interdisciplinar Química-Matemática no Ensino Médio. *Revista Virtual de Química* **2015**, 7, 849. [[CrossRef](#)]
- ⁶ Souza, J. I. R.; Leite, Q. S. S.; Leite, B. S. Avaliação das dificuldades dos ingressos no curso de licenciatura em Química no sertão pernambucano. *Revista Docência no Ensino Superior* **2015**, 5, 135. [[Link](#)]
- ⁷ Wu, 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* **2001**, 38, 821. [[CrossRef](#)]
- ⁸ Lacerda Jr, V.; Oliveira, K. T.; Silva, R. C.; Constantino, M. G.; Silva, G. V. J. Reatividade em reações de Diels-Alder: uma prática computacional. *Química Nova* **2007**, 30, 727. [[CrossRef](#)]
- ⁹ Ferreira, C.; Arroio, A. Uso de modelagem molecular no estudo dos conceitos de nucleofilicidade e basicidade. *Química Nova* **2011**, 34, 661. [[CrossRef](#)]
- ¹⁰ Savek, V. F.; Vrtacnik, M.; Gilbert, J. K. Evaluating the educational value of molecular structure representations. *Visualization in Science Education*. Netherlands: Springer, 2007. [[CrossRef](#)]
- ¹¹ Abraham, M.; Varghese, V.; Tang, H. Using molecular representations to aid student understanding of stereochemical concepts. *Journal of Chemical Education* **2010**, 87, 1425. [[CrossRef](#)]
- ¹² Mariano, A.; M; Ventura, E.; Monte, S. A.; Braga, C. F.; Carvalho, A. B.; Araújo, R. C. M. U. O ensino de reações orgânicas usando química computacional: I. reações de adição eletrofílica a alquenos. *Química Nova* **2008**, 31, 1243. [[CrossRef](#)]
- ¹³ Rodrigues, C. R. Processos Modernos no Desenvolvimento de Fármacos: Modelagem Molecular. *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola* **2003**, 43. [[Link](#)]

- ¹⁴ Carvalho, I.; Pupo, M. T.; Borges, A. D. L.; Bernades, L. S. C. Introdução a modelagem molecular de fármacos no curso experimental de química farmacêutica. *Química Nova na Escola* **2003**, *26*, 428. [CrossRef]
- ¹⁵ Ramos, L. A.; Costa, J.; Chierrito, T.; Brasil, D.; Santos, C.; Hage-Melim, L. I. S. Molecular Modeling as a Didactic Tool in Organic Chemistry Teaching on Some Abuse Drugs Thematic. *British Journal of Education, Society & Behavioural Science* **2016**, *13*, 1. [CrossRef]
- ¹⁶ Solomons, G. T. W.; Fryhle, C. B.; *Química Orgânica*, 9a. ed., LTC: Rio de Janeiro, 2009.
- ¹⁷ Camilo, F. F.; Gruber, J. Reações de Diels-alder entre compostos carbonílicos α , β – insaturados e ciclopentadieno. *Química Nova* **1999**, *22*, 382. [CrossRef]
- ¹⁸ Brocksom, T.J.; Donatoni, M. C.; Uliana, M. P.; Vieira, Y. W. A reação de Diels-Alder no início do século vinte um. *Química Nova* **2010**, *33*, 2211. [CrossRef]
- ¹⁹ Martins Junior, J. *Como escrever Trabalho de Conclusão de Curso: instruções para planejar, montar, desenvolver, concluir, redigir e apresentar trabalhos*, 4a. ed., Vozes: Petrópolis, 2010.
- ²⁰ Sítio da Acclabs.com. Disponível em: <<http://www.acclabs.com/resources/freeware/chemsketch/>>. Acesso em: 10 junho 2015.
- ²¹ Sítio da Abbpol.com. Disponível em: <<http://www.abbpol.com/software/hypercube/ChemPlus.htm>>. Acesso em: 10 de jun. 2015.
- ²² Santos, C. B. R.; Lobato, C. C.; Braga, F. S.; Morais, S. S. S.; Santos, C. F.; Fernandes, C. P.; Brasil, D. S. B.; Hage-Melim, L. I. S.; Macêdo, W. J. C.; Carvalho, J. C. T. Application of Hartree-Fock Method for Modeling of Bioactive Molecules Using SAR and QSPR. *Computational Molecular Bioscience* **2014**, *4*, 1. [CrossRef]
- ²³ Santos, C. B. R.; Lobato, C. C.; Sousa, M. A. C.; Macedo, W. J. C.; Carvalho, J. C. T. Molecular Modeling: Origin, Fundamental Concepts and Applications Using Structure-Activity Relationship and Quantitative Structure-Activity Relationship. *Reviews in Theoretical Science* **2014**, *2*, 1. [CrossRef]
- ²⁴ Solomons, G. T. W.; Fryhle, C. B. *Química Orgânica*, 8a. ed., LTC: Rio de Janeiro, 2005.
- ²⁵ Lobato, C. C.; Silva, E. M.; Vieira, J. B.; Macêdo, W. J. C.; Costa, E. V. M.; Carvalho, J. C. T.; Santos, C. B. R.; *Resumos do 52a Congresso Brasileiro de Química, Recife, Brasil*, 2012. Disponível em: <<http://www.abq.org.br/cbq/2012/trabalhos/13/1657-9612.html>>. Acesso em: 6 de jun. 2015.
- ²⁶ Ministério da Educação. Parâmetros Nacionais do Ensino Médio. Parte I: Bases Legais. Secretaria de Educação Média e Tecnológica. Disponível em: <<http://portal.mec.gov.br/seb/arquivos/pdf/blegais.pdf>>. Acesso em: 24 outubro 2016.
- ²⁷ Pessoa, A. B.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade de Brasília, 2007. [Link]
- ²⁸ Silva, T. H. A. Modelagem molecular com o auxílio do computador. Disponível em: <http://www.iupac.org/publications/cd/medicinal_chemistry/www.iupac.org/publications/cd/medicinal_chemistry/>. Acesso em 24 junho 2015. [Link]
- ²⁹ Santos, H. F. O conceito da modelagem molecular. *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola* **2001**, *4*. [Link]
- ³⁰ Ferreira, C. A. L.; *Tese de Doutorado*, Universitat Autònoma de Barcelona, 2004. [Link]
- ³¹ Souza, M. P.; Merçon, F.; Santos, N.; Rapello, C. N.; Ayres, A. C. S. Titulando 2004: um software para o ensino de química. *Química Nova na Escola* **2005**, *22*, 35. [Link]
- ³² Oliveira, S. F.; Melo, N. F.; Silva, J. T.; Vasconcelos, E. A. Softwares de Simulação no Ensino de Atomística: experiências computacionais para evidenciar micromundos. *Química Nova na Escola* **2013**, *35*, 147. [Link]