

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



**SOFTWARE EDUCATIVO: UM INSTRUMENTO PARA EXPLORAR CONCEITOS
NAS REPRESENTAÇÕES SIMBÓLICAS NO ENSINO DA GEOMETRIA
MOLECULAR**

CLÁUDIO RICARDO DA SILVA CARVALHO

Canoas

2009

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



**SOFTWARE EDUCATIVO: UM INSTRUMENTO PARA EXPLORAR CONCEITOS
NAS REPRESENTAÇÕES SIMBÓLICAS NO ENSINO DA GEOMETRIA
MOLECULAR**

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

Cláudio Ricardo da Silva Carvalho

Orientador: Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto

Canoas

2009

CLÁUDIO RICARDO DA SILVA CARVALHO

Dissertação do Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática, com título **Software Educativo: um instrumento para explorar conceitos nas representações simbólicas no ensino da geometria molecular**, submetido ao corpo docente da Universidade Luterana do Brasil, como requisito necessário para a obtenção do grau de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Aprovado por:

Prof. Dr. Agostinho Serrano de Andrade Neto
Orientador

Prof. 1
Banca Examinadora

Prof. 2
Banca Examinadora

Prof. 3
Banca Examinadora

Canoas, maio de 2009.

DEDICATÓRIA

A meus pais Flávio e Célia pela vida e a realização de um sonho;

A meus filhos, Anna Claudia, Rafael Flávio por motivarem a deixar um exemplo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por dar sentido a minha vida;

A meus pais, filhos e familiares pelo incentivo e conselhos;

Aos meus mestres com carinho, do Programa de pós-graduação em Ensino de Ciências e Matemática;

Agradecimento especial ao prof. Dr. Agostinho Serrano pelos encontros e orientações que tornaram possível a realização deste trabalho;

A Associação Central Adventista sul-rio-grandense, representada pelas professoras Ireni Renck e Gislaine Fortes, pelo incentivo ao docente adventista – Ação 10;

Ao Colégio Adventista de Novo Hamburgo por ter disponibilizado toda a infra-estrutura necessária;

Aos alunos da turma 131/2008, do Colégio Adventista de Novo Hamburgo pelo compromisso e dedicação;

Aos meus colegas de curso pela dedicação ao ensino de Ciência e Matemática e em especial, colegas roraimenses pelo exemplo e determinação;

Os sonhos são como uma bússola, indicando os caminhos que seguiremos e as metas que queremos alcançar. São eles que nos impulsionam, nos fortalecem e nos permitem crescer.

Augusto Cury

RESUMO

Descreve-se aqui a experiência da aplicação do software educativo – ChemsSketch 11.0, como possível ferramenta para o ensino aprendizagem da Geometria Molecular no ensino médio, explorando imagens bidimensionais e tridimensionais de espécies químicas orgânicas e inorgânicas, nos modelos de representação Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos*). A investigação tem aporte teórico nos Campos Conceituais do psicólogo francês Gerárd Vergnaud, que define como desenvolvimento cognitivo um conjunto de problemas, situações, conceitos, procedimentos e representações de tipos diferentes, mas interligados entre si. A pesquisa é essencialmente qualitativa e utiliza-se de pré-teste, pós-teste, entrevistas filmadas e simulação virtual, como métodos de aferição não numérica, onde se investiga o uso do software educativo como instrumento para explorar conceitos nas representações simbólicas no ensino da geometria molecular.

Palavras-Chave: Software educativo, representação simbólica e modelos representacionais.

ABSTRACT

Describe here the experience of the application of computer simulation as a possible tool for teaching learning Molecular Geometry in high school, exploring two-dimensional and three-dimensional images of organic and inorganic chemical species in Wireframe models of representation (*wire*), Sticks and Balls (*dick and balls*), Stick Only (*chopsticks*) and Spacefill (*solid*). The research has theoretical support in conceptual fields of French psychologist Gerard Vergnaud, and cognitive development that defines a set of problems, situations, concepts, procedures and representations of different types, but interlinked with each other. The research is mainly qualitative and is used: pre-test, post-test, filmed interviews and virtual simulation, and numerical methods of measuring not, using the educational software Chems sketch 11.0, which investigates factors which depict symbolic enrichment and increase in conceptual representations. In this perspective this paper enhance the application of theory of conceptual fields in chemistry and contribute and / or assist the teacher in their teaching activities ahead to new technologies.

Key-words: computer simulation, symbolic enrichment, increase conceptual and representational models.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Forma Geométrica Linear	28
Figura 2: Forma Geométrica Angular	28
Figura 3: Forma Geométrica Trigonal Plana (Triangular)	29
Figura 4: Forma Geométrica Piramidal	29
Figura 5: Forma Geométrica Tetraédrica	29
Figura 6: gás metano (CH ₄) – fórmula molecular	49
Figura 7: gás metano (CH ₄) – fórmula estrutural	49
Figura 8: gás metano (CH ₄) no modelo Wireframe (arame)	50
Figura 9: gás metano (CH ₄) no modelo Stick Only (pauzinhos)	50
Figura 10: gás metano (CH ₄) no modelo Balls and Sticks (paus e bolinhas)	51
Figura 11: gás metano (CH ₄) no modelo Spacefill (sólidos ou CPK)	51
Figura 12: Pré-Teste AP	52
Figura 13: Pré-Teste AP	53
Figura 14: Pré-Teste AP	55
Figura 15: Pós-Teste AP	56
Figura 16: Pós-Teste AP	57
Figura 17: Pré-Teste DIE	58
Figura 18: Pré-Teste DIE	59
Figura 19: Pré-Teste DIE	60
Figura 20: Pós-Teste DIE	61
Figura 21: Pós-Teste DIE	62

Figura 22: Pós-Teste DIE	62
Figura 23: Pré-Teste DIO	64
Figura 24: Pré-Teste DIO	64
Figura 25: Pré-Teste DIO	64
Figura 26: Pós-Teste DIO	65
Figura 27: Pós-Teste DIO	66
Figura 28: Pós-Teste DIO	67
Figura 29: Pós-Teste DIO	67
Figura 30: Pós-Teste DIO	67
Figura 31: Pós-Teste DIO	68
Figura 32: Pós-Teste DIO	68
Figura 33: Pré-Teste Dou	69
Figura 34: Pré-Teste Dou	70
Figura 35: Pré-Teste Dou	70
Figura 36: Pós-Teste Dou	71
Figura 37: Pós-Teste Dou	71
Figura 38: Pós-Teste Dou	72
Figura 39: Pós-Teste Dou	73
Figura 40: Pós-Teste Dou	73
Figura 41: Pós-Teste Dou	74
Figura 42: Pré-Teste JU	75
Figura 43: Pré-Teste JU	76
Figura 44: Pré-Teste JU	76
Figura 45: Pós-Teste JU	78
Figura 46: Pós-Teste JU	78
Figura 47: Pós-Teste JU	78
Figura 48: Pós-Teste JU	79

Figura 49: Pós-Teste JU	80
Figura 50: Pré-Teste Ke	81
Figura 51: Pré-Teste Ke	81
Figura 52: Pré-Teste Ke	82
Figura 53: Pós-Teste Ke	82
Figura 54: Pós-Teste Ke	83
Figura 55: Pós-Teste Ke	83
Figura 56: Pós-Teste Ke	84
Figura 57: Pós-Teste Ke	85
Figura 58: Pós-Teste Ke	85
Figura 59: Pós-Teste Ke	85
Figura 60: Pré-Teste Le	86
Figura 61: Pré-Teste Le	86
Figura 62: Pré-Teste Le	87
Figura 63: Pós-Teste Le.....	88
Figura 64: Pós-Teste Le.....	88
Figura 65: Pós-Teste Le.....	89
Figura 66: Pós-Teste Le.....	89
Figura 67: Pós-Teste Le.....	90
Figura 68: Pós-Teste Le.....	90
Figura 69: Pós-Teste Le.....	91
Figura 70: Pré-Teste Ta	92
Figura 71: Pré-Teste Ta	92
Figura 72: Pós-Teste Ta.....	94
Figura 73: Pós-Teste Ta.....	94
Figura 74: Pós-Teste Ta.....	94
Figura 75: Pós-Teste Ta.....	95

Figura 76: Pós-Teste Ta.....	95
Figura 77: Pós-Teste Ta.....	95
Figura 78: Pós-Teste Ta.....	96
Figura 79: Pré-Teste Va.....	97
Figura 80: Pré-Teste Va.....	97
Figura 81: Pré-Teste Va.....	98
Figura 82: Pós-Teste Va.....	99
Figura 83: Pós-Teste Va.....	99
Figura 84: Pós-Teste Va.....	99
Figura 85: Pós-Teste Va.....	100
Figura 86: Pós-Teste Va.....	101
Figura 87: Pós-Teste Va.....	101

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
2 SITUAÇÃO PROBLEMA	16
3 OBJETIVOS	18
3.1 Objetivo Geral	18
3.2 Objetivos Específicos	18
4 REFERENCIAL TEÓRICO	19
4.1 TEORIA DOS CAMPOS CONCEITUAIS DE VERGNAUD	19
4.2 FUNÇÃO DA LINGUAGEM NA TEORIA DOS CAMPOS CONCEITUAIS	25
4.3 INVARIANTES OPERATÓRIOS	26
4.4 ENTENDENDO A GEOMETRIA MOLECULAR	28
4.4.1 O Modelo do Octeto	32
4.5 SOFTWARE EDUCATIVO: FERRAMENTA PARA O ENSINO DA QUÍMICA	33
4.5.1 PROGRAMA CHEMSKETCH	37
5 METODOLOGIA	41
5.1 O PRÉ-TESTE	43
5.2 A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	44
5.3 O PÓS-TESTE	45
5.4 AMOSTRA	47

6 ANÁLISES	52
6.1 ANÁLISE AP	52
6.1.1 Pré-Teste AP	52
6.1.2 Pós-Teste AP	55
6.2 ANÁLISE DIE	58
6.2.1 Pré-Teste DIE.....	58
6.2.2 Pós-Teste DIE	61
6.3 ANÁLISE DIO.....	64
6.3.1 Pré-Teste DIO	64
6.3.2 Pós-Teste DIO.....	65
6.4 Análise Dou	69
6.4.1 Pré-Teste Dou	69
6.4.2 Pós-Teste Dou	70
6.5 Análise JU	75
6.5.1 Pré-Teste JU	75
6.5.2 Pós-Teste JU.....	77
6.6 Análise Ke	81
6.6.1 Pré-Teste Ke	81
6.6.2 Pós-Teste Ke.....	82
6.7 Análise Le.....	86
6.7.1 Pré-Teste Le.....	86
6.7.2 Pós-Teste Le	87
6.8 Análise Ta	92
6.8.1 Pré-Teste Ta	92
6.8.2 Pós-Teste Ta.....	93
6.9 Análise Va	97
6.9.1 Pré-Teste Va	97

6.9.2 Pós-Teste Va.....	98
CONCLUSÃO DAS ANÁLISES.....	103
CONCLUSÃO	108
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	110
APÊNDICES	113
ANEXOS	114

1 INTRODUÇÃO

Atualmente o ensino da Química vem sendo incrementado pelo uso de tecnologias, em especial – Software Educativo - como ferramenta, para incentivar o educando a estabelecer uma relação visual mais próxima da realidade, utilizando modelos representacionais comuns na literatura e programas educativos de química que são: Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*).

Este trabalho tem como objetivo geral investigar a possibilidade do software educativo – Chemscketch 11.0, atuar como instrumento para explorar conceitos nas representações simbólicas no ensino da geometria molecular nos estudantes do ensino médio. A análise das figuras geradas pelos estudantes será observacional, comparando a produção antes e após o uso da ferramenta computacional, verificando a evolução simbólica da geometria molecular nos desenhos gerados.

Consideramos evolução simbólica quando o estudante consegue representar uma espécie química considerada simples, evoluindo sua representação para uma estrutura mais complexa no plano bidimensional, contendo uma geometria molecular do tipo: linear, angular, trigonal plana (triangular), piramidal, ou tetraédrica.

A Teoria dos Campos Conceituais de Gerárd Vergnaud fundamenta esta investigação que a partir das representações simbólicas, define conceitos implícitos onde é promovida uma situação para dar sentido ao conceito, através de uma tarefa – Simulação de espécies químicas simples e complexas, utilizando modelos representacionais Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*), que se refletem nos esquemas próprios de representação do estudante, porque para Vergnaud o conjunto das formas de linguagem permite representar simbolicamente o conceito.

2 SITUAÇÃO PROBLEMA

A tecnologia da informação vem ganhando espaço no nosso dia a dia em diversas áreas do conhecimento, inclusive no ensino e aprendizagem da Química. Sabe-se que a Química é uma Ciência, que estabelece relações macroscópicas, microscópicas e simbólicas (GIBIN; FERREIRA, 2007).

Compartilhar esta trilogia com estudantes, em sala de aula, não é tarefa fácil para o professor, até pelo fato de centrar todo o conhecimento nele, pensamento que não é mais unanimidade. Assim, ferramentas computacionais como programas educativos, surgem para auxiliar, dinamizar e/ou aperfeiçoar esse processo.

Segundo Ribeiro e Greca (2003), nos últimos dez anos houve um verdadeiro salto na produção de programas educativos para o ensino da Química, por apresentarem provável potencial para novas estratégias de ensino aprendizagem. Também, pela afirmação de Gibin e Ferreira (2007) os estudantes têm dificuldades em estabelecer relações apropriadas entre o nível macro e microscópico, porém estudos têm demonstrado a existência de relações entre habilidade de imaginar o fenômeno no nível molecular e a aprendizagem de conceitos.

Na investigação de Kozma e Russel (1997), encontramos estudos sobre os efeitos das representações, através da ferramenta computacional e seu estímulo no desempenho cognitivo em áreas das ciências e matemática. Neto, Kreutz e Moreira (2007) explorando a Teoria Cinética dos Gases, combinam práticas experimentais e simulação computacional observando a evolução dos modelos utilizados por estudantes e o enriquecimento das suas representações simbólicas. Também Santos e Greca (2005) utilizando software de simulação Monte Carlo, analisam as dificuldades os ganhos conceituais e a melhoria na representação pictórica no tópico das Interações Intermoleculares.

Lehninger (1995) comenta que as interações entre átomos formadores das moléculas apresentam características específicas (como tamanho, ângulos e

distâncias entre eles), de maneira que alterar as estruturas de um mesmo composto acarretará mudanças nos efeitos biológicos, ou seja, a forma de uma molécula influencia na sua função. Para Santos e Galvão (2006) o estudo que envolve as moléculas têm uma dificuldade na sua visualização e análise, quando feito com base apenas em modelos teóricos no plano bidimensional.

Assim, exploramos a ferramenta computacional Chemscketch 11.0, que oferece imagens tridimensionais e modelos representacionais como: Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*), que auxiliem o estudante explorar conceitos nas representações simbólicas relacionados à geometria molecular.

Considerando a importância em relação a forma como os átomos estão organizados no espaço atômico - Geometria Molecular - para o ensino da Química e a visualização como processo cognitivo, investigamos as representações simbólicas à luz da Teoria dos Campos Conceituais de Vergnaud.

Neste contexto se insere a questão norteadora da pesquisa: A utilização de software educativo como estratégia, pode estimular a exploração de conceitos nas representações simbólicas no ensino da geometria molecular?

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo Geral

O objetivo geral desta pesquisa é investigar como o uso de software educativo como ferramenta, pode estimular conceitos no ensino da Geometria Molecular, refletindo nas suas representações simbólicas nos estudantes do Ensino Médio.

3.2 Objetivos Específicos

- Identificar nas representações simbólicas geradas pelos estudantes, indicativos que se relacionem com a Geometria Molecular;
- Identificar o tipo de geometria molecular: linear, angular, trigonal plana ou triangular, piramidal e tetraédrica, das espécies químicas no plano bidimensional, após o uso da ferramenta computacional;
- Verificar a influência dos modelos representacionais: Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*), nas representações simbólicas.

4 REFERENCIAL TEÓRICO

Esta pesquisa tem aporte teórico nos estudos da Teoria dos Campos Conceituais do psicólogo francês Gerárd Vergnaud. Após uma revisão da literatura científica não encontramos publicação da Teoria dos Campos Conceituais de Vergnaud para a área da Química.

Moreira (2002) aponta que embora Vergnaud, tenha dedicado especial atenção a Matemática, nas estruturas aditivas e nas estruturas multiplicativas, seu referencial tem despertado interesse na área das ciências, por envolver basicamente, resolução de problemas, mudança conceitual e representação simbólica.

Portanto, a Teoria dos Campos Conceituais de Vergnaud para esta investigação está fundamentada na releitura de Moreira (2002).

4.1 TEORIA DOS CAMPOS CONCEITUAIS DE VERGNAUD

Campo conceitual é definido por Vergnaud como um conjunto de problemas e situações cujo tratamento requer conceitos, procedimentos e representações de tipos diferentes, mas intimamente relacionados.

A teoria dos campos conceituais é uma teoria cognitivista neopiagetiana que pretende oferecer um referencial mais frutífero do que o piagetiano ao estudo do desenvolvimento cognitivo e da aprendizagem de competências complexas, particularmente aquelas implicadas nas ciências e na técnica, levando em conta os próprios conteúdos do conhecimento e a análise conceitual de seu domínio.

A teoria dos campos conceituais supõe que o âmago do desenvolvimento cognitivo é a *conceitualização* ela é a pedra angular da cognição. Logo, deve-se dar toda atenção aos aspectos conceituais dos esquemas e à análise conceitual das

situações para as quais os estudantes desenvolvem esquemas, na escola ou fora dela.

A análise conceitual das situações nos remete ao conceito de invariantes operatórios que estão contidos nos esquemas e que são designadas pelas expressões: Conceito-em-ação e Teorema-em-ação.

Teorema-em-ação é uma ação tida como verdadeira sobre o real. Conceito-em-ação é um objeto, um predicado, ou uma categoria de pensamento tida como pertinente relevante.

O conceito de esquema colocado por Piaget é fundamental na teoria de Vergnaud, porém este amplia e redireciona as operações lógicas gerais implicando no “sujeito-em-situação”, onde diferentemente de Piaget, atribui todo o desenvolvimento cognitivo às situações e a conceitualizações específicas.

O domínio de um campo conceitual é lento e pode levar vários anos, contudo é esperado que o estudante, frente a novas situações problema, seja capaz de desenvolver suas competências (ou seja, saber fazer). De fato, a maior parte de nossos conhecimentos são competências que se formam, desenvolvem, diferenciam, melhoram ou pioram ao longo de nossas vidas (GRECA; MOREIRA, 2002).

Nessa perspectiva, o Campo Conceitual de Vergnaud nos leva a três pilares, a saber: Conceito, Situação e Esquema.

Conceito:

Vergnaud não fala da simples definição de conceito, mas sim do conceito de conceito, isto é, a variedade de conceitos distintos fornecidos tornando-os significativos, através de uma situação.

O conceito é definido a partir de três premissas:

1º) É um conjunto de situações que constituem o referente do conceito;

2º) É um conjunto de invariantes operatórios (teoremas e conceitos em ação) que dão significado ao conceito;

3º) É um conjunto de representações simbólicas que compõem seu significante.

Em conseqüência, Vergnaud define conceito com a fórmula:

$C = \mathbf{S.I.R.}$, a saber:

S: é o conjunto de situações que dão sentido ao conceito (a referência).

I: conjunto de invariantes sobre os quais repousa a operacionalidade dos esquemas (o significado)

R: conjunto das formas de linguagem que permite representar simbolicamente o conceito, suas propriedades, as situações e os procedimentos de tratamento (o significante).

Greca e Moreira (2002) descrevem a aplicação de um campo conceitual na Física-Mecânica. Seja:

Problema 1. Dois blocos estão interligados por um fio e um destes blocos é puxado sobre um plano horizontal. O que acontece com os blocos?

Problema 2. Dois blocos interligados por um fio são soltos no topo de um plano inclinado. O que acontece com os blocos?

Do ponto de vista da Mecânica Clássica as situações, os conceitos e as operações são muito semelhantes, embora para os estudantes os problemas citados, ofereçam diferentes graus de dificuldades.

“[...] conceitos são significativos através de situações” (BARAIS; VERGNAUD, 1990, p. 78 apud MOREIRA, 2002, p. 5).

Situação:

Para Vergnaud situação significa tarefa, isto é, toda situação complexa pode ser analisada como uma combinação de tarefas, para as quais é importante conhecer sua natureza e dificuldades próprias, a fim de que o professor oportunize, crie situações relevantes para dar sentido ao conceito.

É função do professor identificar que conhecimentos seus alunos têm implícitos e quais usam corretamente, porém não os desenvolveu de forma explícita.

“[...] As situações é que são responsáveis pelo sentido atribuído ao conceito” (BARAIS; VERGNAUD, 1990, p. 78, apud MOREIRA, 2002).

Contudo, é precipitado pensar que as situações criadas e/ou vividas constituem, por si só, todo o sentido atribuído ao conceito.

O comportamento e sua organização, frente a uma determinada situação, é que determina a relação entre a situação criada e/ou vivida e a representação revelada pelo estudante. Daí decorre a necessidade do esquema para dar sentido a situação.

Também, Greca e Moreira (2002) analisam as novas situações geradas e os esquemas evocados para a resolução do problema proposto, ou seja, o fundamental era a identificação de forças.

Problema: Dois pêndulos, ambos fixados num mesmo ponto, um deles inicialmente em repouso. Identifique que acontecerá com os mesmos, considerando o caso em que ambos tem a mesma massa e o caso em que têm massas diferentes.

“Os processos cognitivos e as respostas do sujeito são função das situações com as quais é confrontado” (GRECA; MOREIRA, 2002).

Esquema:

Para Vergnaud esquema é a organização do comportamento para um determinado grupo de situações, isto é, no esquema se revelam os conhecimentos-em-ação do sujeito, de forma a desenvolver um repertório amplo e diversificado de esquemas.

Há situações em que o sujeito tem competência, no seu repertório, para a resolução de um problema, porém outras não há competência para tanto, daí ocorre comparações, reestruturação, reorganização cognitivas para melhor tomada de decisão frente a uma nova situação. A reestruturação dessas ações conduz ao sucesso ou insucesso.

Então, os esquemas evocados pelo sujeito numa dada situação ou frente à representação simbólica é o que constitui o sentido dessa situação ou representação para esse indivíduo.

Também, são sugeridos alguns ingredientes especiais ao esquema:

1. Objetivo do esquema ou as metas e antecipações: um esquema se dirige sempre a uma classe de situações nas qual o sujeito pode descobrir uma possível finalidade da sua atividade;
2. Regras de ação e controle: são regras do tipo “se.... então” que permitem a geração e a seqüência de ações do sujeito;
3. Invariantes operatórios (Teorema-em-ação e Conceito-em-ação): constituem os conhecimentos contidos nos esquemas, dirigem a busca da informação pertinente para a detecção de metas e das regras adequadas à ação;
4. Possibilidades de inferência (ou raciocínios): permitem calcular as regras e antecipações em uma situação concreta.

Por isso, para Vergnaud o desenvolvimento cognitivo consiste, sobretudo, e principalmente, do desenvolvimento de um vasto repertório de esquemas que permitam aos sujeitos enfrentar e dominar a gama de situações que se lhe apresentem.

É importante ressaltar que a tríade conceito, esquema e situação não operam independentemente, mas de forma harmônica, a fim de que o estudante seja capaz de desenvolver a conceitualização do real.

Contudo a teoria dos campos conceituais é uma teoria complexa, pois envolve a complexidade decorrente da necessidade de abarcar em uma única perspectiva teórica todo o desenvolvimento de situações progressivamente dominadas, dos conceitos e teoremas necessários para operar eficientemente nessas situações, e das palavras e símbolos que podem representar eficazmente esses conceitos e operações para os estudantes, dependendo de seus níveis cognitivos.

“O desenvolvimento cognitivo consiste, sobretudo, e principalmente no desenvolvimento de um vasto repertório de esquemas” (MOREIRA, 2002).

4.2 FUNÇÃO DA LINGUAGEM NA TEORIA DOS CAMPOS CONCEITUAIS

Segundo Vergnaud, o conhecimento se encontra organizado em campos conceituais, dos quais o sujeito se apropria ao longo do tempo. Campos Conceituais podem ser definidos como grandes conjuntos, informais e heterogêneos, de situações e problemas cuja análise e tratamento requerem diversas classes de conceitos, procedimentos e representações simbólicas que se conectam umas com outras.

No capítulo anterior, comentamos do triplete conceito, situação e esquema que agem de forma articulada, a fim de gerar significado e significante. Na fórmula $C = S.I.R.$, o R, como já foi citado, significa o conjunto das formas de linguagem que permite representar simbolicamente o conceito, suas propriedades, as situações e os procedimentos de tratamento (o significante).

O papel da linguagem na Teoria dos Campos Conceituais de Vergnaud é baseado na relação entre situação e esquema, porque é a fonte primária da representação e, portanto, da conceitualização.

Isto revela a importância dada, por Vergnaud, aos ingredientes do esquema, citados no capítulo anterior, que resumo:

- Ajuda à designação e, portanto, à identificação dos invariantes: objetos, propriedades, relações, teoremas;
- Ajuda ao raciocínio e à inferência;
- Ajuda à antecipação dos efeitos e dos objetivos, ao planejamento e ao controle da ação.

Como a representação simbólica, é uma forma de linguagem e comunicação, conseqüentemente, atuará como fonte importante de ajuda ao pensamento e a organização da ação nos campos conceituais.

Vergnaud usava o termo representação como sendo o de um sistema simbólico que significaria algo para o sujeito: um sistema de signos e uma sintaxe, ou operações sobre elementos do sistema.

Concordando com o significado simbólico, Maturana (2001) diz que o linguajar não é um sistema de operação com símbolos abstratos na comunicação e que os símbolos não preexistem à linguagem, mas surgem depois dela e nela como distinções feitas por um observador, de relações consensuais de coordenações de ações na linguagem.

4.3 INVARIANTES OPERATÓRIOS

Esquema é a organização da conduta para certa classe de situações; teorema-em-ação e Conceito-em-ação são invariantes operacionais, logo são componentes essenciais dos esquemas.

Ao longo deste trabalho, comentamos mais de uma vez, sobre os Invariantes Operatórios, que designam as expressões “conceito-em-ação” e “teorema-em-ação” que compõem o Esquema. Há diferenças entre eles que são:

- Conceito-em-ação é uma categoria do pensamento considerada como pertinente;
- Teorema-em-ação é uma proposição considerada como verdadeira sobre o real.

Há uma relação dialética entre conceito-em-ação e teorema-em-ação, uma vez que conceitos são ingredientes de teoremas e teoremas são propriedades que dão aos conceitos seus conteúdos. Mas seria um erro confundi-los. Conceitos em ação são ingredientes necessários das proposições. Mas conceitos não são teoremas, pois não permitem derivações (inferências ou computações); derivações requerem proposições. Proposições podem ser verdadeiras ou falsas; conceitos

podem ser apenas relevantes ou irrelevantes. Ainda assim não existem proposições sem conceitos.

Por outro lado estes invariantes operatórios formam a articulação essencial entre a prática e a teoria, uma vez que a percepção, a procura e a seleção de informação se embasam por inteiro no sistema de Conceito-em-ação disponível pelo sujeito e os teoremas-em-ação subjacente na sua conduta (GRECA; MOREIRA, 2002).

Contudo, em geral, os alunos não são capazes de explicar ou mesmo expressar em linguagem natural seus teoremas e conceitos-em-ação.

De acordo com esta proposta, os invariantes operatórios guiam a construção do modelo mental. Comparando o modelo mental com a realidade ou simplesmente operando com ele, o sujeito é capaz de fazer certas inferências. Tais inferências provocarão a modificação ou a preservação das invariáveis operatórias.

A maioria desses conceitos e teoremas-em-ação permanece totalmente implícita, entretanto eles podem também ser explícitos ou tornarem-se explícitos e aí entra o ensino: ajudar o aluno a construir conceitos e teoremas explícitos, e cientificamente aceitos, a partir do conhecimento implícito. É nesse sentido que conceitos-em-ação e teoremas-em-ação podem, progressivamente, tornarem-se verdadeiros conceitos e teoremas científicos, mas isso pode levar muito tempo.

[...] Uma proposição explícita pode ser debatida, uma proposição tida como verdadeira de maneira totalmente implícita, não. [...] É através do processo de explicitação do conhecimento implícito – aí o professor tem um papel mediador fundamental [...] (MOREIRA, 2002, p. 22).

Finalmente, Grings, Caballero e Moreira (2006) buscam possíveis indicadores de invariantes operatórios apresentados por estudantes em conceitos da Termodinâmica, quando respondem a seguinte questão: O que se entende por temperatura? As respostas dos estudantes mostram que relacionam temperatura

com uma variação de “calor”, que pode estar servindo como obstáculo à nova aprendizagem, porque “conduziria a erros” se estes fossem submetidos a situações que envolvam temperatura e calor. Vergnaud (apud MOREIRA, 2002) argumenta que o conhecimento prévio pode funcionar como obstáculo epistemológico. Neste caso, a ação mediadora do professor é também imprescindível.

4.4 ENTENDENDO A GEOMETRIA MOLECULAR

O estudo da geometria molecular nos permite entender como os átomos estão distribuídos espacialmente (3D). Esta organização é fundamental porque as propriedades das substâncias estão relacionadas com as formas geométricas de suas moléculas (SANTOS; MÓL, 2005, p. 226). A geometria molecular faz parte do currículo de Química Geral, ministrada no primeiro ano do ensino médio.

Santos e Mól (2005) afirmam que a distribuição dos átomos nas moléculas ocorre em três dimensões e é responsável por muitas propriedades das substâncias e não somente às suas composições químicas. Essa representação espacial demonstra a forma geométrica da molécula. Se a molécula da água, por exemplo, tivesse geometria linear (H-O-H) talvez a água não tivesse as propriedades organolépticas¹ que conhecemos como: estado de agregação, cor, sabor, odor, brilho.

Na década de 60 os químicos Ronald J. Gillespie e Ronald Sydney Nyholm, propuseram um modelo prático para prever a geometria molecular, chamado Método VSEPR (*Valence Shell Electron Pair Repulsion*) traduzido como Teoria da Repulsão dos pares de elétrons da camada de valência. Para entender como isso ocorre é preciso considerar: o número de átomos da molécula e os pares eletrônicos da camada de valência, compartilhados ou não.

Segundo esta teoria, os elétrons da camada de valência (camada mais externa) são distribuídos, aos pares, ao redor do átomo, como se estivessem em

¹ Propriedades organolépticas são aquelas que impressionam nossos sentidos (FONSECA, 1993, p. 14).

uma esfera, afastados o máximo possível, para diminuir a repulsão. Os átomos que participam da ligação são chamados de **ligantes**; e os que não participam de **não ligantes**. O átomo que se une a outros é denominado **átomo central**. Os que se ligam ao central ficam distribuídos de acordo com a orientação espacial dos elétrons ligantes que estão ao redor do átomo central.

Peluzzo e Canto (1999) fazem uma analogia, utilizando balões (bexigas) para facilitar o entendimento do leitor. Se amarrarmos pela boca dois balões (bexigas de festas infantis) cheios de ar e os soltarmos sobre o chão? E se repetirmos esse procedimento usando três e quatro balões? Os balões se afastarão o máximo possível uns dos outros. Unindo os seus centros imaginários, conseguiríamos um segmento de reta, um triângulo equilátero e um tetraedro.

Amaral et al. (2008) considera as Regras de VSEPR outro meio prático, muito utilizado na literatura, para determinar a geometria molecular. Seja:

- Moléculas biatômicas (formadas por dois átomos) do tipo **A₂** (substância simples) e **AX** – Apresentam geometria **linear**.

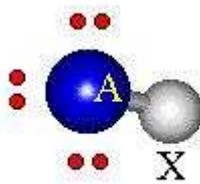


Figura 1: Forma Geométrica Linear

Fonte: Mundim (2000)

- Moléculas triatômicas (formadas por três átomos) – basta montar a fórmula eletrônica e atentar para os seguintes casos:

1. Quando o átomo central possuir elétrons não ligantes, a molécula será **angular**;

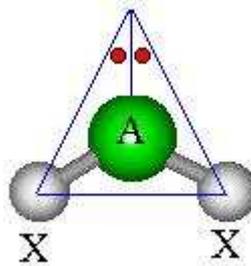


Figura 2: Forma Geométrica Angular

Fonte: Mundim (2000)

2. Quando o átomo central não possuir elétrons não ligantes, a molécula será **linear**.

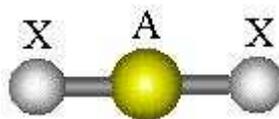


Figura 3: Forma Geométrica Linear

Fonte: Mundim (2000)

- Moléculas tetratômicas (formadas por quatro átomos):

1. Quando o átomo central possuir elétrons não ligantes, a molécula será **piramidal**;

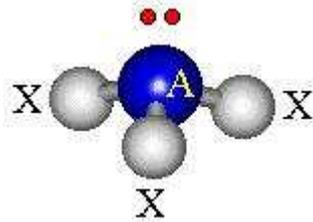


Figura 4: Forma Geométrica Piramidal

Fonte: Mundim (2000)

2. Quando o átomo central não possuir elétrons não ligantes, a molécula será **triangular/trigonal plana**.

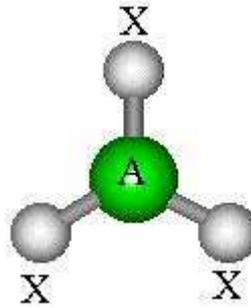


Figura 5: Forma Geométrica Trigonal Plana (Triangular)

Fonte: Mundim (2000)

- Moléculas pentatômicas (formadas por cinco átomos)

1. A maioria das moléculas pentatômicas serão tetraédrica.

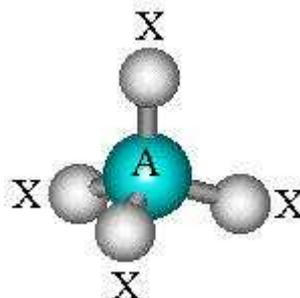


Figura 6: Forma Geométrica Tetraédrica

Fonte: Mundim (2000)

Para as representações no papel (desenho) bidimensional, geralmente, o estudante, utiliza a formulação eletrônica (Lewis), seguido da formulação estrutural (Couper). A formulação eletrônica consiste em representar os elétrons, da última camada de valência² por “pontos” em torno do elemento e a formulação estrutural representa cada par de elétrons compartilhados por um “traço” (CARVALHO, 1997).

Valente e Moreira (2006) discordam dessa ordem, pois frequentemente, em livros e textos de todos os níveis, assumir-se que a previsão da geometria molecular é posterior à determinação da formulação estrutural. Entendem que não é necessariamente assim, porque para o caso de moléculas pequenas, envolvendo elementos representativos³, constituídas por um átomo central e vários átomos periféricos pode-se, com vantagem, inverter o processo acima citado, de forma a prever a geometria molecular e posteriormente, tomar o resultado como ponto de partida para a determinação da correspondente fórmula estrutural.

Revedo a literatura, constatamos que este método não é utilizado no ensino médio.

² Valência é o poder de combinação ou a capacidade de combinação de elementos (CARVALHO, 1997, p. 56).

³ Elementos representativos são os elementos cujo subnível de maior energia da distribuição eletrônica de seus átomos é **s** ou **p**. São elementos pertencentes às famílias 1, 2, 13, 14, 15, 16, 17 e 18 da Classificação Periódica (CARVALHO, 1997, p. 39).

4.4.1 O Modelo do Octeto

Há séculos os cientistas já sabem que os átomos da maioria dos elementos químicos não apresentam existência isolada. Nas condições ambientes somente os gases nobres (He, Ne, Ar, Xe, Kr e Rn) apresentam átomos estáveis isolados, isto é, que não estão unidos a outros átomos. Átomos de oxigênio, por exemplo, podem ser encontrados combinados com outros iguais a ele (O_2 , O_3), ou com outros átomos diferentes como: CO, CO_2 , H_2O (PELUZZO; CANTO, 1999, p. 43).

Para entender e/ou explicar a ligação entre átomos, William Kossel e Gilbert Newton Lewis, no ano de 1916, propuseram uma teoria chamada de **Modelo do Octeto** de elétrons, ou simplesmente **Regra do Octeto**.

Sobre a referida regra, Santos e Mól (2005) dizem que os átomos dos elementos químicos estabelecem ligações químicas para adquirir configurações eletrônicas semelhantes às dos átomos dos gases nobres mais próximos a eles na tabela periódica. Isto significa que os átomos, ao estabelecer ligações químicas, ficam com oito elétrons na sua última camada de valência, com exceção do átomo Hélio (dois elétrons).

Em outras palavras, os átomos dos gases nobres são estáveis porque têm oito elétrons na camada de valência (ou dois, no caso do hélio). Por isso, a configuração eletrônica com a camada de valência completa é chamada **configuração estável**. Esta configuração pode ser obtida através do compartilhamento de elétrons (ligação covalente) ou da transferência de elétron (ligação iônica)s de um átomo para o outro, formando assim as ligações químicas entre os átomos (CARVALHO, 1997, p. 51).

É importante ressaltar que a Regra do Octeto é apenas uma tentativa de explicar o comportamento observado de um determinado número de elementos químicos, contudo continua sendo muito utilizada no ensino médio e superior, para

explicar a fórmula e a estrutura de muitas substâncias, apesar de algumas restrições como a não aplicação para elementos de transição⁴.

4.5 SOFTWARE EDUCATIVO: FERRAMENTA PARA O ENSINO DA QUÍMICA

A Química originalmente é uma ciência experimental que utiliza especialmente a observação, como fonte para novas descobertas. Deste modo, o laboratório e a manipulação de material concreto são utilizados para explicar teorias químicas que contribuem para a experimentação, observação e descoberta. A simulação computacional surge como ferramenta para o ensino da química que vem contribuir na visualização, principalmente na observação de estruturas sub-microscópicas.

Meleiro e Giordan (1999) citam que a visualização, considerada como um meio facilitador do entendimento e da representação de fenômenos vem sendo utilizado desde o surgimento da ciência por meio de gravuras, gráficos e ilustrações, e mais recentemente foi incrementado com o uso de recursos eletrônicos e digitais, como o computador e a televisão.

Eichler e Del Pino (2000, p. 835-836) têm defendido as simulações computacionais como ferramentas úteis para a aprendizagem de conceitos científicos. As vantagens estão relacionadas com os modos de construção do conhecimento, pois as simulações oferecem um ambiente interativo para o aluno manipular e observar resultados imediatos, decorrentes da modificação de situações e condições.

Giordan (1999) também concorda que há vantagens na construção de imagens virtuais de computação gráfica através da simulação, isto é, de transformação da tela do computador em um “*laboratório experimental*”, na qual são atualizadas as estilizações de fenômenos físicos e químicos, com o intuito de representar como a natureza se comporta sob determinadas condições. Assim, ao

⁴ Elementos de transição é todo o elemento que possui seu elétron mais energético num subnível *d* e *f* (FONSECA, 1993, p. 52).

representarmos as moléculas em perspectiva tridimensional, por exemplo, estamos superando a limitação da representação de imagens bidimensionais, que não contemplam satisfatoriamente o tema “**estrutura da matéria**”, uma vez que muitas propriedades de uma substância são explicadas com base na disposição espacial dos átomos que a constituem.

Para esta investigação utilizamos o programa educativo chamado Chems sketch 11.0 no ensino da geometria molecular, porque conforme indicam Furió e Calatayud (1996) no ensino da Química, muitos estudos têm relatado que os temas relacionados à geometria molecular encontram-se entre aqueles em relação aos quais estudantes de nível secundário e universitário encontram maiores dificuldades do tipo perceptivo e epistemológico.

Ribeiro e Greca (2003) têm apontado várias dificuldades para compreensão de conceitos. Uma delas é a abstração, pois a Química por muitas vezes trata de fenômenos microscópicos e que os estudantes deveriam ter mais contato com a informação sensorial. Também desenvolver a competência representativa, isto é, transformar o conhecimento simbólico em outro equivalente. Para tanto, sugerem como uma das alternativas o uso da simulação computacional.

Ainda, comentam que um dos principais objetivos dos pesquisadores da educação Química nos últimos anos tem sido buscar a melhoria da compreensão conceitual dos alunos. Dentre os esforços incluem a identificação dos enganos mais comuns dos alunos, as suas dificuldades na resolução de problemas em que há a necessidade de pensar a nível molecular e a criação de novas formas de instrução química, a fim de promover a melhoria da compreensão conceitual.

Pesquisando a literatura encontramos vários trabalhos, envolvendo a ferramenta computacional para o ensino da química. Santos e Greca (2005) utilizando software educacional no ensino das Interações Intermoleculares, analisando as dificuldades e os ganhos conceituais e representacionais. Wu e Shah (2004) explorando o papel da visão/ espaço no aprendizado da Química, examinando os erros mais comuns dos estudantes e suas dificuldades de

entendimento às representações visuais e de como os alunos desenvolvem seu entendimento sobre representações químicas 2D e 3D, por meio da utilização de uma ferramenta de visualização. Coelho et al. (1999) utilizam a mecânica molecular com o auxílio de programas computacionais na determinação de geometrias moleculares mais estáveis.

Sebata (2006) propõe desenvolver um conjunto de atividades pedagógicas, para o ensino de geometria molecular, avaliando se os estudantes são capazes de reconhecer formas geométricas de diferentes estruturas moleculares, utilizando material concreto e programa de computação (Chenwin). Em suas conclusões destaca a não utilização, por parte do estudante, de componentes curriculares que são fundamentais para a aprendizagem da geometria molecular. Na área da Matemática: noções de geometria plana e noções de geometria espacial; na área das Artes: profundidade/espaço e capacidade de desenhar figuras tridimensionais em planos bidimensionais.

Sebata (2006) percebe a motivação dos estudantes em utilizar o computador, contudo há pouca exploração na visualização de moléculas tridimensionais por falta de tempo, devido ao tempo maior gasto nas explicações, envolvendo habilidades geométricas (plana/espacial) e noções de desenho.

Finalizamos com Vieira (1997 apud MELO; MELO, 2005) que classificou os softwares educacionais para a Educação Química, encontrados entre 1987 e 1994 no periódico *Journal of Chemical Education*, em 12 categorias:

- *Aquisição de dados e análise de experimento*: esses programas podem fazer a organização e a análise dos dados do experimento, traçando gráficos e apresentando várias tabelas com estatísticas diferentes, conforme a necessidade;
- *Base de dados (BD) simples*: conjunto organizado de dados com uma lógica que permite rápido acesso, recuperação e atualização por meio eletrônico;

- *BD / Modelagens*: apresentam características comuns aos de base de dados simples, isto é, utilizam os mesmos recursos de acesso e gerenciamento de dados e das modelagens, que executam normalmente uma grande quantidade de cálculos matemáticos;
- *BD / Hipertexto e/ou Multimídia*: as bases de dados já existentes para PC's com os recursos de som e imagens coloridas;
- *Cálculos Computacionais*: resolvem equações matemáticas dos mais diferentes tipos, realizam inúmeros cálculos, como por exemplo, os relativos a pH, propriedades termodinâmicas, equilíbrio químico, análises qualitativas e quantitativas, etc., propiciam uma ponte entre o que se tem, por exemplo, equações e dados experimentais, e o que se desejam geralmente informações e resultados estruturados na forma de tabelas e gráficos variados;
- *Exercício e Prática*: apresentando um conjunto de exercícios ou questões para o aluno resolver;
- *Jogo Educacional*: programa de jogos que permitem que o aluno desenvolva a habilidade de testar hipóteses, funcionando como se fosse um constante desafio à sua imaginação e criatividade;
- *Produção de gráficos e caracteres especiais*: Úteis no ensino de certos conteúdos de Química;
- *Simulações*: programas que trazem modelos de um sistema ou processo;
- *Sistema especialista*: programa de grande complexidade e custo, usados em diagnósticos e pesquisas;
- *Tutorial*: programa que ensina ao aluno uma determinada área do conhecimento, tendo a vantagem de ser mais dinâmico e animado (som e imagens) que um livro texto.

Vieira (1997 apud RIBEIRO; GRECA, 2003), ainda faz a distinção entre as simulações simples, que servem como preparação para o aluno antes que este tenha o experimento real no laboratório, e as com previsão, que apresentam maior interatividade com o usuário, permitindo-lhes chegar a conclusões e fazer previsões com a ajuda do próprio programa não fazendo referência a simulações operacionais.

Para esta investigação, optamos pelo uso de software livre⁵ educacional de simulação encontrado na Web, chamado Chems sketch 11.0, que descrevemos na amostra.

4.5.1 PROGRAMA CHEMSKETCH

O software utilizado na investigação é o Chems sketch 11.0 da Advanced Chemistry Development, Inc (ACDLabs). Todo o software da ACDL abs trabalha com barramento 32-bits e aplicável aos PC's com Sistemas Operacionais Microsoft Windows 95/98/NT/ME/2000.

É distribuído gratuitamente para área do ensino e pesquisas na química, e permite ao usuário construir, navegar e visualizar estruturas químicas bidimensionais e tridimensionais. A interface fornece um portal para uma gama de ferramentas analíticas, que facilita o processo de transformação estrutural ou de análise de dados.

A área de trabalho é grande e localiza-se no meio da tela, onde as estruturas são desenhadas. A barra "Structure" fornece uma interface onde contém ferramentas (barra esquerda) para desenho e manipulação de estruturas químicas bidimensionais. Há uma tabela periódica dos elementos atualizada, que fornece informações específicas atômicas, por exemplo: número atômico, eletronegatividade, massa atômica, configuração eletrônica, densidade, estado de oxidação e outros. A direita da janela contém a barra de radicais orgânicos, complementada por uma tabela de radicais orgânicos simples e complexos.

⁵ Software-livre ou Free Software, conforme Free Software Foundation é o software que pode ser usado, copiado, estudado, modificado e redistribuído sem restrição (SOFTWARE LIVRE, 2008).

O software permite recursos de confecção de espécies químicas utilizando a formulação molecular no plano, mas contém outro dispositivo chamado *3D Optimization*, na barra de ferramentas superior, que coloca a espécie química na formulação estrutural em planos distintos, evidenciando a repulsão entre os átomos e a sua estrutura no espaço. A tridimensionalidade da espécie ocorre após acionar o botão *3D Viewer*, onde a interface se transforma ,contendo uma única barra de ferramentas de manipulação 3D. Teclando a barra “draw” surge outra interface de apoio ao desenho, com figuras geométricas planas, polígonos, setas, curvas, e outros. Neste software há um recurso chamado *measure bond angle* que calcula o ângulo entre três átomos, entretanto este recurso não foi utilizado pelos estudantes, pois se priorizou a aferição qualitativa visual prévia do conceito de ângulo.

Dentre as ferramentas úteis, como rotação, ângulo, coloração, destacamos os modelos representacionais utilizados nesta investigação: Wireframe (*arame*), balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*).

Nas figuras a seguir, reproduzimos através de um exemplo aleatório do gás metano (CH_4), o mecanismo descrito para facilitar o entendimento.

Observe a figura (6) gás metano na fórmula molecular; figura (7) gás metano na fórmula estrutural; figura (8) gás metano no modelo representacional wireframe (*arame*); figura (9) gás metano no modelo representacional Stick Only (*pauzinhos*); figura (10) gás metano no modelo representacional Balls and Sticks (*paus e bolinhas*); figura (11) gás metano no modelo representacional Spacefill (*sólidos ou CPK*).

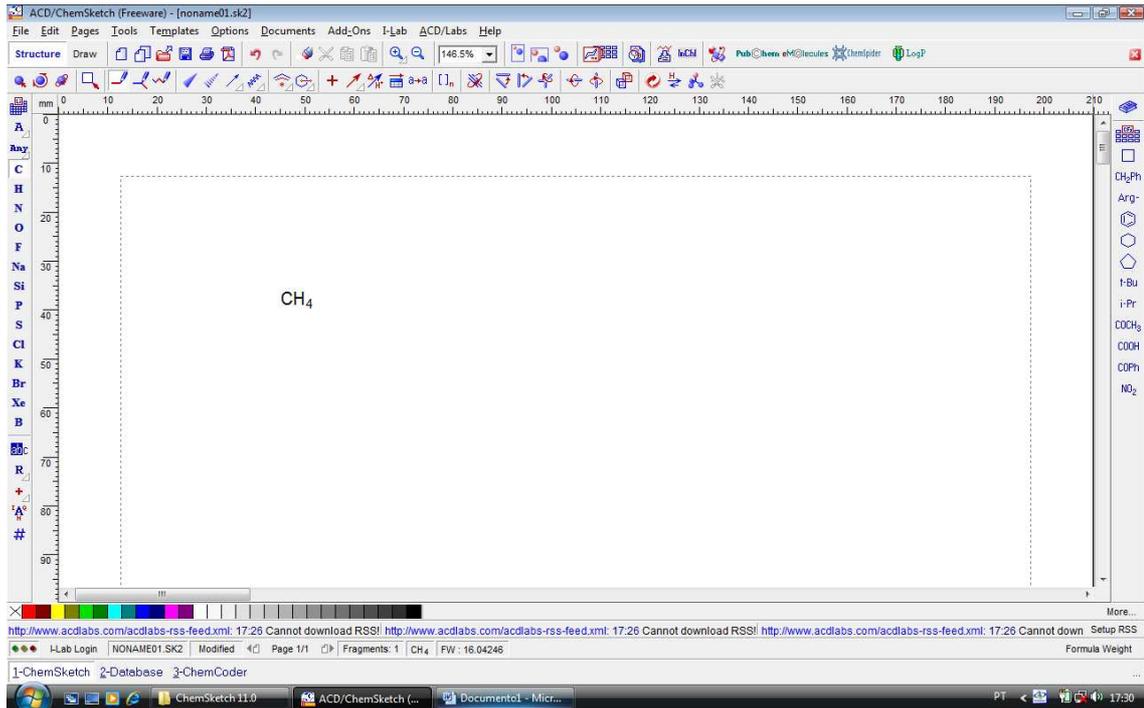


Figura 6: gás metano (CH₄) – fórmula molecular
 Fonte: Tela capturada do software ChemsSketch 11.0

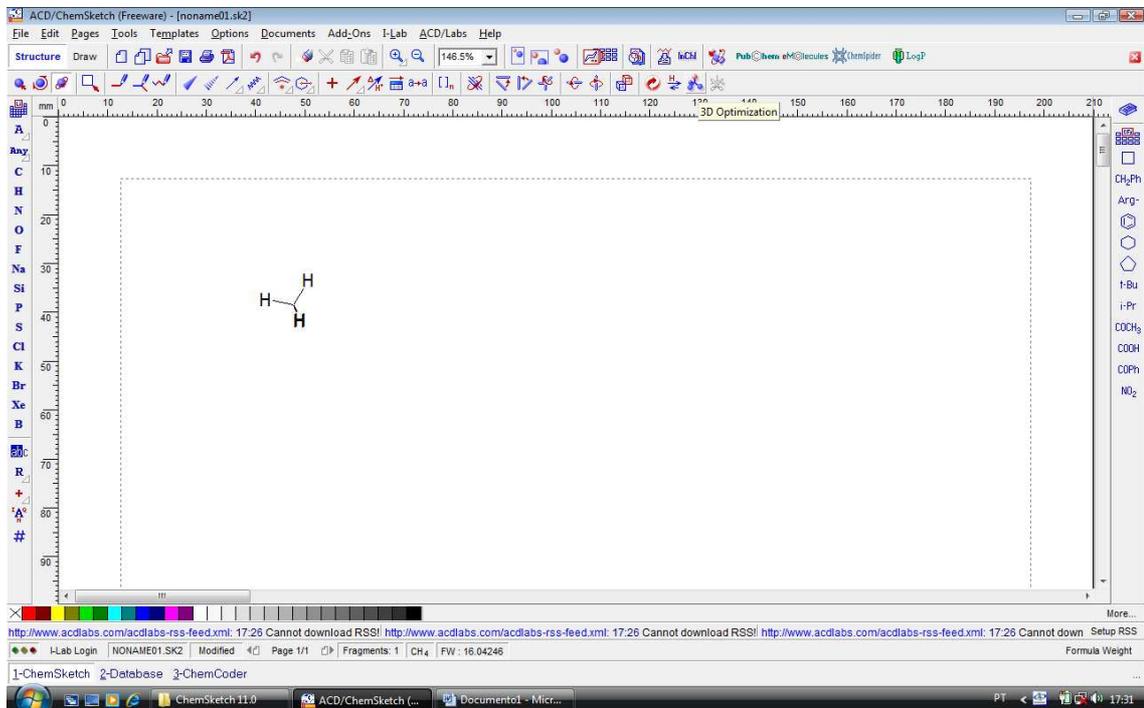


Figura 7: gás metano (CH₄) – fórmula estrutural
 Fonte: Tela capturada do software ChemsSketch 11.0

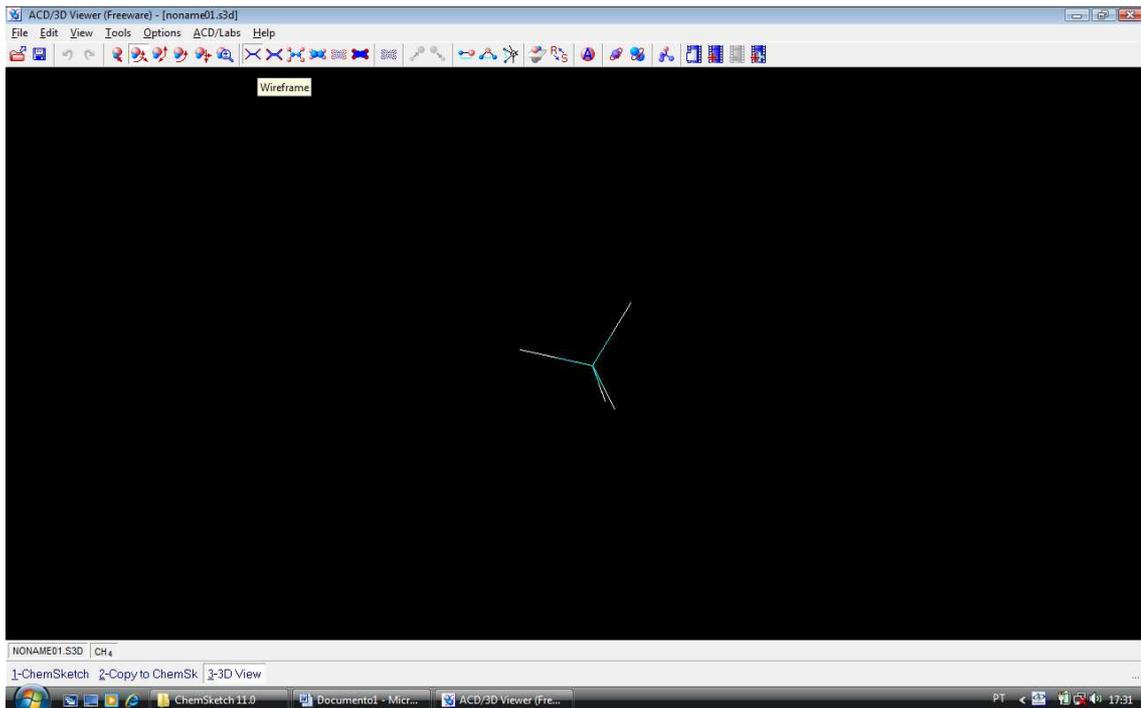


Figura 8: gás metano (CH₄) no modelo Wireframe (arame)

Fonte: Tela capturada do software ChemsSketch 11.0

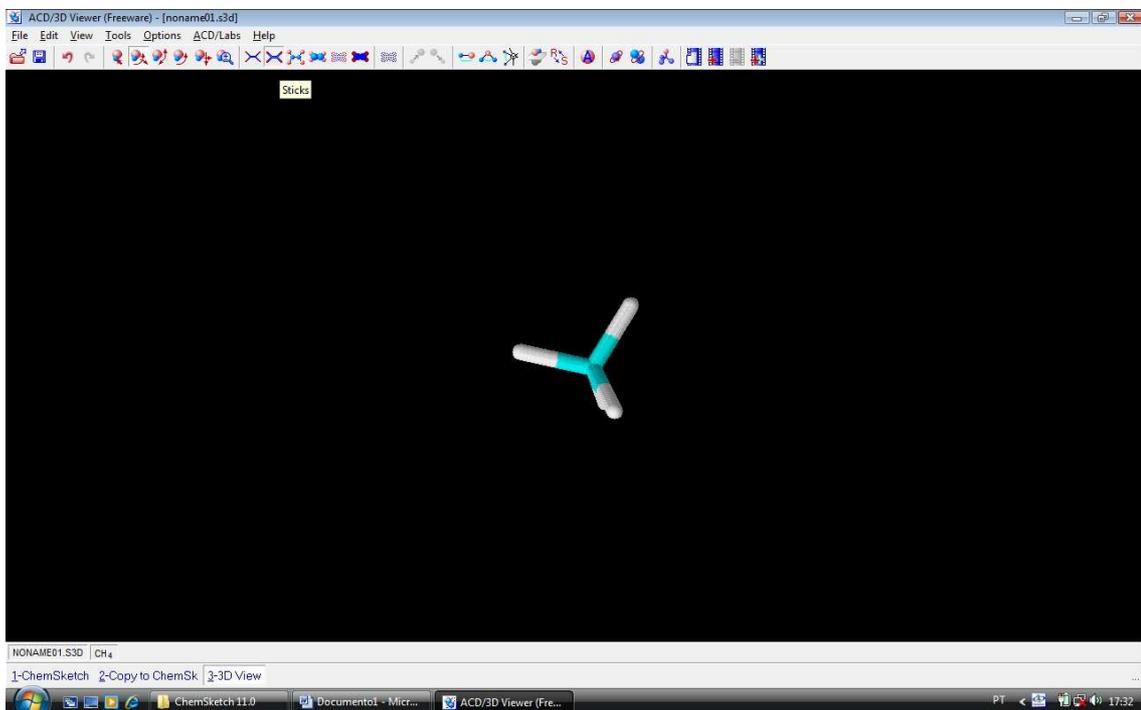


Figura 9: gás metano (CH₄) no modelo Stick Only (pauzinhos)

Fonte: Tela capturada do software ChemsSketch 11.0

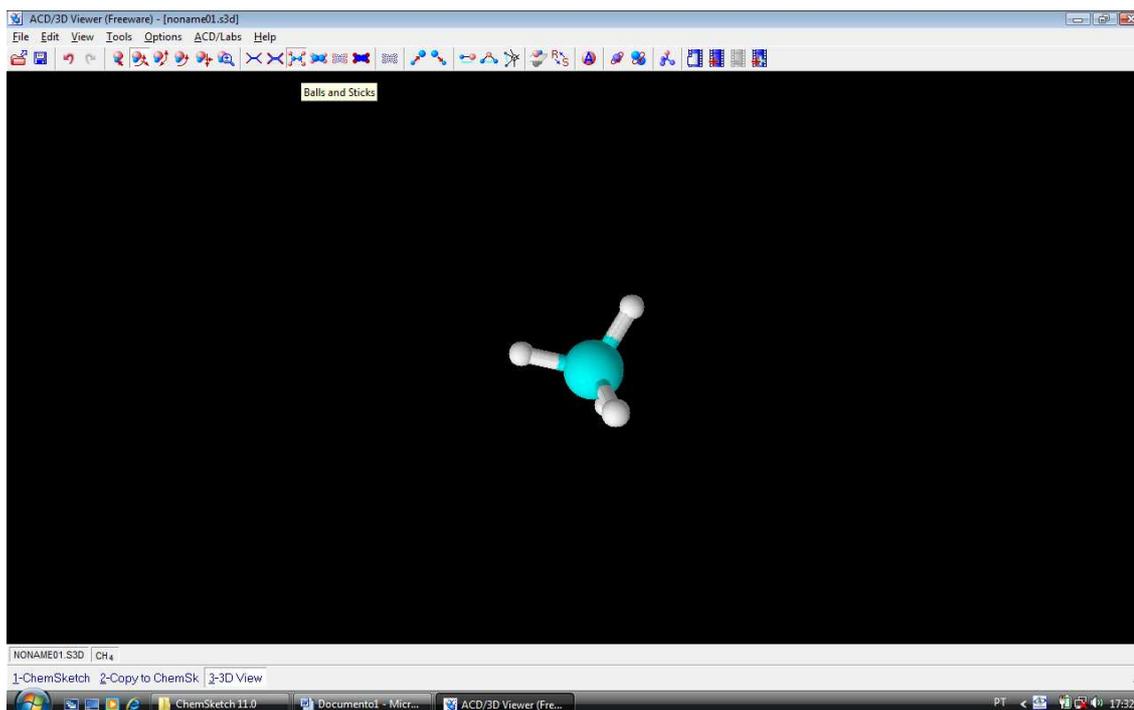


Figura 10: gás metano (CH_4) no modelo Balls and Sticks (paus e bolinhas)

Fonte: Tela capturada do software ChemsSketch 11.0

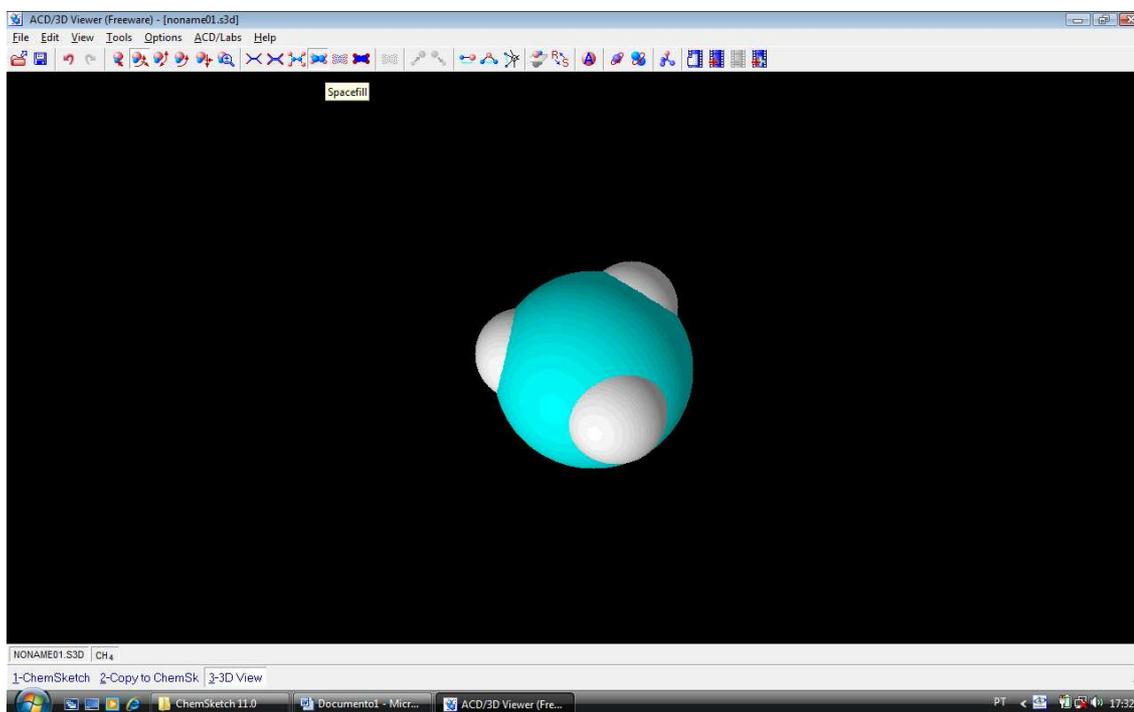


Figura 11: gás metano (CH_4) no modelo Spacefill (sólidos ou CPK)

Fonte: Tela capturada do software ChemsSketch 11.0

5 METODOLOGIA

A pesquisa realizada é do tipo qualitativa, através do estudo de caso que visa a compreensão e aferição não numérica. É esta característica primeira deste tipo de pesquisa que nos propusemos a realizar, utilizando pré e pós-teste, entrevista filmada e simulação computacional, que serviram de instrumentos de compreensão, análise e discussão.

A escolha da investigação qualitativa se justifica, porque a metodologia contempla descrição operacional, a indução, a teoria fundamentada e a visualização espacial.

Os investigadores qualitativos em educação estão sempre a indagar os sujeitos de investigação, como: “aquilo que eles experimentam, o modo como eles interpretam as suas experiências e o modo como eles próprios estruturam o mundo social em que vivem” (PASATHAS, 1973 apud BOGDAN; BIKLEN, 1994, p. 51).

A pesquisa qualitativa tem despertado interesse e aplicabilidade no ensino da química, Santos e Porro (2008) são um exemplo, pois na sua investigação com professores do ensino médio argentino, buscam mostrar o potencial do grupo focal na geração de dados qualitativos e fatores que incidem sobre o ensino de química escolar.

Bogdan e Biklen (1994) definem pesquisa qualitativa de acordo com cinco características básicas:

- A pesquisa qualitativa tem o ambiente natural como sua fonte direta de dados e o pesquisador como seu principal instrumento;
- Os dados coletados são predominantemente descritivos;
- A preocupação com o processo é muito maior do que com o produto;

- O significado que as pessoas dão às coisas e à vida são foco de atenção especial do pesquisador.

Também concordam que a expressão “investigação qualitativa” é um termo genérico que abrange estratégias diversas que compartilham de características comuns (BOGDAN; BIKLEN, 1994, p. 16).

A investigação teve início no dia 26 de maio de 2008, no período da tarde das 14hs às 16hs, durante 08 dias, totalizando 16hs de atividades. Participaram nove (09) alunos da 3ª série do ensino médio, no município de Novo Hamburgo, RS não técnico/químico, através dos seguintes instrumentos:

- *Pré-teste*: Entrevista individual filmada com quatro (04) alunos e transcrita (anexo). Aplicação de atividade de representação (desenho) de três espécies químicas pré-selecionadas e inéditas para todos os participantes;
- *Simulação computacional*: Atividades pré-selecionadas (anexo), utilizando o software ChemsSketch 11.0, interagindo com os modelos representacionais: Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*);
- *Pós-teste*: Entrevista individual (anexo), filmada e transcrita. Aplicação de atividades de representação (desenho): Pós-teste (a) estruturas simples e pós-teste (b) estruturas consideradas complexas. Ambas inéditas.

A investigação obedeceu a uma organização estruturada, com atividades pré-selecionadas, explorando a ferramenta computacional e imagens tridimensionais simples e complexas nos modelos de representação Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*);

Na análise das figuras é utilizado o método hermenêutico, proposto por Mynaio e utilizado por Oaigen (1995), que defende a compreensão e interpretação dos fatos observados. Nesta investigação os fatos observados são as representações simbólicas, pré-teste, pós-teste e entrevistas.

Foi utilizada a entrevista técnica **Think Aloud** que significa “*pensar alto*”. Durante a realização do pré-teste o estudante está sendo entrevistado com a entrevista técnica *Think Aloud*, sendo incentivado por este pesquisador a verbalizar, comentar e justificar cada procedimento feito, enquanto representa a espécie química no plano bidimensional (papel). Entendemos que este tipo de entrevista, possa nos auxiliar na coleta de dados e nos possibilite uma abrangência maior para análise das representações geradas pelos estudantes.

Esta técnica tem sido utilizada com sucesso no ensino da química, Neto, Kreutz e Moreira (2007) no ensino da Isomeria, também Dias e Cardoso (2008) explorando aspectos macro e microscópicos do conceito de equilíbrio químico e de sua abordagem em sala de aula.

5.1 O PRÉ-TESTE

Dos nove (9) estudantes que realizaram o pré-teste foram selecionados, aleatoriamente, quatro (4) para realizarem o pré-teste com a entrevista individual filmada utilizando a técnica *Think Aloud*, com duração de aproximadamente 30 minutos, numa tarde. Utilizaram canetinhas coloridas, lápis e a tabela periódica para consulta.

Em um segundo momento, os cinco (05) estudantes restantes, foram recebidos na sala ambiente, que é uma sala convencional, porém com recursos didáticos e materiais concretos. Utilizaram lápis, canetinhas coloridas e a tabela periódica para suas representações. A tabela periódica auxilia o estudante na determinação do número de elétrons na última camada de valência de um elemento químico representativo, verificando ou consultando a família a que pertencem. Na seguinte tarde, os demais estudantes realizaram o pré-teste, individualmente.

Foram selecionadas três espécies químicas a seguir com geometrias moleculares diferentes, conforme vigência IUPAC, onde foi pedido para que representassem, no papel, estas espécies químicas da forma que desejassem, porém montando sua estrutura tridimensional.

1º) H_2S - geometria molecular angular;

2º) SOBr_2 - geometria molecular piramidal;

3º) PO_2Cl - geometria molecular trigonal plana.

Na revisão – Geometria Molecular, foram simuladas espécies químicas mais trabalhadas no ensino médio (veja apêndice), utilizando o software – ChemsSketch 11.0, interagindo com os modelos representacionais: Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*); na tentativa de compreensão da razão da sua geometria molecular analisando imagens bidimensionais e tridimensionais. As espécies químicas utilizadas no pré e pós-teste não foram utilizadas como exemplo; tornando-as inéditas na aplicação.

Durante a realização do pré-teste os alunos foram dispostos separadamente, na sala ambiente e cada estudante utilizou uma tabela periódica para consulta. Não houve nenhum tipo de apoio ou interferência durante a realização das representações, predominando a individualidade do estudante.

5.2 A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Na sala de informática, os estudantes revisaram os principais tipos de geometrias moleculares: angular, trigonal plana (triangular), piramidal e tetraédrica, foi utilizado o quadro negro e exemplos de estruturas moleculares, utilizando a formulação de Lewis e a formulação estrutural.

A revisão teve duração de (2) períodos, totalizando 90 minutos, onde a ênfase foi a representação de espécies químicas no plano bidimensional, em seguida no plano tridimensional desenhados no quadro-negro e no papel, com isto,

identificando o tipo de geometria molecular. Algumas espécies químicas como: H₂O, CO₂, NH₃ e CH₄ e outras (anexo), seguindo as geometrias já citadas.

Após, tiveram o primeiro contato com o programa Chems sketch 11.0, que inicialmente, foi demonstrado os recursos simples de representação bidimensional, em seguida a transformação da mesma estrutura para o plano tridimensional, utilizando os recursos do programa e os modelos representacionais: wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*).

Este primeiro contato com o programa baseou-se nas descobertas e manipulação dos dispositivos e recursos que o programa oferece. Foi observada, desde o início das simulações a motivação e a empolgação dos estudantes que em nenhum momento, expressaram dificuldades de manipulação e interação com o programa.

A sala de informática é ampla, estruturada com monitor permanente. Conta com vinte (20) terminais de computação, o que permitiu um computador para cada estudante disposto distantes um do outro, a fim de preservar e estimular a interação individualizada com a ferramenta computacional.

As simulações computacionais ocorreram à tarde, das 14hs às 16hs, durante oito (08) dias úteis letivos, onde a sala de informática foi de uso exclusivo para esta investigação. A cada encontro, foram fornecidas atividades contendo exemplos de espécies químicas que aumentavam, gradativamente, o grau de complexidade, para que fossem representadas bidimensional e tridimensionalmente, simuladas e observadas nos modelos de representação wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) e Spacefill (*sólidos ou CPK*).

5.3 O PÓS-TESTE

O pós-teste foi realizado em uma tarde, na sala ambiente das 14hs às 15:30hs, com seis (06) espécies químicas no total, dividido em duas partes.

Na primeira parte constam três (03) espécies químicas, consideradas simples: NOCl (geometria angular), SOCl₃ e CCl₂F₂ (geometria tetraédrica), cuja a tarefa é representá-las, no papel sua estrutura tridimensional, destacando a geometria molecular correspondente às citadas na revisão pré-teste.

Sobre a espécie SOCl₃ vale a ressalva de que foi escrita, propositadamente dessa forma, em vez de SOCl₂. Os motivos destas expressões foram de ordem exploratória, baseado na utilização da teoria do Octeto, basicamente, para todas as representações no pré-teste. Essa espécie química, em especial, permite testar o estudante na conectividade química e aplicação efetiva da teoria do Octeto.

Além disso, caso escolha acertadamente, representar a espécie SOCl₂ obterá uma geometria trigonal plana com conectividade correta, mas se optar pela espécie SOCl₃ resultará em irregularidades na geometria molecular (tetraédrica) e conectividade atômica, conseqüentemente, o uso da teoria do Octeto não será efetivo.

Analisando o pós-teste verificamos que quatro (04) estudantes dos nove (09), optaram pela representação do SOCl₃.

A segunda parte pós-teste é composta de estruturas orgânicas complexas que são: CO(NH₂)₂, C₂H₅ON, CH₂CHCH₂CHO. Objetivando que fossem representadas no papel, utilizando um dos modelos representacionais do programa ChemSketch 11.0, seja: Wireframe (*arame*), Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), Stick Only (*pauzinhos*) ou Spacefill (*sólidos ou CPK*) à livre escolha do estudante. Todos utilizaram canetinhas coloridas para suas representações no papel.

Estes modelos representacionais citados são formas de representações simbólicas dos compostos químicos orgânicos e inorgânicos, mais conhecidos e utilizados no ensino médio e acadêmico. Não representam de forma verídica o formato real atômico, entretanto fomenta a visualização macroscópica, uma vez que a Química é essencialmente uma ciência empírica e simbólica.

5.4 AMOSTRA

Os critérios para a escolha da amostra prevaleceram os seguintes fatos:

- Estudantes de escola não técnica na área da Química;
- Estudantes da mesma escola e mesma turma;
- Estudantes que realizaram trabalhos de pesquisa, envolvendo conhecimentos básicos de informática. Mantendo o anonimato, estes estudantes serão identificados como: AP, DIE, DIO, KE, JU, VA, TA, LE, DOU.
- Desconhecimento do software Chems sketch 11.0.

Foram utilizadas duas salas: sala ambiente e sala de informática. Na sala ambiente ocorreram pré e pós-teste e entrevistas filmadas, e na sala de informática a manipulação do software Chems sketch 11.0.

É distribuído gratuitamente para área do ensino e pesquisas na química, e permite ao usuário construir, navegar e visualizar estruturas químicas bidimensionais e tridimensionais. A interface fornece um portal para uma gama de ferramentas analíticas, que facilita o processo de transformação estrutural ou de análise de dados.

A área de trabalho é grande e localiza-se no meio da tela, onde as estruturas são desenhadas. A barra "Structure" fornece uma interface onde contém ferramentas (barra esquerda) para desenho e manipulação de estruturas químicas bidimensionais. Há uma tabela periódica dos elementos atualizada, que fornece informações específicas atômicas, por exemplo: número atômico, eletronegatividade, massa atômica, configuração eletrônica, densidade, estado de oxidação e outros. A direita da janela contém a barra de radicais orgânicos, complementada por uma tabela de radicais orgânicos simples e complexos.

O software permite recursos de confecção de espécies químicas utilizando a formulação molecular no plano, mas contém outro dispositivo chamado *3D Optimization*, na barra de ferramentas superior, que coloca a espécie química na formulação estrutural em planos distintos, evidenciando a repulsão entre os átomos e a sua estrutura no espaço. A tridimensionalidade da espécie ocorre após acionar o botão *3D Viewer*, onde a interface se transforma ,contendo uma única barra de ferramentas de manipulação 3D. Teclando a barra “draw” surge outra interface de apoio ao desenho, com figuras geométricas planas, polígonos, setas, curvas, e outros. Neste software há um recurso chamado *measure bond angle* que calcula o ângulo entre três átomos, entretanto este recurso não foi utilizado pelos estudantes, pois se priorizou a aferição qualitativa visual prévia do conceito de ângulo.

Dentre as ferramentas úteis, como rotação, ângulo, coloração, destacamos os modelos representacionais utilizados nesta investigação: *Wireframe (arame)*, *balls and Sticks (paus e bolinhas)*, *Stick Only (pauzinhos)* e *Spacefill (sólidos ou CPK)*.

Nas figuras a seguir, reproduzimos através de um exemplo aleatório do gás metano (CH_4), o mecanismo descrito para facilitar o entendimento.

Na interface do Chems sketch 11.0, está representada a fórmula molecular do gás metano (CH_4), observe figura (6); a seguir na fórmula estrutural tridimensional, observe figura (7); após segue o gás metano representado no modelo wireframe (*arame*), figura (8); no modelo *Stick Only (pauzinhos)*, figura (9), no modelo *Balls and Sticks (paus e bolinhas)*, figura (10) e por último no modelo *Spacefill (sólidos ou CPK)*, figura (11).

6 ANÁLISES

Neste capítulo será apresentada a análise dos resultados, obtidos no pré-teste e pós-teste de todos os participantes. Também, consideramos as afirmações expressas pelo estudante nas entrevistas pré e pós-teste, no qual compõem a análise e discussão dos resultados.

6.1 ANÁLISE AP

6.1.1 Pré-Teste AP

Durante o pré-teste, a estudante inicia a tarefa de desenhar as estruturas geométricas utilizando a fórmula de Lewis. Ela solicita a tabela periódica a fim de consultar o número de elétrons do enxofre, e desenha os 3 átomos do H_2S de forma plana, observe figura 12, mas respeitando a regra do Octeto. Ao ser perguntada se a mesma julga aquela forma linear a correta, ela responde que sim, pois *“esteticamente fica mais apresentável”*.

1º) H_2S

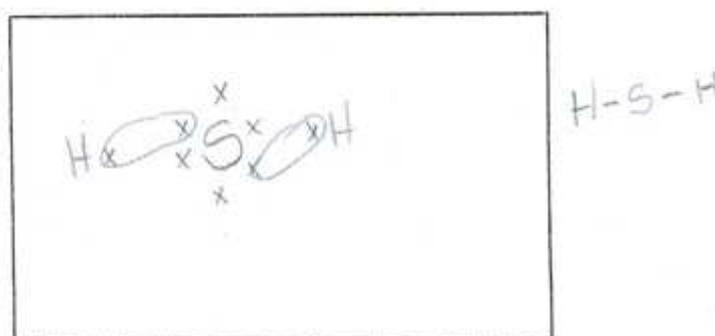


Figura 12: Pré-Teste AP

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Em seguida, quando solicitado o desenho do $SOBr_2$, observe figura 13 a estudante tenta colocar cada átomo nos vértices de um quadrado, apagando o desenho e desenhando a molécula linearmente, mas com a diagramação da regra do Octeto correta. Ao ser perguntada na entrevista do porquê de ter apagado o quadrado, ela afirma que não conseguiria ligar Br com Br pois *“O bromo precisa de*

uma ligação para fechar oito". Em seguida, ela escreve Br-O-S-Br, utiliza a diagramatização de Lewis para computar a regra do Octeto para cada átomo, e observa que consegue fazer com que cada um dos átomos se encontre dentro da regra do Octeto. Ela afirma "Não importa se ta organizado ou não. Depois que descobri como fecha o octeto, aí é que vou ver como fica a geometria".

2º) SOBr₂

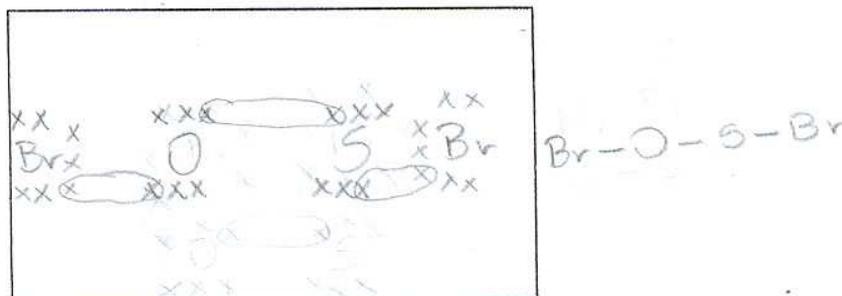


Figura 13: Pré-Teste AP

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Dessa forma, pode-se perceber que a estudante utiliza o conjunto de representações que se refere ao conceito de regra do Octeto. Este conjunto de representações inclui cruzeas dispostas ao redor de cada átomo, representando elétrons de valência bem como círculos, elipses que são traçadas ao redor de duplas de cruzeas entre diferentes átomos, representando o compartilhamento de elétrons entre diferentes espécies. Estas elipses são traçadas após a constatação que o átomo não consegue completar sua camada de valência com oito elétrons apenas com os seus elétrons, necessitando de elétrons de átomos geometricamente vizinhos. Após a manipulação desta representação, que é utilizada para verificar se a espécie molecular apresenta camadas de valência "fechadas" - ou seja, com oito ou dois elétrons, no caso do hidrogênio - a estudante deveria partir para a análise da distribuição espacial das ligações, utilizando conhecimento do número de ligações entre cada átomo, bem como a existência de pares isolados. Contudo, a estudante se dá por satisfeita em manipular a representação que leva à completeza na regra do Octeto apenas, e julga que esta condição é suficiente para descrever a geometria molecular tridimensionalmente.

Kozma, Chin e Russel (2000) argumentam que a química se desenvolveu, no último século, utilizando informações advindas de instrumentos que de alguma forma faziam medidas que de outra forma eram inacessíveis aos sentidos. Estas medidas (como de espectrômetros de massa, RMN, e outras formas de espectroscopia) eram representadas por traços e linhas, que tinham que ser sistematizados e compreendidos posteriormente. Ao desenvolver o modelo teórico que conseguia fazer previsões acuradas dos resultados mensurados, foram criadas novas representações, estas do mundo microscópico, que serviam para que a mente pudesse manipular estas representações e fazer previsões a respeito do comportamento cinético-molecular ou macroscópico das espécies analisadas. Assim, a química passou a ser uma ciência que faz uso de múltiplas representações que devem ser processadas de forma independente, bem como “traduzidas” (termo utilizado pelo próprio Kozma e Russel (1997)) entre si.

Claramente a estudante trabalha para dominar a representação associada à regra do Octeto, que visa fornecer um modelo computável mentalmente para que possa se avaliar se um conjunto de átomos forma uma molécula no sentido de Lewis: Onde todos os seus átomos completem, pelo compartilhamento de elétrons, suas camadas de valência. Contudo, um novo passo é necessário: partindo da conectividade entre os átomos (vizinhança) dada pela representação final obtida da aplicação da regra de Lewis, deve-se estimar mentalmente o afastamento entre as espécies atômicas decorrente da formação de ligações (número) e de pares isolados ao redor de um determinado átomo.

A estudante, portanto, não chega nem sequer tentar estimar a configuração tridimensional da espécie molecular a partir da informação resultante da aplicação da regra de Lewis.

Finalmente, ao tentar representar a última espécie: PO_2Cl , figura 14 a estudante inicia tentando utilizar o átomo de cloro, “*por ter mais elétrons na última camada*”. Percebe que eleger o átomo de cloro como um átomo central na composição da regra do Octeto não é uma boa idéia, pois “*Não, ta mais quando a gente pensa que ele tem mais elétrons na última camada é provável que ele vai ligar*

com um monte de coisa, mas já que ele tem mais é provável que ele ligue com menos”. “Então eu não posso iniciar com cloro (risos)”. Assim, ela utiliza o átomo de Fósforo, que em geral tem 05 elétrons na camada de valência, e, portanto, necessita fazer 03 ligações. Percebe-se aqui que a estudante ainda não domina totalmente todos os invariantes operatórios necessários à construção correta da estrutura de Lewis.

3º) PO_2Cl

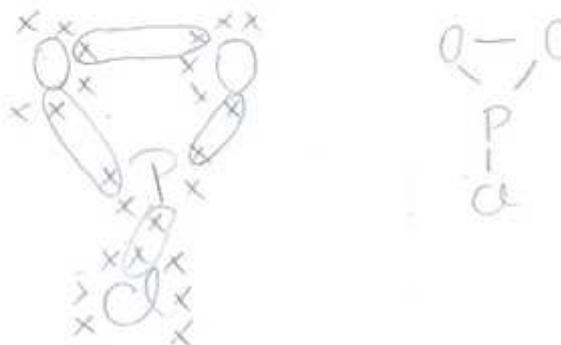
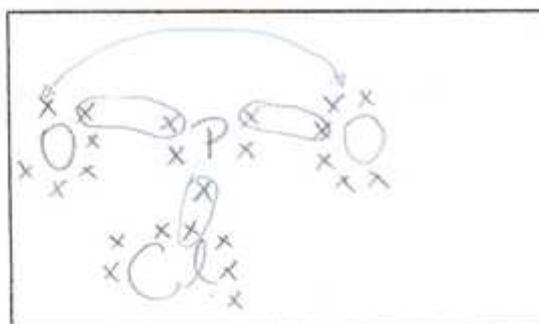


Figura 14: Pré-Teste AP

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.1.2 Pós-Teste AP

No pós-teste, a estudante utiliza a forma estrutural 2D para representar as moléculas tridimensionalmente, observe figuras 15 e 16 que requer o desenho usando um dos formatos, utilizados no Chemskech, a estudante utiliza o modelo *paus e bolinhas*. Agora as espécies têm cores diferentes e também símbolos (letras) dentro de cada bolinha (que representa as espécies atômicas). Não é representado, como ocorre no modelo computacional, os tipos de ligações entre os átomos. A distribuição espacial geométrica tem o arranjo correto em termos de escolha das

espécies vizinhas, mas não apresenta os ângulos corretos entre as ligações. Não se percebe em nenhum lugar do desenho a existência de pares isolados, bem como no programa utilizado. De fato, o ângulo correto entre as ligações só pode ser estimado após a correta avaliação do número de pares isolados que cada átomo apresenta naquela estrutura molecular específica. Pode-se concluir que a estudante não utiliza pares isolados (não é mencionado em nenhum momento na sua entrevista), o que não causa surpresa, visto que o software utilizado não apresenta este elemento representacional nos modelos visualizados.

Durante a entrevista pós-teste, a estudante indica que prefere trabalhar com o modelo *paus e bolinhas*. Ela considera o modelo *“mais bonitinho”*. Comenta que o modelo *sólidos* *“é mais gordinho, tu não sabe quando ele inicia e quando termina”*. Também complementa *“Só dá pra visualizar a ligação dupla aqui (aponta para o modelo arame). Mas este aqui é melhor (modelo paus e bolinhas)”*. Há indicações claras que a estudante compreende a necessidade de compatibilizar a estrutura geométrica, pós a utilização da regra de Lewis, ou seja, de um domínio representacional geométrico. *“No programa aprendi que tinha ângulos”, “...Antes de trabalha com o programa achava que tudo era no mesmo plano, linear, mas tudo no mesmo plano”*.

Além disso, durante sua representação da espécie CCl_2F_2 , observe figura 15 a estudante desenha dois pares de linhas de comprimento diferente. Em suas palavras *“... o flúor está atrás ou na frente. Tá era pra ser em 3D mesmo”*. A estudante complementa dizendo que o cloro e o flúor não estão no mesmo plano. A estudante consegue predizer corretamente a coloração espacial de cada espécie atômica, mas nem sempre consegue prever corretamente o ângulo de ligação, como já discutido anteriormente.

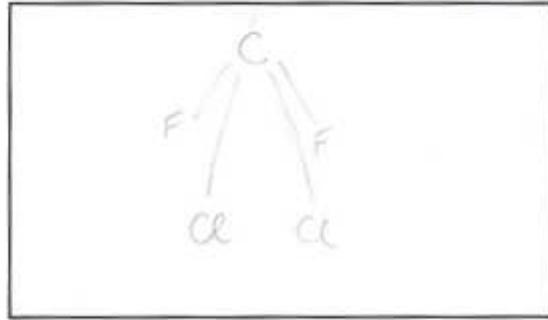
3º) CCl_2F_2 

Figura 15: Pós-Teste AP

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Concluimos que a estudante evolui de um trabalho no pré-teste onde apenas os elementos representacionais de Lewis são trabalhados a fim de completar a regra do Octeto nos átomos para um modelo mais complexo, onde não apenas completar a referida regra é suficiente (que aparenta estar internalizada, pois não fora representada no pós-teste, mas todas as espécies apresentam-se com a camada de valência completa). De fato, a estudante fornece evidências claras que as espécies precisam ser avaliadas tridimensionalmente, e demonstra alguns elementos desta tridimensionalidade, como visto nas figuras do seu pós-teste (em especial a figura 16) apresenta um ângulo semelhante a 120° para o NH_2 ; além de comentar a necessidade de desenhar tridimensionalmente as espécies mesmo quando não consegue (CCl_2F_2).

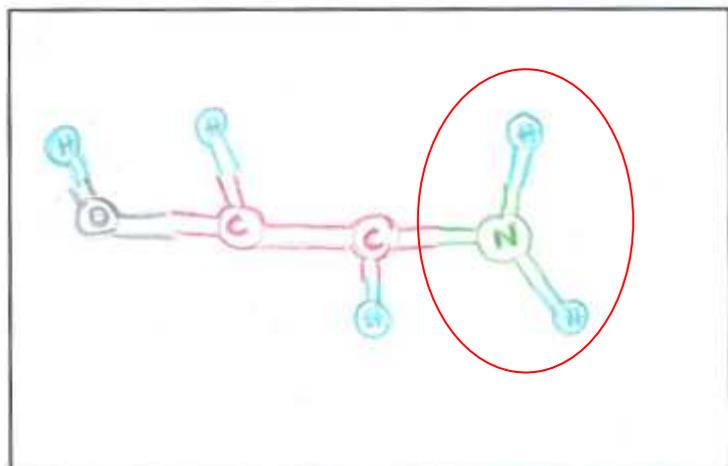
2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$ 

Figura 16: Pós-Teste AP

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.2 ANÁLISE DIE

6.2.1 Pré-Teste DIE

O estudante inicia as representações utilizando a formulação de Lewis, seguido da formulação estrutural. Na representação do H_2S , observe figura 17, inicia com o enxofre e dispõe os hidrogênios um em cada lado, de forma linear. Comenta “primeiramente, vou botar o S (enxofre) no meio pela disposição dos átomos dele, são 06 átomos”. Por que 06 átomos? explica que “pela coluna (família da tabela periódica) que ele se encontra que é 16”. O estudante corrige e verifica a tabela periódica para determinar o número de elétrons na última camada de valência do enxofre.

1º) H_2S

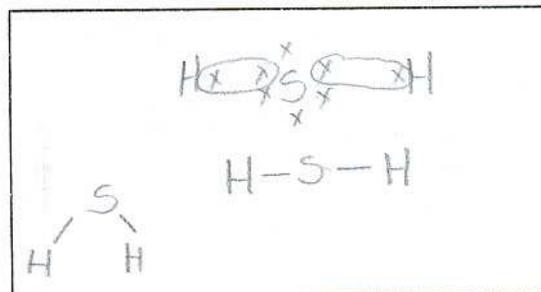


Figura 17: Pré-Teste DIE

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Contudo, retifica a representação linear, refazendo-a formando um ângulo entre os hidrogênios. Explica a mudança “por causa que ele possui quatro elétrons sobrando. Aí tem que formar um certo ângulo”.

Nota-se que o estudante insinua ter internalizado o conceito da Teoria da Repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência, divulgado por Ronald J. Gillespie que na década de 60, criou regras práticas para determinação da geometria molecular de uma série de espécies químicas, tendo como base apenas o número de átomos que possuem e as ligações que o átomo central pode fazer.

Peluzzo e Canto (1999) a mesma teoria diz que os pares de elétrons

existentes ao redor do átomo central de uma molécula também tenderão a se afastar ao máximo, porque possuindo todas cargas de mesmo sinal (negativo), eles se repelem mutuamente.

Na representação da segunda espécie química SOBr_2 , figura 18 segue o mesmo tipo de representação (Lewis e estrutural), respeitando a Regra do Octeto para todos os átomos da molécula, não estão dispostos linearmente, não há elemento central nem tampouco algum modelo de geometria molecular conhecida. Os elementos formam ângulos entre si, consecutivamente, comenta “a mesma angulação do primeiro”. Indagado: ângulos entre quem? Diz “Entre o S e Br, entre o S, O e Br, formando um ângulo pelo fato do S sobrar mais uns elétrons aqui”, entendendo estar corretamente representada.

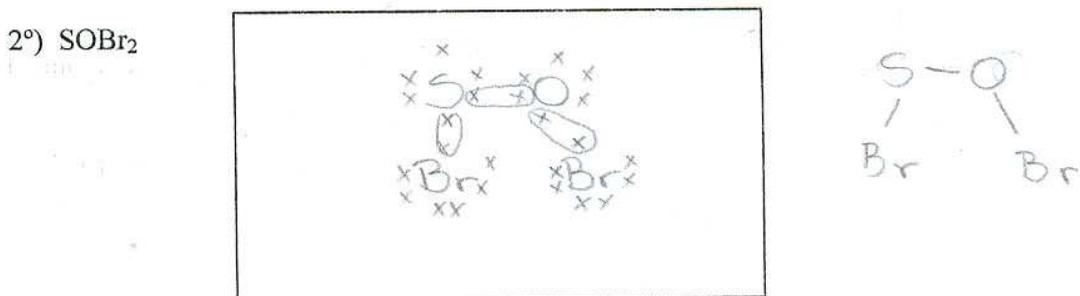


Figura 18: Pré-Teste DIE

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Por último, a representação do PO_2Cl o aluno dispõe os elementos formando um “quadrado”, onde cada vértice é ocupado por um átomo da espécie química em questão, há erros de conectividade química, pois a espécie contém somente um átomo de cloro e não dois como representado pelo estudante, também a regra do Octeto é violada, o estudante não percebe que ultrapassou o número de elétrons na camada de valência do elemento Fósforo, observe figura 19.

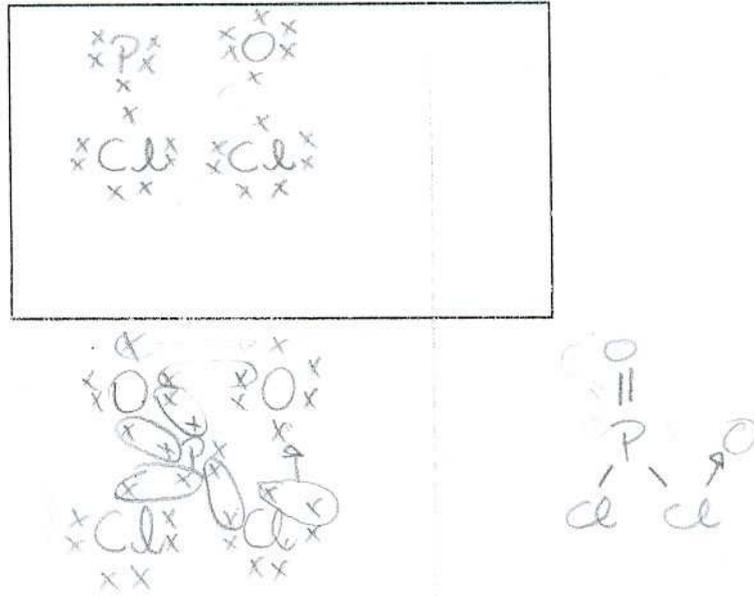
3º) PO₂Cl

Figura 19: Pré-Teste DIE

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

De acordo com a Teoria da Repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência, já citada, leva-se em consideração a quantidade de pares de elétrons que existe na camada da valência do *átomo central* da espécie química. Observando as representações, percebemos que o estudante colocou o átomo central, somente na primeira espécie (H₂S), não ocorrendo nas demais. Indagado sobre a mudança de critério o estudante comenta “coloquei, no primeiro exemplo, o S no centro porque os hidrogênios não poderiam fazer uma ligação simples com o S. Aqui (SOBr₂) não usei nenhum central, porque o O e o S têm o mesmo número de elétrons, faltando apenas um elétron pra completar o octeto do Br”.

Concluimos que o procedimento adotado pelo estudante para suas representações é insuficiente para explicar e/ou representar, seguramente, as espécies químicas, considerando os pares de elétrons dos átomos centrais das espécies químicas (TRPECV), pois carece de maior compreensão conceitual e aplicação.

6.2.2 Pós-Teste DIE

No pós-teste o estudante escolhe o modelo *paus e bolinhas*, “*porque vejo melhor a disposição dos átomos, a visualização é boa e dá pra distinguir bem os átomos*”, mas considera o modelo *arame* o melhor. Por quê? “*Pelas ligações*”. Também faz um breve comentário sobre cada modelo representacional “*acho que o modelo arame deveria ter mais textura e o modelo paus e bolinhas deveria conter as ligações pi e dativas. Quanto ao modelo sólidos (CPK), fica difícil de distinguir os átomos ligantes e ligações no pauzinhos também*”.

Realmente, no pós-teste observamos que as representações feitas mesclam o modelo *paus e bolinhas*, utilizando esferas com o símbolo do átomo em diversas cores, é explícita a ligação pi, que somente são visíveis no modelo *arame*, observe figura 20.

1º) NOCI

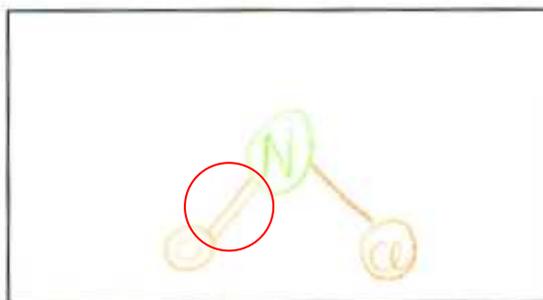


Figura 20: Pós-Teste DIE

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Justificando suas escolhas comenta “*procurei fazer, conforme o programa. Mas é difícil!*”. Outra evidência da influência do programa nas representações do estudante foi a seqüência em “zigzague” de carbonos. “*É familiar pelo programa, se não tivesse trabalhado nele, faria tudo em linha reta*”.

Um fator nos faz acreditar na representação tridimensional: A linha pontilhada e tamanhos diferentes das ligações pertinentes do CCl_2F_2 observe figura 21, não ocorrido no pré-teste. Sobre a questão da perspectiva comenta: “*ampliei mais o senso da imaginação e consigo, mais ou menos, imaginar como é que seria*

só olhando pra fórmula”.

3º) CCl_2F_2

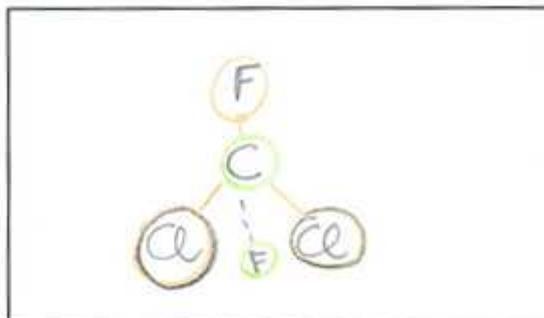


Figura 21: Pós-Teste DIE

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Realmente a regra do Octeto é rigorosamente obedecida no pós-teste, pois na espécie SOCl_3 (propositadamente, expressa com um cloro a mais), observe figura 22, representa-a com dois cloros. Quando indagado diz que “*porque qualquer outro elemento excederia oito elétrons na última camada*”. Percebeu disso na hora? “*sim*”.

2º) SOCl_3

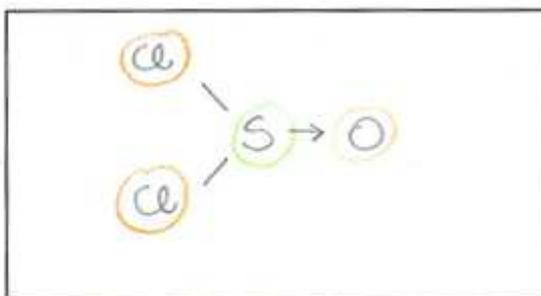


Figura 22: Pós-Teste DIE

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Pelo que foi observado no pré e pós-teste, concluímos que o estudante demonstra claramente uma evolução representacional das espécies químicas desconhecidas por ele. Utiliza cores para diferenciação de átomos, ligações pi explícitas, adoção de um modelo compatível com o programa Chems sketch (*paus e bolinhas*) e forma tridimensional.

Ao final do pós-teste foi capaz de representar a geometria molecular correta

de todas as espécies. Em entrevista pós-teste faz uma auto-análise: *“O depois é bem mais cuidadoso, antes não dava muita bola”*. A auto-análise nos faz acreditar que o estudante faz uso de conhecimentos implícitos evoluindo para conhecimentos explícitos para a representação de estruturas simples e complexas.

Vergnaud (apud MOREIRA, 2002) faz referência a metas e antecipações, que são ingredientes dos esquemas (representações) nos quais o estudante pode descobrir uma possível finalidade de sua atividade e/ou esperar certos efeitos ou certos eventos. Também considera o conhecimento em ação (teorema em ação - conceito em ação) a base conceitual, implícita ou explícita, que permite obter informações pertinentes. Em entrevista, fica evidente quando o estudante diz: *“acho que a representação dele pode diferenciar o estado físico da estrutura em função da geometria”*.

Finalmente, concluímos que o estudante expõe conhecimentos contidos nos esquemas (representações) como angulação e tridimensionalidade tornando-os explícitos, através das representações das espécies químicas inéditas, admitindo que a conceitualização da organização atômica (geometria molecular), possa influenciar as propriedades físicas ou químicas da espécie, corroborando decisivamente com a teoria dos campos conceituais de Vergnaud.

6.3 ANÁLISE DIO

6.3.1 Pré-Teste DIO

No pré-teste o estudante utilizou a formulação estrutural para todas as representações químicas propostas.

1º) H_2S

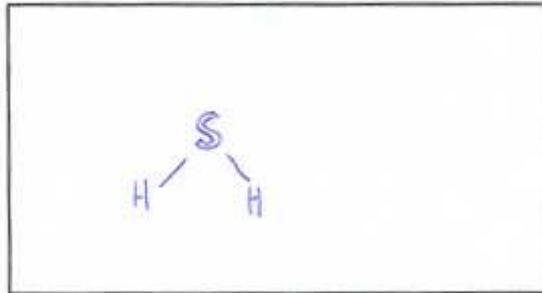


Figura 23: Pré-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2º) SOBr_2

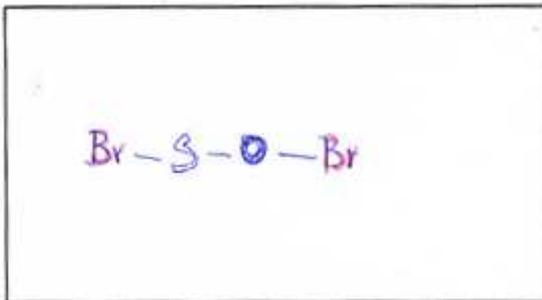


Figura 24: Pré-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3º) PO_2Cl

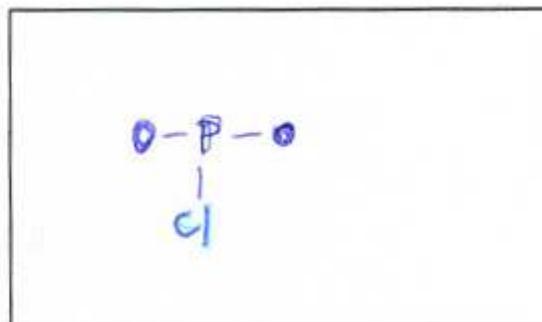


Figura 25: Pré-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Desenha, acertadamente, a geometria molecular do H_2S , não ocorrendo o mesmo para as demais representações consideradas mais complexas. As ligações químicas são representadas através de “traço” de mesmo tamanho entre os átomos.

Na representação do SOBr_2 , o estudante acomoda os átomos em linha reta (linear). Como o bromo se estabiliza com apenas uma ligação (traço) e o oxigênio, enxofre com duas ligações (traços) o estudante dispõe em cada extremidade o átomo bromo, deixando oxigênio e enxofre entre os dois bromos, com isto, assegura que todos os átomos fiquem com a última camada de valência completa (oito elétrons). Este procedimento confirma a dependência da Regra do Octeto para sua representação, sem se preocupar com a geometria molecular correta da espécie.

6.3.2 Pós-Teste DIO

Em nenhum momento da entrevista pós-teste (anexo) o estudante faz menção aos pares de elétrons do átomo central (TRPECV), entretanto há uma forte evidência do uso da regra do Octeto na representação do SOCl_2 pós-teste. O estudante representa a estrutura com dois cloros, pois percebe que com três não é possível, pois excederia oito elétrons na última camada.

2º) SOCl_2

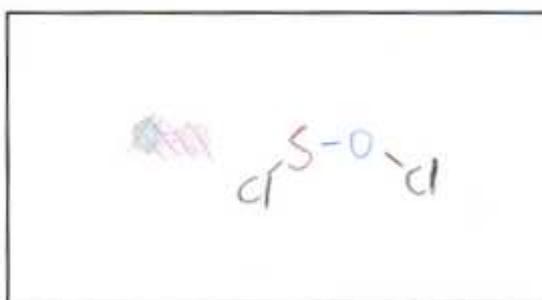


Figura 26: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Ainda no pós-teste, na representação do CCl_2F_2 , o estudante faz uma ligação menor com o carbono e flúor e outra maior entre o mesmo carbono e outro flúor na tentativa de desenhar uma figura tridimensional, pois comenta: “*No papel não dá pra colocar lá atrás*”, depois conclui “*um está lá atrás e outro na frente*”.

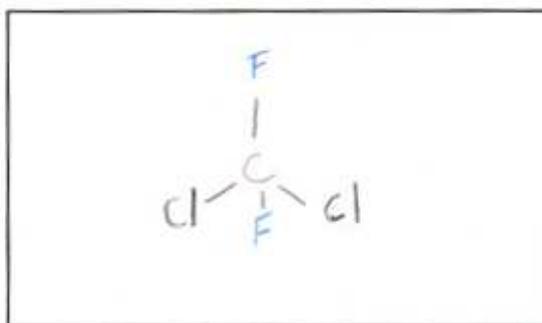
3º) CCl_2F_2 

Figura 27: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Ainda na entrevista ele reconhece que suas representações melhoraram “represento melhor hoje”. No pós-teste (b) é que observamos uma mudança mais acentuada nas suas representações e sugere similaridade aos modelos representacionais utilizados pelo estudante no programa. Indagado sobre o que motivou a representar dessa forma? Responde “O programa”. Também, “Vi no programa algo parecido” e revela ter gostado mais do modelo paus e bolinhas, porque “dá pra definir bem os elementos”. Salienta que as cores é outro fator importante para a visualização e distinguir um elemento do outro, pois “chama mais atenção”. Vê problemas nos outros modelos, diz “Este aqui (sólidos) é muito junto, daí não dá pra distinguir se eles estão ligados ou não” e no modelo arame diz “É bom também, porque dá pra ver ligação dupla e tripla”.

Por fim, o estudante consegue representar todas as espécies químicas do pós-teste (b), consideradas mais complexas, corretamente exceto $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$, mas com riqueza de detalhes que passo a comentar: Utiliza o modelo paus e bolinhas, que considera o melhor modelo, ligações maiores e menores e também átomos maiores e menores. Reforça com um “traço” mais forte, as ligações π e ângulos diferentes de 90° , evidenciando tridimensionalidade. Indagado sobre o que não enxergava antes de usar o programa, e agora o que consegue visualizar melhor, ele responde “Os ângulos e a questão da geometria”.

1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

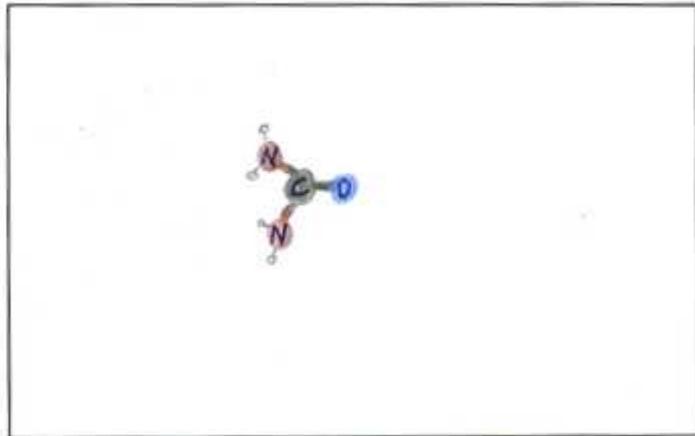


Figura 28: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$

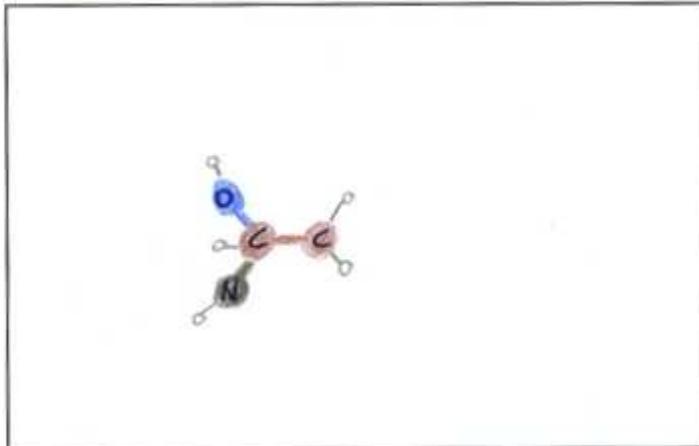


Figura 29: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$

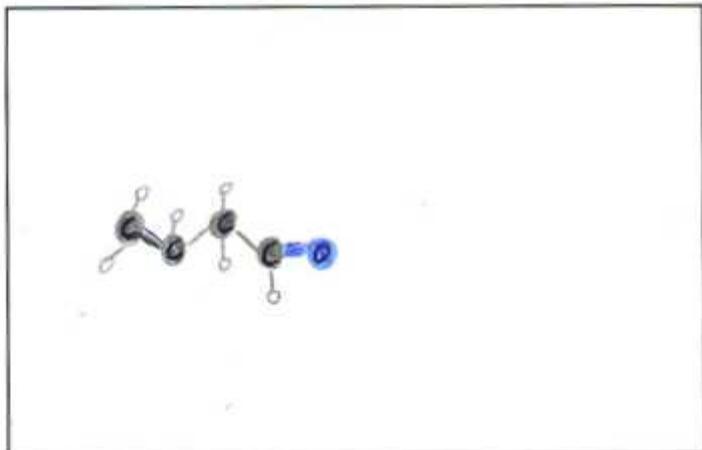


Figura 30: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Contudo, no pós-teste (a), consideradas estruturas mais simples, o estudante não obteve bom desempenho, pois desenha acertadamente a geometria molecular de apenas uma das três espécies químicas solicitadas.

2º) SOCl_2

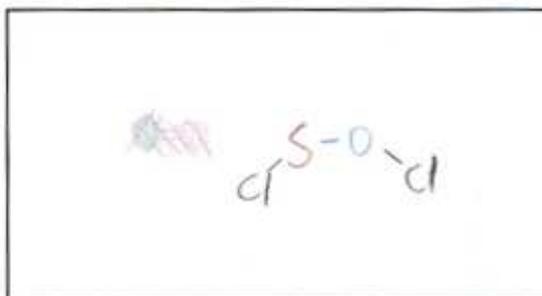


Figura 31: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3º) CCl_2F_2

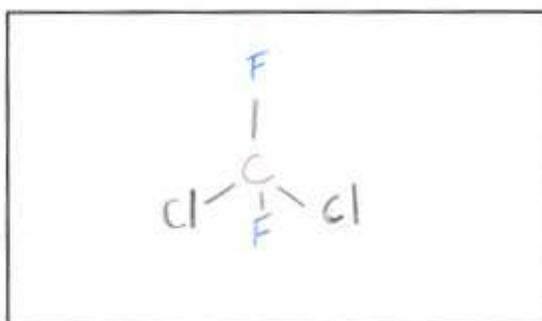


Figura 32: Pós-Teste DIO

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Realmente, houve uma melhora nas suas representações e disposição espacial atômica. Apesar da influência do software de simulação, percebemos a necessidade em aplicar conhecimentos conceituais intrínsecos da geometria molecular nas suas representações, o que justificaria seus acertos. Kozma e Russel (1997) concordam que estudantes têm dificuldades com as representações, até aqueles que de alguma forma, demonstram entender conceitos subjacentes.

6.4 ANÁLISE DOU

6.4.1 Pré-Teste DOU

No pré-teste o estudante representou as espécies químicas utilizando, diretamente, a formulação estrutural. O H_2S , considerada mais simples, foi representado formando um ângulo entre os hidrogênios. Na entrevista pré-teste não menciona nada a respeito dos pares de elétrons do átomo central, contudo a representação da espécie química é acertadamente angular, conforme pode-se na observar figura 33.

1º) H_2S

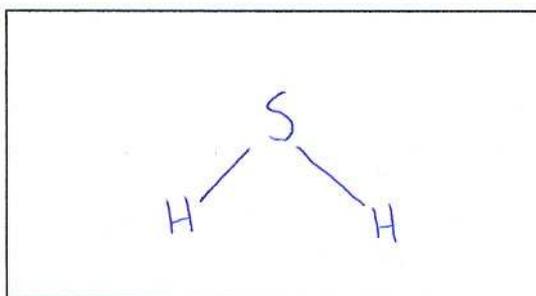


Figura 33: Pré-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Entretanto, nas representações SOBr_2 e PO_2Cl há erros de construção, onde o estudante não aparentemente utilizou critérios de valência (Regra do Octeto). Observe a figura 34, o elemento enxofre e o oxigênio, permitem duas ligações, pois contém 06 elétrons na última camada de valência. No desenho, o elemento enxofre faz três ligações e o oxigênio apenas uma.

Na figura 35, o elemento fósforo excede oito elétrons na última camada de valência, pois permite três ligações para completar o octeto e no desenho apresenta cinco ligantes.

Ambas possuem ligantes ortogonais, observe figuras 34 e 35, o que compromete decisivamente na sua forma geometria.

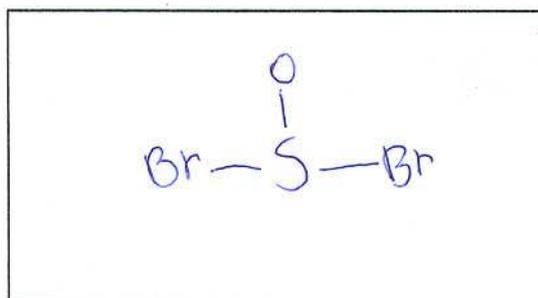
2º) SOBr_2 

Figura 34: Pré-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

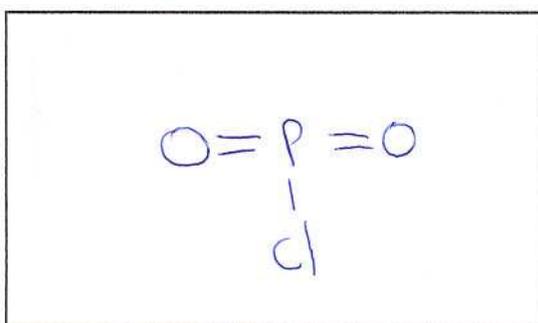
3º) PO_2Cl 

Figura 35: Pré-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.4.2 Pós-Teste DOU

No pós-teste a forma de representação é modificada para uma representação *paus e bolinhas*. Há ligações longas e curtas entre os átomos, nos parecendo que o estudante tenta desenhar em perspectiva, isto é, representando elementos em planos diferentes, o que é confirmado em entrevista “*Sim, eles não estão no mesmo plano*”.

Anteriormente, foi citado que no pré-teste as representações assinalam ângulos ortogonais, exceto H_2S , porém no pós-teste, as espécies químicas SOCl_3 e CCl_2F_2 , observe figuras 36 e 37 o estudante desenha ângulos diferentes de 90° e em perspectiva. Em entrevista atribui ao programa essa mudança “*Tentei representar o elemento com um ângulo mais de cima, como vi no programa*”.

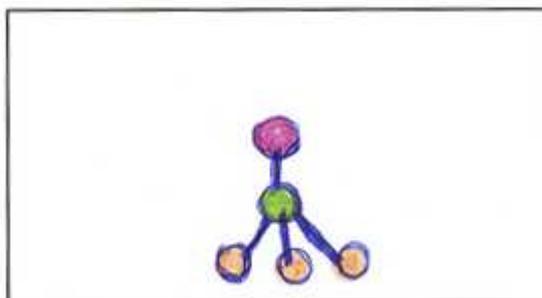
2º) SOCl_3 

Figura 36: Pós-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

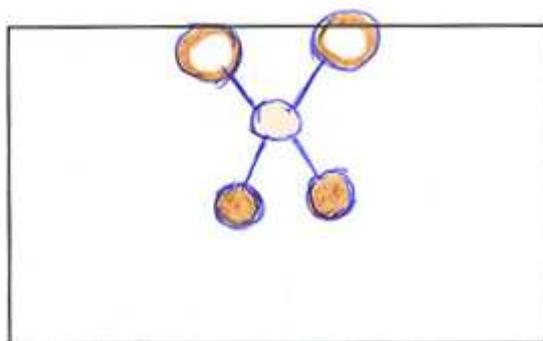
3º) CCl_2F_2 

Figura 37: Pós-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

As representações pós-teste mostram-se mais elaboradas, buscando uma geometria molecular conhecida e desenhos em perspectiva com ligantes maiores e menores entre os átomos. Este conjunto de fatores corrobora com a noção de “profundidade” que legitima a tridimensionalidade.

Em entrevista o estudante não faz referência aos pares de elétrons dos átomos centrais das espécies químicas, o que nos leva a crer que não o utiliza como critério para a correta representação geométrica das espécies químicas propostas.

O estudante reconhece seu despreparo “*Antes de usar o programa não tinha nenhum pingo de noção*”, entretanto faz a seguinte afirmação “*Olha, agora que usei o programa e tal, que tenho uma noção, se tu me desse um composto que nunca vi, eu representaria*”, isto demonstra segurança e a certeza de que o uso do programa contribuiu melhorou sua visão espacial, comenta: “*Além de me dá noção espacial do*

elemento, ângulos e tal, me ajudou bastante na questão de montar as estruturas que nunca vi”.

No último exemplo pós-teste, figura 38, na tentativa de representar a molécula de $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$, considerada complexa, o estudante confirma, claramente, quando diz “*Eu nunca tinha visto este composto e tentei representar assim né*”. Quando indagado se os carbonos estão em linha reta, responde “*reto, reto não estão*”. Pode-se afirmar que o programa influenciou a sua representação, internalizando a angulação entre os carbonos. Em entrevista o estudante confirma “*Vi algo semelhante no programa, uma série de carbonos que, geralmente, não estavam em linha reta*”.

3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$

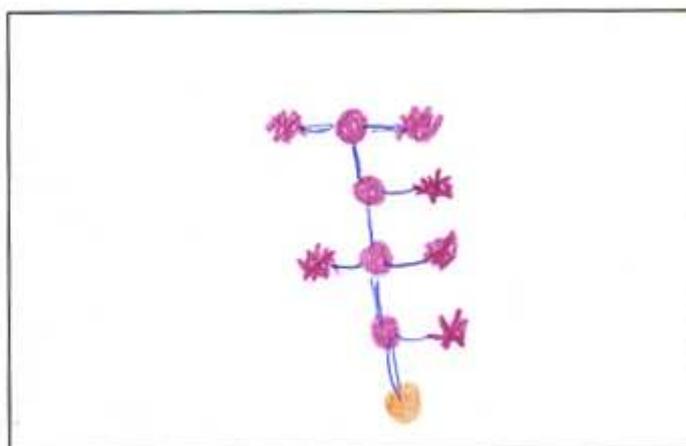


Figura 38: Pós-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Contudo, observando as representações complexas pós-teste (b), observe figuras 39, 40 e 41, o estudante não representa corretamente as espécies químicas solicitadas. Há erros de valências, que já comentamos anteriormente. Também, cria “legenda”, observe figura 39, onde guia o leitor na identificação atômica e na utilização do modelo *paus e bolinhas*, considerando cada elemento químico com esferas, de cores distintas e o elemento hidrogênio de forma “estrelada”. Em entrevista justifica tais procedimentos “*Eu gostei de trabalhar mais no programa com este modelo aqui (paus e bolinhas), porque é mais fácil de identificar cada elemento, hidrogênio, carbono e quase todos os ângulos, também mais fácil de identificar, por*

causa do volume”. Quanto aos demais modelos comenta “*pauzinhos e arame eles representam só um volume e sólidos é volume de mais*”.

Concluimos que houve uma evolução representacional tridimensional nos seus desenhos, refletindo nas estruturas simples e complexas, porém a não observância de conhecimentos conceituais (Regra do Octeto e RPECV), comprometeram a correta representação geométrica das espécies químicas, tais erros já haviam sido constatados no pré-teste e persistem no pós-teste.

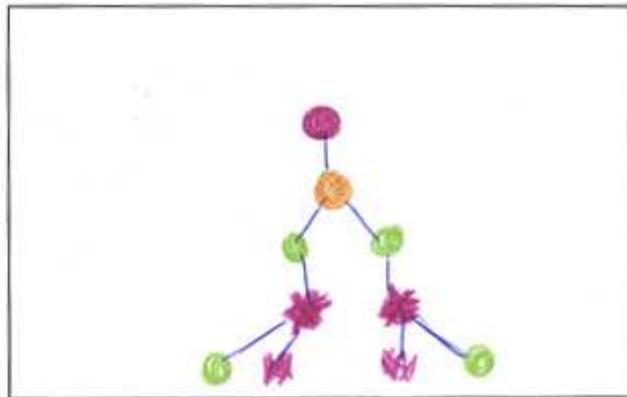
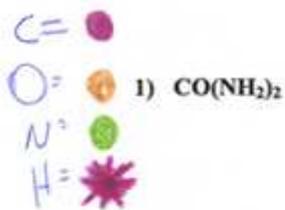


Figura 39: Pós-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

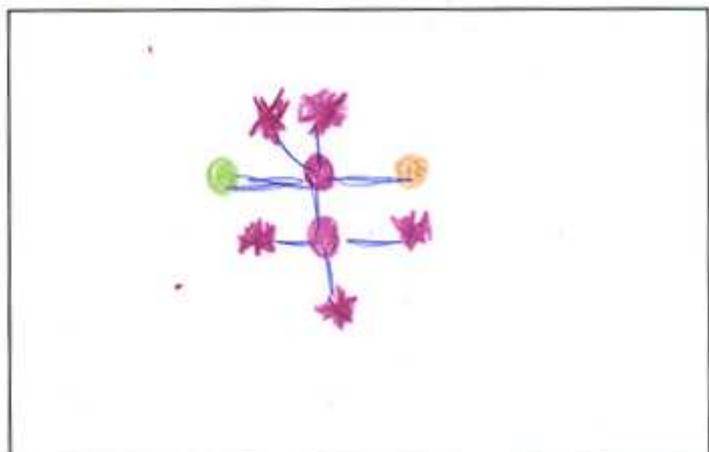


Figura 40: Pós-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$

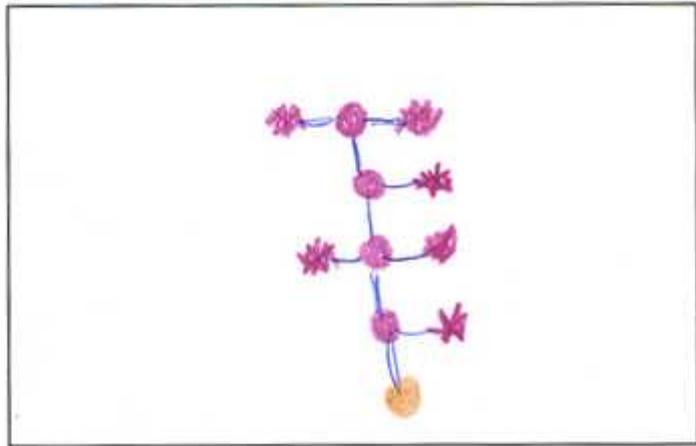


Figura 41: Pós-Teste Dou

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.5 ANÁLISE JU

6.5.1 Pré-Teste JU

Para suas três representações pré-teste utiliza a formulação de Lewis. Consulta a tabela periódica para procurar a família a que pertencem os elementos da estrutura, a fim de saber o número de elétrons na última camada de valência de cada átomo. Representa os elétrons em forma de “x” em volta do elemento químico, após isto, faz as ligações pertinentes envolvendo um elétron de cada elemento, diz “*eu vou fazer a ligação aqui e vai ficar*” 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8”. Seguramente, a contagem até oito revela apoio à regra do Octeto nas suas representações. No final exclama: “*fechou!*”.

Quando questionada quanto à forma linear do H_2S que representou nada suspeita de errado, considerando correta a representação e não faz menção aos pares de elétrons do átomo central, observe figura 42.

1º) H_2S

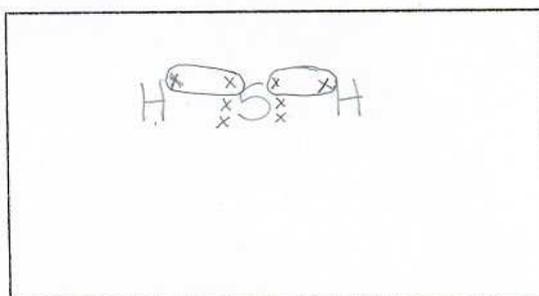


Figura 42: Pré-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

No segundo exemplo $SOBr_2$, considerada mais complexa, a estudante demonstra incorreção na sua representação eletrônica. Não satisfeita, tenta representá-la, ao lado, utilizando a fórmula estrutural plana sem sucesso. A transposição da fórmula de Lewis para a formulação estrutural, não obedece a regra do Octeto como a princípio vinha sendo obedecida, observe figura 43, o átomo de enxofre excede oito elétrons na última camada, isto é, para se estabilizar necessita de apenas dois ligantes e não quatro ligantes como está representado.

Demonstra não estar segura e/ou falta de clareza na aplicação da regra do Octeto, mostra dúvidas nas ligações, ora faz ligação dupla com enxofre e oxigênio (fórmula estrutural) ora faz ligação dativa com enxofre e oxigênio (fórmula eletrônica) e também não há critério quanto disposição ou organização espacial dos átomos comprometendo assim sua geometria molecular.

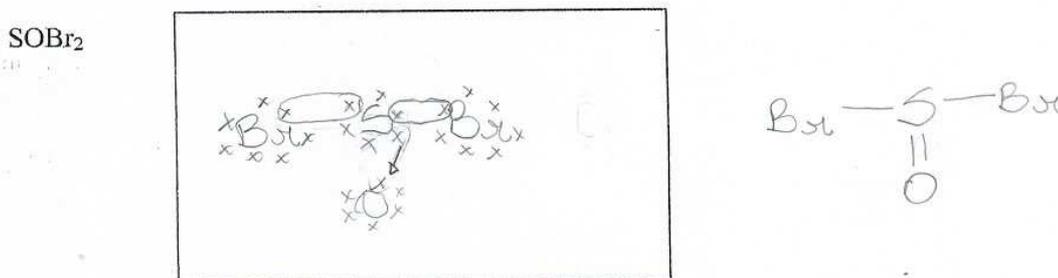


Figura 43: Pré-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3º) PO₂Cl

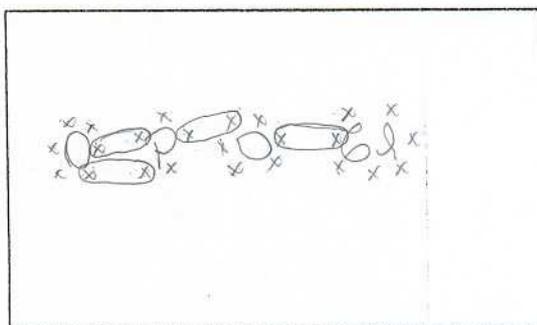


Figura 44: Pré-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Na última representação do pré-teste, PO₂Cl, observe figura 44, a estudante dispõe os elementos linearmente e completa com sucesso o octeto. Quando indagado, quanto à preocupação de fechar o octeto a estudante responde: “*eu faço primeiro a parte de formar ligações e depois se eu achar meio estranho a fórmula eu dou uma ajeitadinha*”.

Concluimos que a estudante prioriza as ligações atômicas, buscando completar a última camada de valência (oito elétrons), sem a preocupação organizacional dos átomos. A falta conceitual sobre pares de elétrons dos átomos centrais das espécies químicas (TRPECV) leva a estudante a erros

representacionais geométricos de todas as espécies química propostas no pré-teste.

6.5.2 Pós-Teste JU

Em entrevista pós-teste a estudante reconhece falha nas suas representações (pré-teste) e diz *“antes eu achava que era tudo linear, preocupada mais com a ligação eletrônica”*. Nas representações pós-teste, espécie simples e complexa observa progresso nas suas representações em perspectiva, angulações não ortogonais, critérios não adotados pelo estudante no pré-teste. Comenta a influência do programa nas suas representações pós-teste: *“Eu lembro que teve um exemplo, que utilizamos no programa”* e *“ Que nem aqui no paus e bolinhas, cada átomo de tamanho diferente. Daí eu fiz baseado nisto”*.

Quanto indagada sobre o que não conseguia visualizar, e que agora consegue, responde: *“A primeira coisa é a geometria, antes não tinha noção. Agora dá pra representar um pouco melhor a geometria e os ângulos”*. Isto demonstra melhoria representacional, interpretativa e conceitual implícita nas imagens manipuladas no programa que a estudante a torna explícita. Comenta: *“É que no programa a gente viu que os átomos não estão em 90°, aí a gente fica preocupada em não deixar em 90° tal, fazer uma geometria”*.

Observando as representações pós-teste e considerando os comentários feitos, a estudante dispõe as estruturas em geometrias quimicamente conhecidas, ligações maiores e menores dando a visão de profundidade no SOCl_3 e CCl_2F_2 , observe figura 45 e 46, identificando corretamente duas das três geometrias moleculares propostas, no entanto em nenhum momento a estudante demonstra conhecimento dos pares de elétrons dos átomos centrais das espécies químicas (TRPECV), o que justificaria satisfatoriamente seus acertos.

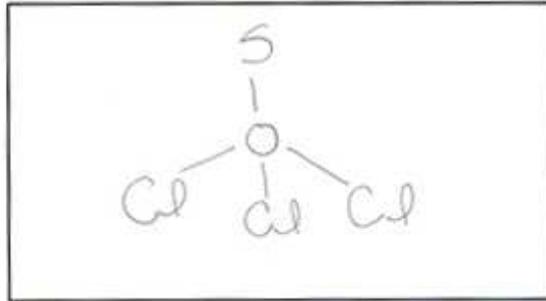
2º) SOCl_3 

Figura 45: Pós-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

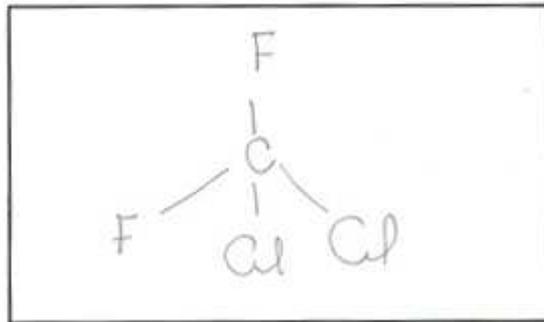
3º) CCl_2F_2 

Figura 46: Pós-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Há erros de conectividade química e aplicação correta da regra do Octeto, observe figura 47 e 48, tais erros permanecem no pós-teste, em função do uso da formulação estrutural, que o estudante não apresenta domínio.

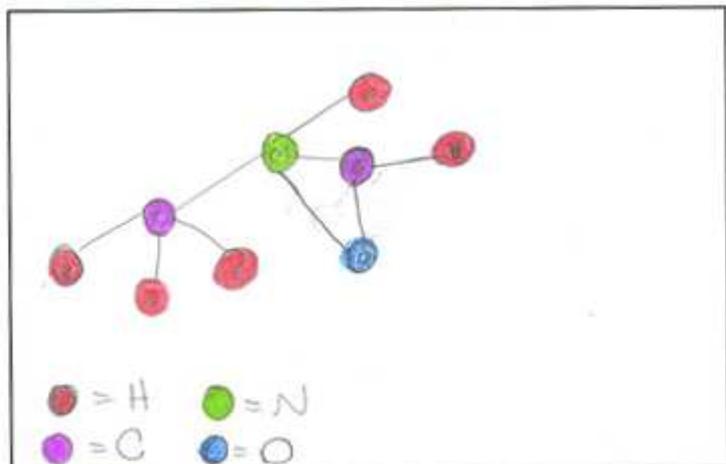
2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$ 

Figura 47: Pós-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

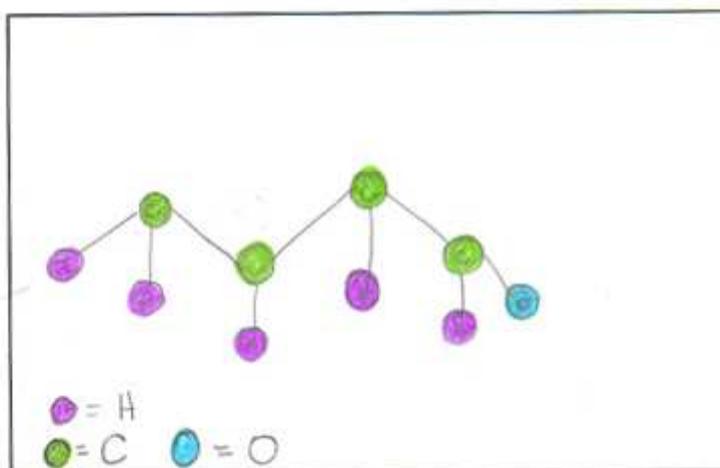
3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$ 

Figura 48: Pós-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

No pós-teste (b), com espécies mais complexas a estudante utiliza o modelo *paus e bolinhas* com legendas, para facilitar a identificação atômica “*porque mais parece com uma estrutura química, é mais bonitinho, apesar de não aparecer às ligações*”. Seu comentário coincide com a investigação de Pavlinic et al. (2001), onde alunos relatam que o modelo *paus e bolinhas* em 3D no computador é “um jeito honesto de representar a molécula”. Na figura 49, observe que está corretamente representado, com angulações e tridimensionalidade evidentes e que a estudante não “desenha” ligação dupla (Pi) entre o carbono e oxigênio, pois pela utilização do programa sabe que o referido modelo não expressa tal ligação, desta forma compactua com seu comentário acima sublinhado, refletindo nas suas representações futuras.

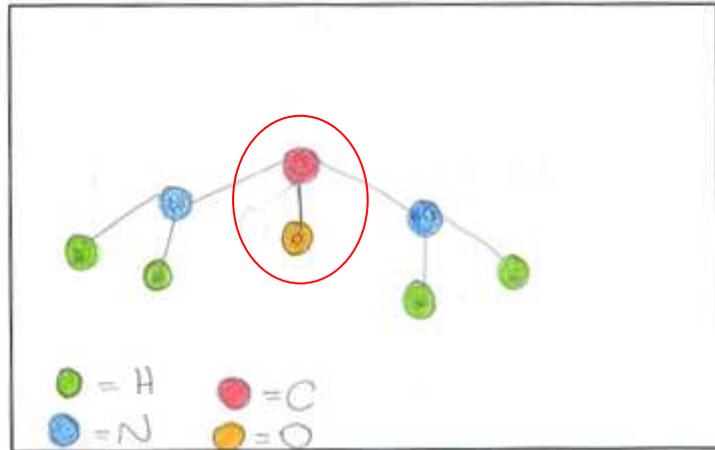
1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ 

Figura 49: Pós-Teste JU

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Baseado no trabalho recente sobre as Teorias das Representações (VERGNAUD apud MOREIRA, 2002), diz que as representações devem oferecer possibilidades de inferências e que elas nos tornem capazes de antecipar eventos futuros e promover ações para chegar a algum efeito positivo e/ou evitar algum efeito negativo.

Concluimos que nas representações simbólicas, principalmente no pós-teste observe figura (49), a estudante oferece indícios significativos de interação da ocorrência das ligações Pi e influência do modelo representacional Balls and Sticks (*paus e bolinhas*), antecipando-a nas representações simbólicas. Tais suspeitas se justificam em entrevista, na preocupação com ângulos e geometria molecular citados nesta análise.

6.6 ANÁLISE KE

6.6.1 Pré-Teste KE

A estudante escolhe a formulação de Lewis para suas representações pré-teste, porém são claros os erros de conectividade atômica e geométrica. Contudo no desenho do H_2S , observe figura 50, percebemos que a geometria molecular está correta, os hidrogênios formam um ângulo, porém não há relato na entrevista que explique esse ângulo, todavia entendemos que a sua representação ocorreu ao acaso. Ainda no pré-teste nos demais casos SOBr_2 figura 51 e PO_2Cl figura 52, há problemas de conectividade atômica também e um detalhe nos chama a atenção: A estudante não mostra as ligações entre “SO” (enxofre e oxigênio) e “PO” (fósforo e oxigênio), fato este que queremos analisar no pós-teste.

1º) H_2S

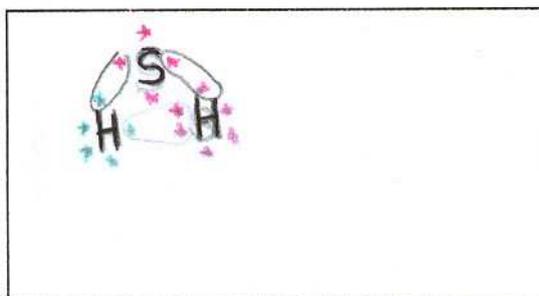


Figura 50: Pré-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2º) SOBr_2

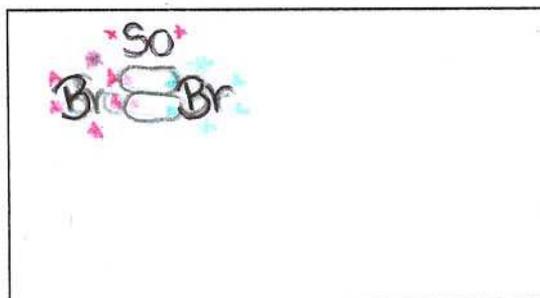


Figura 51: Pré-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

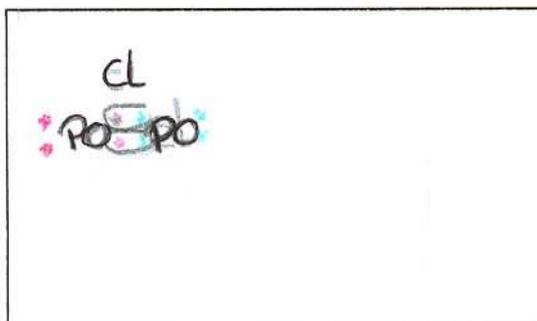
3º) PO₂Cl

Figura 52: Pré-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.6.2 Pós-Teste KE

Nas representações pós-teste, a estudante escolhe a formulação estrutural para suas representações, continuam as dificuldades em efetuar as ligações químicas e o número correto de elétrons na última camada. No primeiro exemplo NOCl, observe figura 57, há somente um átomo de cloro e na sua representação coloca dois cloros, comprometendo a geometria molecular desta espécie química. No segundo exemplo SOCl₃, figura 53, a Regra do Octeto não é utilizada com sucesso, pois não percebe a impossibilidade de se utilizar os três átomos de “cloro”, com isto compromete a conectividade química das espécies.

Persiste em não mostrar as ligações entre “SO” (enxofre e oxigênio), observe figura (51). Concluo que a estudante tenha representado o “SO” pensando em se tratar do símbolo de apenas um elemento químico. Faz as demais ligações incidirem sobre o “SO”; o que é um equívoco.

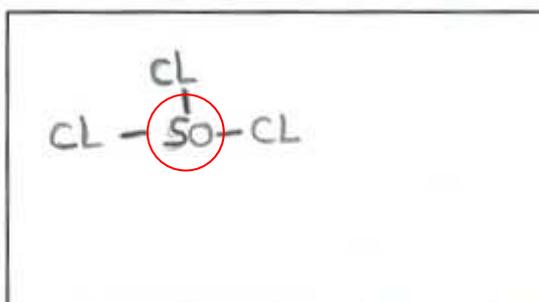
2º) SOCl₃

Figura 53: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Na segunda parte do pós-teste (b), observe figura 54, 55 e 56, consideradas estruturas mais complexas, a estudante utiliza o modelo *paus e bolinhas*, que em entrevista diz ter gostado: “*porque ele mostra melhor os átomos*”. Mesmo não tendo representado corretamente as estruturas, nota-se uma forte influência do modelo *paus e bolinhas* e angulações, claramente, evidenciado na representação do $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$, observe figura 56.

1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

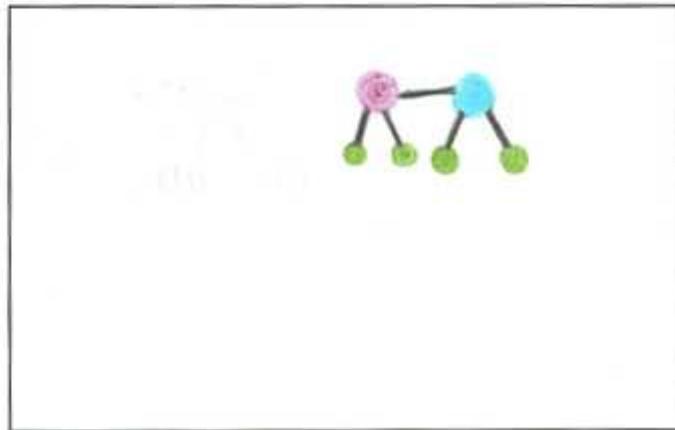


Figura 54: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$

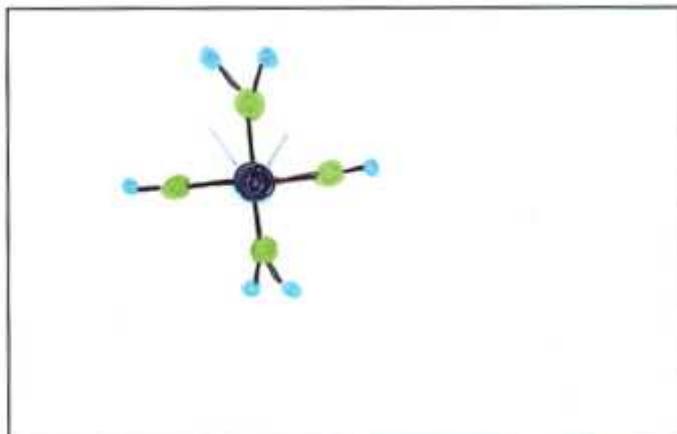


Figura 55: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$

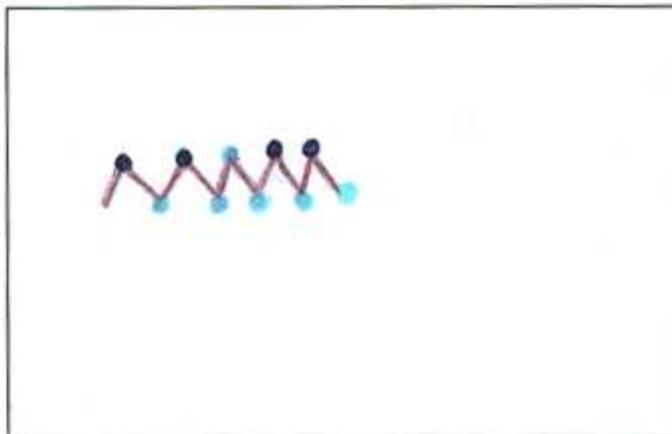


Figura 56: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Quanto ao modelo *arame* diz “*mostra bem a ligações duplas e triplas, mas não dá pra ver bem os átomos, apesar das cores*”. O modelo *pauzinhos* “*Tá bom às cores diferenciam, mas é tudo um tamanho só*”, e por fim o modelo *sólidos* “*não dá pra diferenciar assim, só pelas cores*”.

Estudos sobre representações duo e tridimensional no ensino da estereoquímica, realizados por Pavlinic et al. (2001), relatam que estudantes acharam “mais prático” com que cada molécula tivesse sua cor, para facilitar o reconhecimento entre elas. Então, o uso de diferentes cores para os átomos poderia ajudar a superar as dificuldades mais comuns encontradas. Mesmo a estudante tendo utilizado o recurso das cores nas suas representações pós-teste, fica difícil distinguir os elementos químicos nas estruturas, conseqüentemente, dificultando sua análise.

A estudante parece compactuar com a opinião dos demais colegas, sobre a peculiaridade de cada modelo utilizado no programa, a influência que relata em entrevista “*acho que fui influenciada pelo programa*”, recai nos seus desenhos pós-teste para estruturas complexas, apesar de não representar nenhuma espécie química corretamente. Sobre as dificuldades que teve nas representações no papel a estudante diz “*no programa é mais fácil*”. Acerta uma geometria molecular das três solicitadas.

1º) NOCl

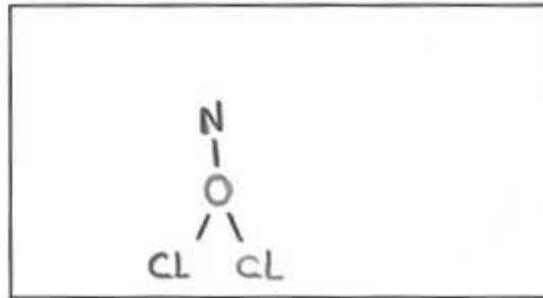


Figura 57: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2º) SOCl₂

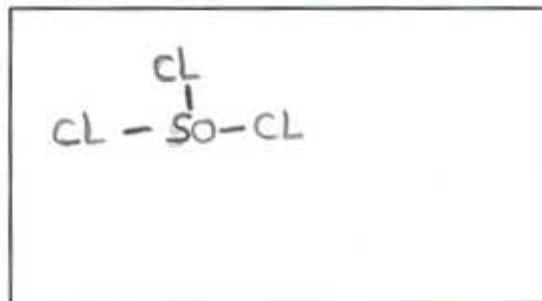


Figura 58: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3º) CCl₂F₂

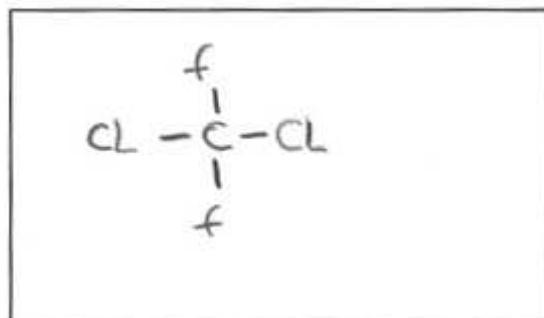


Figura 59: Pós-Teste Ke

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.7 ANÁLISE LE

6.7.1 Pré-Teste LE

O estudante representa o H_2S , utilizando a formulação estrutural, com um ângulo entre o hidrogênios. Indagado sobre o ângulo, responde: “*Eu coloquei baseado na fórmula da água, que forma um ângulo*”. O estudante relaciona H_2O com H_2S figura 60, pela semelhança das formulações moleculares, não insinuando em nenhum momento, conhecer a razão desta angulação.

1º) H_2S

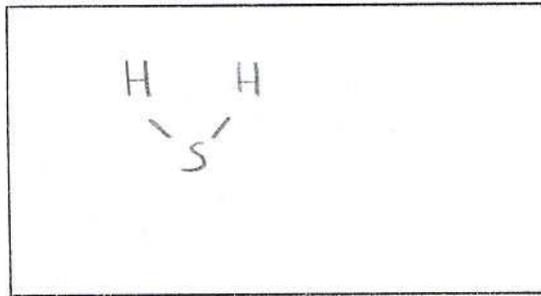


Figura 60: Pré-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Na representação do SOBr_2 , figura 61 não há átomo central, mas dispõe os átomos de forma a privilegiar oito elétrons na última camada de valência (regra do Octeto). Fica claro na entrevista “*porque o oxigênio e o enxofre, pra completar, vão precisar de duas ligações ou uma dupla*”. Por último “*Eu coloquei que deu pra completar o octeto*”, exclama: “*fecho!*”.

SOBr_2

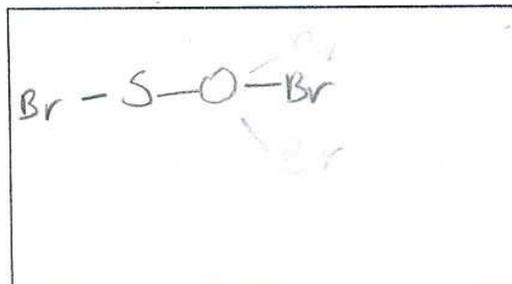


Figura 61: Pré-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Também na representação do PO_2Cl , figura 62 não há átomo central e fica evidente o uso da regra do Octeto como critério, contudo explicar o ângulo entre fósforo e os oxigênios, responde “Coloquei esse ângulo, porque... Sei lá, já vi outras estruturas assim, então coloquei assim!”.

Nos desenhos e entrevista pré-teste, não há evidências que comprovem conhecer os tipos de geometrias conhecidas, conforme IUPAC⁶, mesmo na representação do H_2S que foi desenhada ao acaso, por fim o estudante confirma não considerar a geometria das espécies, comenta “Não lembro das estruturas”.

3º) PO_2Cl

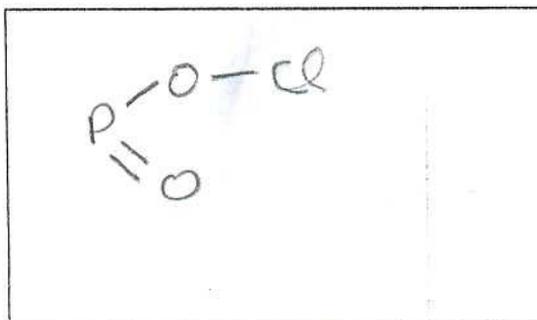


Figura 62: Pré-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.7.2 Pós-Teste LE

O estudante utiliza o modelo *paus e bolinhas* para as estruturas mais complexas e atribui ao programa seu melhor desempenho, diz: “*sem o programa fica difícil, mas depois que usei o programa consegui ver um pouco melhor*”. Complementa, “*com o programa é bem mais fácil ver a angularidade*”. Realmente, nas representações pós-teste os ângulos são pronunciados e articulados, observe figura 63, que em entrevista comenta sobre a seqüência de carbonos “*Fiz pelo programa, de um exemplo que foi dado*”.

⁶ Refere-se a International Union of Pure and Applied Chemistry

3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$

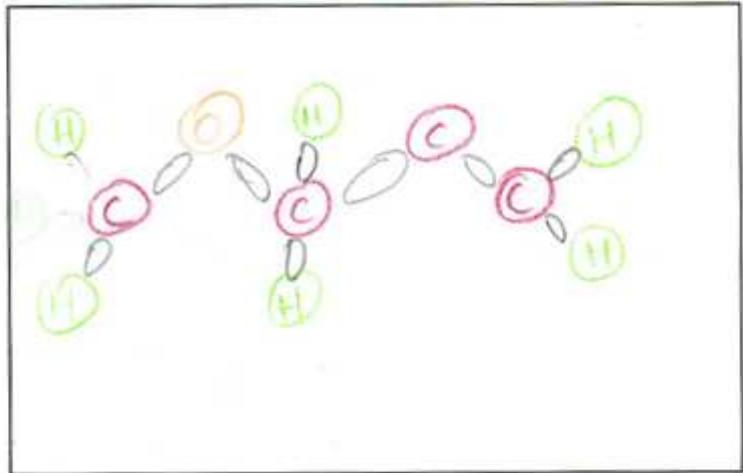


Figura 63: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Quando questionado quanto à visualização dos hidrogênios comenta: “*um pode estar aqui o outro mais atrás*”. Concluimos que há tridimensionalidade nas estruturas consideradas mais simples e que o estudante (Le) tem internalizado este conceito, entretanto para as representações mais complexas não se percebe tridimensionalidade nas estruturas consideradas complexas, observe figura 64, 65 e 66.

1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

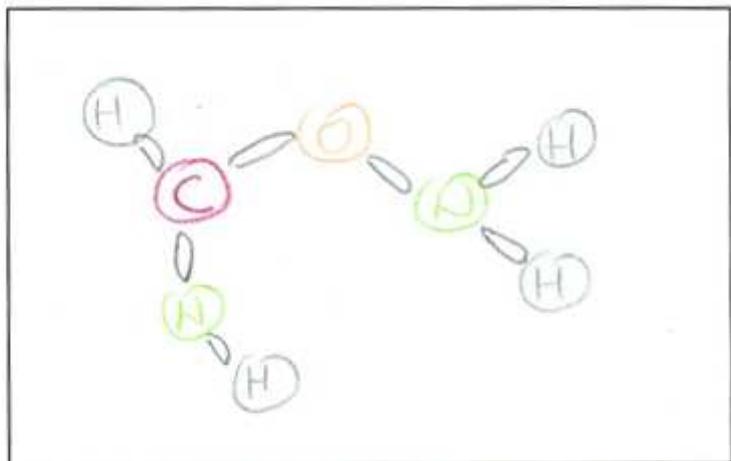


Figura 64: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2) C_2H_5ON

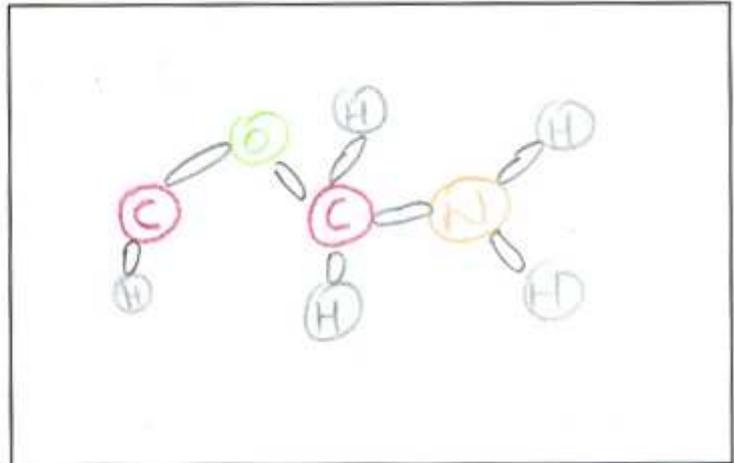


Figura 65: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3) CH_2CHCH_2CHO

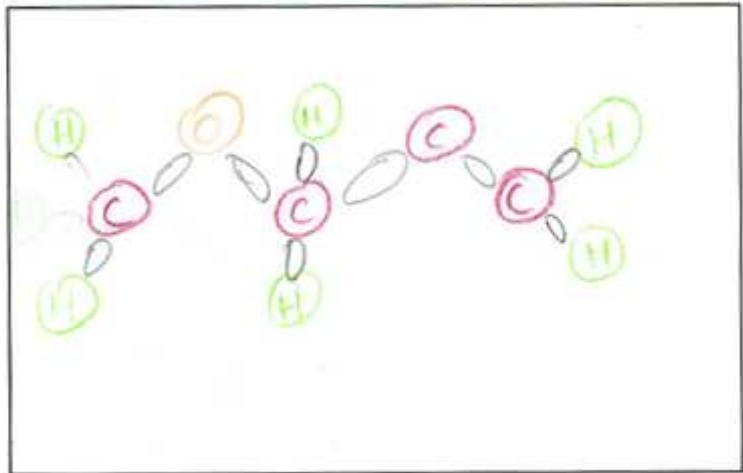


Figura 66: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Na representação do CCl_2F_2 , observe figura 67, reforça a evidência de representação tridimensional.

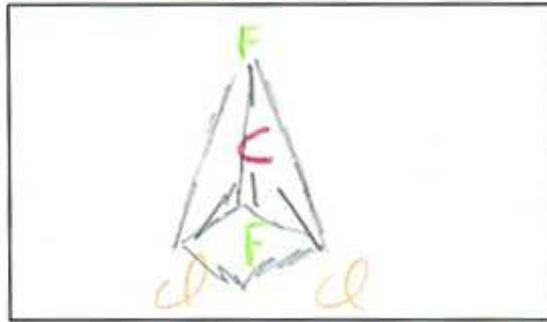
3º) CCl_2F_2 

Figura 67: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Aplica corretamente a regra do Octeto quando representa o SOCl_3 , observe figura 68 “percebi que só podia ter dois cloros, porque precisa de um elétron pra completar o octeto”, além disso, responde acertadamente a geometria molecular da nova estrutura formada SOCl_2 .

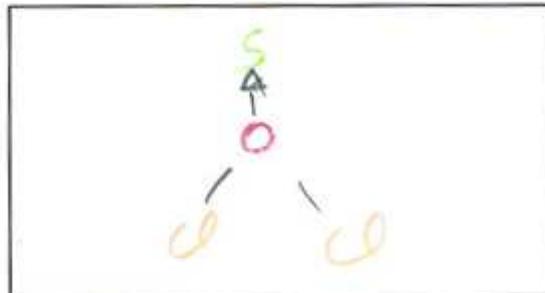
2º) SOCl_3 

Figura 68: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

O estudante demonstra uma melhoria na habilidade de visualizar estruturas químicas, principalmente, na organização molecular, angulações e perspectiva, porém constatam-se erros estruturais, porque não considera relevantes os pares de elétrons dos átomos centrais das espécies químicas, tornando-o inseguro na determinação do átomo central da espécie química, observe figura 69, assim compromete a conectividade atômica.

2º) SOCl_2

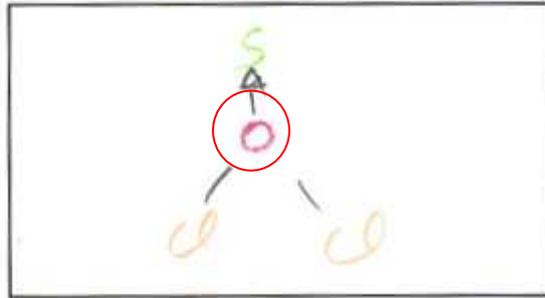


Figura 69: Pós-Teste Le

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Entretanto, o estudante foi capaz de produzir desenhos similares aos manipulados no programa e identificar duas das três geometrias moleculares propostas pós-teste (a).

Segundo Giordan (1999) a manipulação de várias formas de representação cria um efeito vinculante entre a variável de natureza teórica e imagética, isto é, parece que a visualização de imagens pelo computador parece promover o elo entre uma propriedade da molécula e sua representação. Com isto, incentiva o estudante na manipulação e elaboração de significados, repercutindo nas suas representações.

6.8 ANÁLISE TA

6.8.1 Pré-Teste TA

Analisando o pré-teste observamos o uso da formulação de Lewis, para todas as espécies químicas propostas, desenhando “x” em torno de cada elemento químico, informando o número de elétrons na última camada de valência. Constatamos que a estudante não utiliza com sucesso, a Regra do Octeto. Para a espécie SOBr_2 , observe figura 70, o átomo de oxigênio excede oito elétrons na última camada de valência. Também, na espécie PO_2Cl , observe figura 71, os oxigênios apresentam apenas sete elétrons na última camada. A referida regra não é efetiva no pré-teste, que será motivo para análise no pós-teste.

2º) SOBr_2

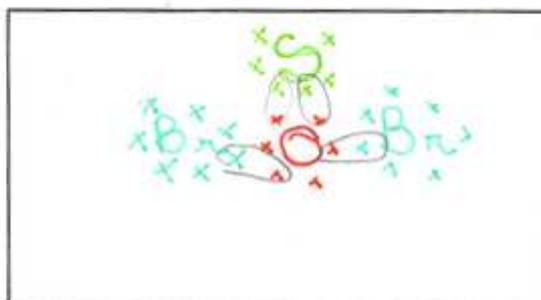


Figura 70: Pré-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3º) PO_2Cl

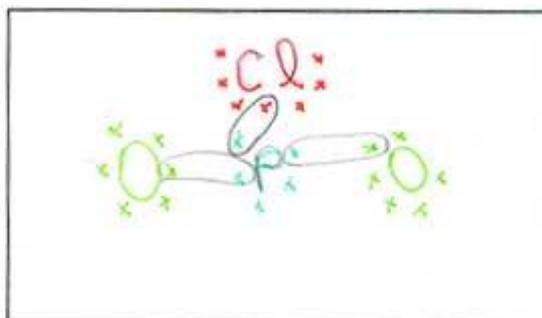


Figura 71: Pré-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Quanto à geometria molecular, não utiliza nenhum critério, os átomos estão dispostos aleatoriamente e em entrevista a estudante confirma “*Eu nem lembrava da geometria*”. Contudo, em entrevista a estudante afirma que o programa ajudou nas representações, principalmente, na visualização dos ângulos: “*O programa ajudou um monte*”. Por quê? “*Tu vai mexendo (programa) vai vendo os ângulos. No programa da pra ver tri bem*”.

6.8.2 Pós-Teste TA

Nas representações pós-teste a estudante continua apresentando os mesmos erros constatados no pré-teste (Regra do Octeto), ora excedendo ora faltando elétrons na última camada de valência. Na segunda parte pós-teste, onde escolhemos estruturas inéditas e mais complexas, figuras 72, 73, e 74 observamos uma melhora nas suas representações, quanto à disposição dos elementos químicos, angularidade. Utiliza o modelo *paus e bolinhas*, representando os átomos como “bolas” maiores e menores, incluindo o símbolo do elemento correspondente, com cores distintas. A estudante confirma em entrevista “*Nessa (segunda parte), representei melhor*”. Outro detalhe chama atenção: A estudante centraliza um átomo, destacando-o dos demais, através de cores e tamanho, efetuando todas as ligações em função dele. O mesmo acontece com as espécies químicas menos complexas do pós-teste (a), observem figuras 75, 76 e 77. Certamente, a estudante tem internalizado alguma regra, seja de pares de elétrons dos átomos centrais (TRPEV), Regras de Gillespie ou Regras de Hefnerich que basicamente, partem do elemento central para a determinação da geometria molecular de espécies químicas. Entretanto, a correta aplicação destas regras não são efetivas.

1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

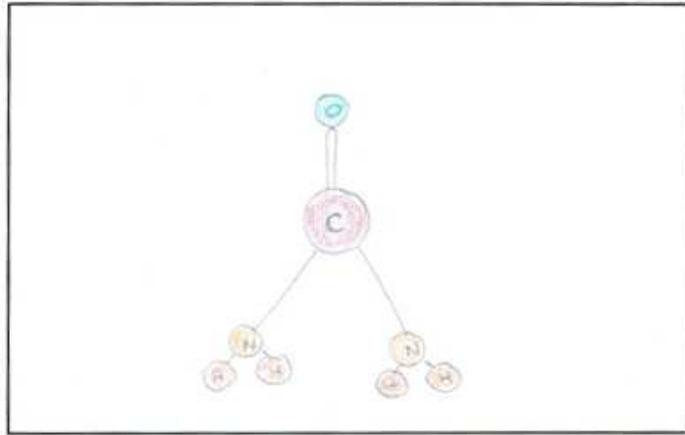


Figura 72: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$

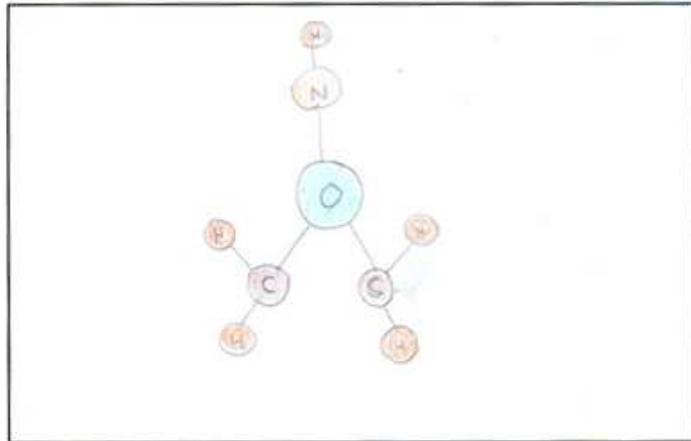


Figura 73: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$

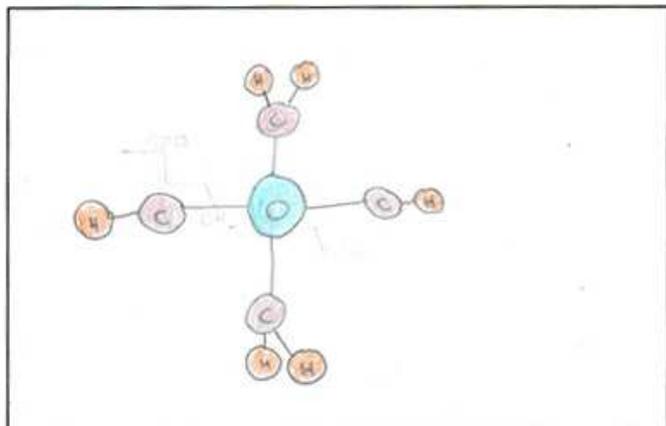


Figura 74: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

1º) NOCl

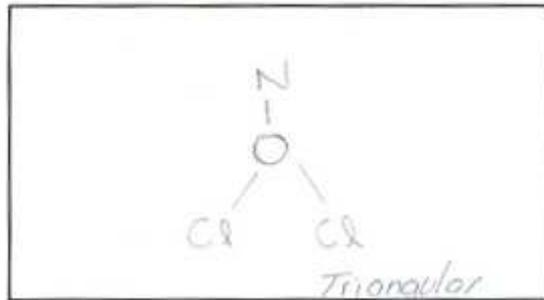


Figura 75: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

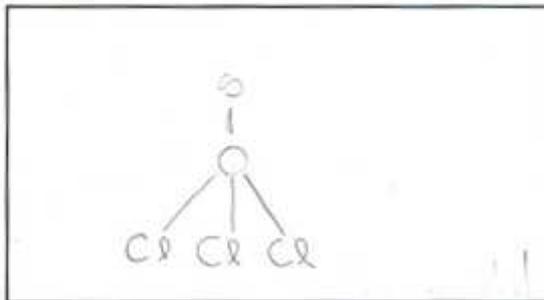
2º) SOCl₂

Figura 76: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

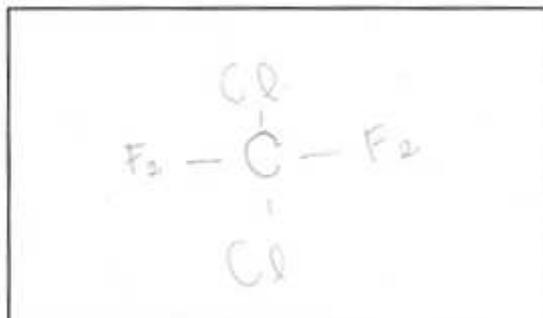
3º) CCl₂F₂

Figura 77: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

No exemplo NOCl, figura 75, insinua ângulos de 120° e acerto na geometria molecular, contudo revela incertezas na geometria das outras estruturas propostas “*não, não tenho certeza de nenhuma*”. A estudante utiliza o modelo *paus e bolinhas*, ângulos entre carbonos e hidrogênios na espécie química C₂H₅CH₂CHCH₂CHO, observe figura 74; nitrogênios e hidrogênios na espécie CO(NH₂)₂, observe figura 72 com ligantes maiores e menores indicando tridimensionalidade, fato não ocorrido no

pré-teste, onde os ligantes têm mesmo tamanho.

A estudante comenta sobre os modelos utilizados no programa, acha que *paus e bolinhas* são melhores, porém a visualização das ligações *Pi* fica prejudicada, o modelo *arame* consegue ver claramente estas ligações, então nas suas representações pós-teste a estudante utiliza os dois modelos. Diz “O melhor é esse aqui (*paus e bolinhas*), a desvantagem é ver as ligações duplas, mas aí olha no primeiro (*arame*)”. Fica evidente na representação $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$, figura 78.

1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

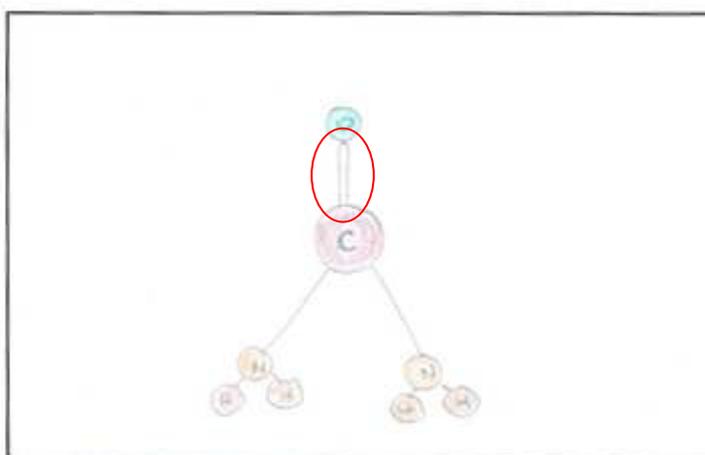


Figura 78: Pós-Teste Ta

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Concluimos que a melhora nas suas representações se deve ao fato da estudante ter manipulado o programa e que isto motivou uma mudança no seu desenho tridimensional das espécies químicas gerando perspectivas futuras. Em entrevista, pós-teste, a estudante admite “*Eu faria diferente*”. Também “*do jeito que tu enxerga a fórmula tu começa a pensar como vai ficar*”. Entretanto, não há evidências de que a estudante tenha internalizado conceitos fundamentais da geometria molecular nem tampouco citado pares isolados em entrevista, o que nos parece um erro conceitual. Encontramos resposta na teoria de Vergnaud, onde o domínio desse campo conceitual⁷ pode levar um longo período de tempo, aprendizagem e maturidade.

⁷ Defini-se campo conceitual como um conjunto informal e heterogêneo de problemas, situações, conceitos, relações, estruturas, conteúdos e operações de pensamento, conectados uns aos outros (VERGNAUD apud MOREIRA, 2002).

6.9 ANÁLISE VA

6.9.1 Pré-Teste VA

Analisando o pré-teste constatamos que em todas as representações a estudante se esforçou em deixar todos os átomos com a última camada de valência completa, isto é, com oito elétrons na última camada, exceção do hidrogênio com dois, o que faz acertadamente. Utiliza a formulação de Lewis, representando com "x", ao redor de cada átomo, o número de elétrons na última camada e complementa com a formulação estrutural. Note que a estudante não se importa com a geometria molecular das espécies em questão, dispõe os átomos de forma cômoda, linearmente, observe figuras 79 e 80, completando acertadamente, o número de elétrons da última camada de valência.

1º) H_2S

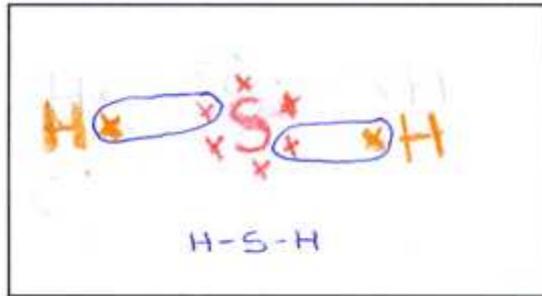


Figura 79: Pré-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2º) SOBr_2



Figura 80: Pré-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

A representação linear dos átomos não ocorre no desenho do PO_2Cl .

Observe figura 81, na formulação de Lewis, que todos os elementos estão com oito elétrons na última camada, mesmo apresentando irregularidade na sua geometria. Na transposição da formulação de Lewis para a estrutural há erros de conectividade atômica.

Concluimos que a estudante aplica a regra do Octeto na formulação de Lewis, contudo a aplicação da referida regra fica comprometida na formulação estrutural para espécies químicas complexas, obtendo uma geometria molecular aleatória e irregular.

3º) PO₂Cl

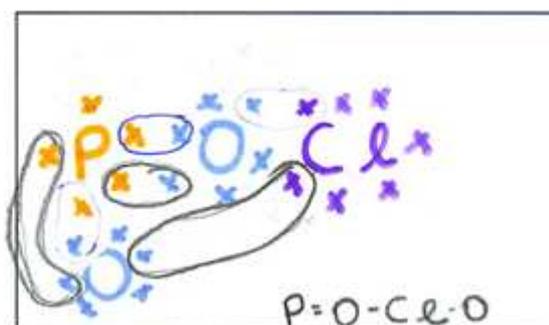


Figura 81: Pré-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

6.9.2 Pós-Teste VA

Suas representações pós-teste, lembram modelos utilizados no programa (*paus e bolinhas e arame*). A estudante confirma em entrevista “*tentei representar, utilizando um modelo de cada*”. A estudante faz comentários sobre os demais modelos. Sobre o modelo *paus e bolinhas* diz “*é melhor pra ver os hidrogênios*” e o “*modelo arame quando tem ligações duplas eu vejo, nas outras não*” e o modelo sólidos “*fica tudo junto, fica difícil de enxergar os átomos e ligações*”.

Em entrevista, quando indagada sobre o que motivou a mudança, a forma de representar as espécies químicas, a estudante revela “*aprendi que nem todas as ligações são lineares*”. A linearidade foi uma característica marcante no pré-teste, contudo no pós-teste (a), espécies químicas menos complexas, notam-se,

claramente, geometria molecular conhecida, observe figura 82, 83 e 84. A tridimensionalidade é marcante, figura 83, onde há ligante maior e menor, isto é, o átomo pode estar atrás ou à frente comprovando que o desenho apresenta “profundidade”, confirmando em entrevista “*É pra dizer que ta atrás e foi com o programa é que eu sabia disto*”. Admite utilizar a perspectiva nas suas representações “*Mudou, dá pra perceber a mudança*”, influenciada pela utilização do programa.

1º) NOCl

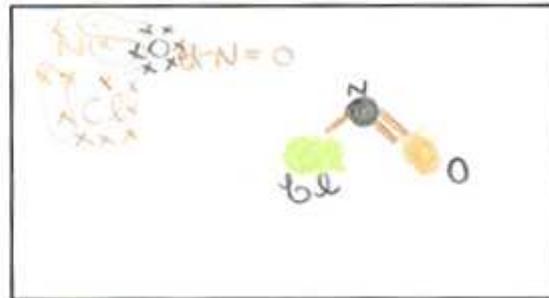


Figura 82: Pós-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

2º) SOCl₂



Figura 83: Pós-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3º) CCl₂F₂

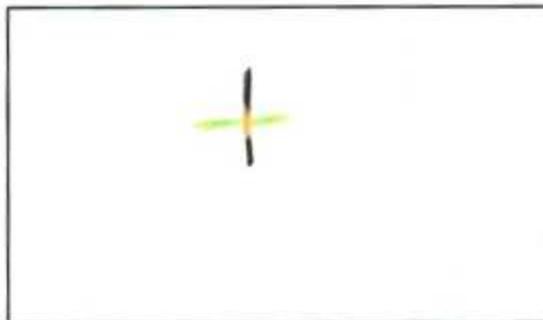


Figura 84: Pós-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Na representação pós-teste NOCl, observe que na figura 82 a estudante forma ângulo entre os átomos de oxigênio e cloro. É visível a ligação dupla entre os átomos de oxigênio e nitrogênio e representa os átomos em forma de “esferas” de tonalidades diferentes e ainda colocando o símbolo correspondente. Ainda no NOCl sua geometria é confirmada em entrevista pós-teste “*eu acho que pra mim é angular*”.

Na representação do SOCl_3 a estudante tem o cuidado de representar somente dois átomos de cloro, mesmo propositadamente, tendo três átomos de cloro na fórmula molecular proposta. Isto demonstra claramente no pós-teste, que a estudante continua a priorizar e observar a última camada de valência (oito elétrons) para cada elemento químico, priorizando à Regra do Octeto. Quanto à geometria molecular escreve, acertadamente, a geometria molecular, observe figura 83.

No pós-teste as representações são mais elaboradas, há profundidade em um caso, angulações e forte influência dos modelos: *arame – paus e bolinhas*. A própria estudante se surpreende quando comenta sobre as suas representações “*bem melhor, antes pensava que era tudo em linha reta, no plano. Diz “Não imaginava que poderia ter um elemento atrás ou pra frente*”, mas faz ressalva” *sem o programa fica difícil*”. Em entrevista responde corretamente duas das três espécies químicas do pós-teste (a). Para as espécies químicas complexas pós-teste (b), a estudante recorre primeiro a formulação estrutural para depois adotar o modelo *arame* para a estrutura $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$, contudo representando-a erroneamente a formulação estrutural, observe figura 86. As demais são confusas o que dificulta a análise.

1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$

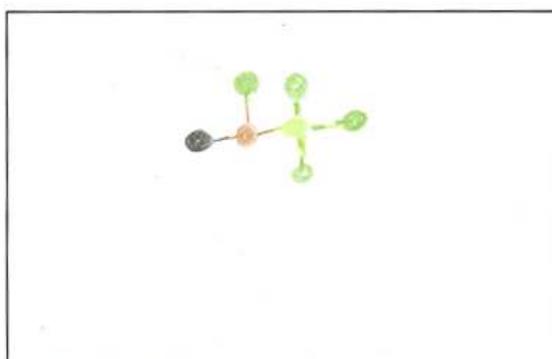


Figura 85: Pós-Teste Va
Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

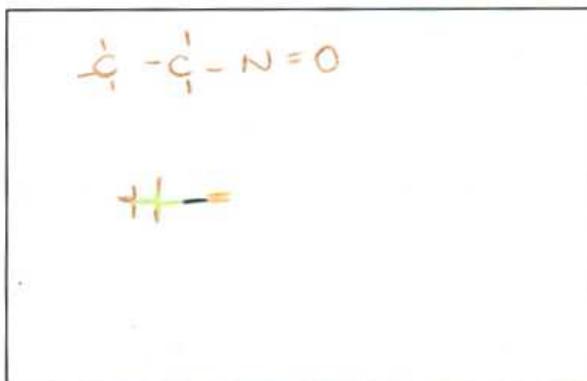
2) C_2H_5ON 

Figura 86: Pós-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

3) CH_2CHCH_2CHO 

Figura 87: Pós-Teste Va

Fonte: Pesquisa aplicada pelo autor

Por último, uma evidência da influência do programa nas suas representações a respeito da geometria molecular das espécies químicas. Quando a estudante comenta sobre a geometria do CCl_2F_2 : “*eu lembro que no programa, quando tinha essas “pernas” aqui (ligações), atrás e tal, normalmente era piramidal. Aí não é angular e linear também não é, então é tetraédrica*”. Embora, não considere os pares de elétrons não ligantes para determinação da geometria molecular, a estudante recorre às representações tridimensionais geradas pelo programa, alternando modelos *arame – paus e bolinhas*, assim por eliminação e/ou comparação consegue responder corretamente a geometria da substância em questão, apesar da sua representação atômica espacial esteja incorreta, isto é, átomos formam ângulos ortogonais, observe figura 84.

Pavlinic et al. (2001) computando na estéreo-química⁸, com representações duo-dimensional (2D) e tri-dimensional (3D), descrevem que estudantes preferem as representações 3D quando é necessário examinar a forma de cada molécula e que a compreensão é significativa dos conceitos da estéreo-química. Contudo, nos parece que a estudante necessita desenvolver seus conceitos implícitos, tornando-os seus esquemas e suas representações significativas.

⁸ Estéreo-química – Estudo do arranjo espacial dos átomos dentro das moléculas.

CONCLUSÃO DAS ANÁLISES

Neste tópico, selecionamos e analisamos eventos que julgamos de interesse para esta investigação, produto do pré-teste e pós-teste que compõem os resultados obtidos, através das representações produzidas pelos estudantes – *Conclusão das Análises*.

A linearidade das representações é trivial nas três espécies químicas do pré-teste, isto é, a disposição espacial atômica tende a formar estruturas retas, lineares: na espécie H_2S os estudantes (Ap, Die, Ju, Va), contudo observam oito elétrons na última camada de valência para cada átomo (dois elétrons para o átomo de hidrogênio). O mesmo é observado nas estruturas SOBr_2 (Dio, Ap, Le, Va) e PO_2Cl (Ju, Va).

A busca pela aplicabilidade da regra do Octeto se revela nas representações, SOBr_2 (Die) e PO_2Cl (Le), independentemente da geometria molecular, tampouco é considerado os pares de elétrons do átomo central, que antecede a regra do Octeto, com isto gera uma figura irregular e sem geometria definida conforme IUPAC.

Outro fator observado no pré-teste, PO_2Cl (Dio, Ta, Dou), SOBr_2 (Dou, Ju, Ta) é a frequência de representações ortogonais, isto é, ligações formando ângulos de 90° . Essa aparente redundância pode ocultar o desconhecimento da repulsão dos pares de elétrons do átomo central ocasionando angulações, geralmente, não ortogonais.

A maioria dos estudantes (Ap, Ta, Ke, Va) preferiram a formulação de Lewis para suas representações, utilizando átomos com cores diferentes e “x” em torno dos átomos, também com cores distintas representando o número de elétrons na última camada de valência. Outros (Die, Ju, Va) além da formulação de Lewis complementaram com a formulação estrutural, ligando um átomo ao outro através de “traços”. Em alguns casos (Va, Ju, Ap, Die, Le) a transposição da formulação de Lewis para a estrutural é de forma errônea, logo concluímos a falta de domínio desta formulação.

Não há indícios de tridimensionalidade nas representações pré-teste, como assim foi solicitado. As figuras geradas estão no plano bidimensional.

Finalizando a conclusão da análise pré-teste, somente os estudantes (Dio, Die, Le, Dou, Ke), representaram com sucesso a geometria molecular da espécie química H_2S , considerada de baixa complexidade, as demais sem geometria definida.

Relembrando, que o pós-teste foi dividido em duas etapas (a) e (b): etapa (a) constam espécies químicas de baixa complexidade e a etapa (b) com espécies químicas complexas, ambas inéditas para esta investigação.

No pós-teste a tridimensionalidade é notável nos desenhos dos participantes (Ap, Die, Dou, Ju, Le, Dio), principalmente na representação da espécie química CCl_2F_2 . Observam-se desenhos em perspectiva – ligações maiores, menores, linhas pontilhadas, evidenciando profundidade. Em entrevista, concordam que o programa incentiva a visualização de ângulos e entendem que as disposições dos átomos estão em planos diferentes. Contudo, os estudantes (Ke, Va, Ta) continuam elaborando suas representações (CCl_2F_2) na forma ortogonal.

Na representação da espécie $NOCl$ os estudantes (Die, Dou, Ju, Va) obtiveram êxito na sua composição geométrica angular, tendo o cuidado em formar ângulo diferente de 90° , que entendemos confirmar a importância e influência do programa no quesito visualização angular.

Na espécie química SOCl_3 (Ap, Ju, Dou, Ke, Ta) optaram por representá-la, sem questionar e/ou verificar a conectividade atômica e regra do Octeto. Existe um átomo de cloro a mais na espécie em questão que foi colocado intencionalmente. Em função disto, apontamos erros de ligação atômica e aplicação da regra do Octeto ainda permanecem no pós-teste. Entretanto, os estudantes (Die, Va, Dio, Le), entenderam que a espécie, em questão, não poderia existir com um átomo de cloro a mais, então optaram por representar a espécie SOCl_2 .

Esta questão pode ser avaliada ou concluída de duas formas: No pré-teste as representações produzidas pelos estudantes, não deixavam dúvidas, quanto à aplicação da regra do Octeto. No pós-teste verificamos a efetividade, conectividade atômica e, por conseguinte, a correta aplicação desta regra.

Entendo que esta questão pós-teste, sobre a espécie química SOCl_2 , abre precedentes para futuras investigações, porque há acertos e erros, e as conclusões são divididas. Temos estudantes que não internalizaram e/ou não há domínio na aplicação da regra do Octeto (para espécie considerada simples ou elementar), que implica na questão conceitual da regra do Octeto, por outro lado, estudantes que verificaram durante a representação a incoerência da espécie, que também recai sobre questões conceituais como: ligação química, conectividade atômica, pares de elétrons do átomo central, regra do Octeto, eletronegatividade.

Considerando os modelos representacionais do programa, em entrevista os estudantes atestam que:

- O modelo paus e bolinhas foi o preferido para as representações, porque visualiza melhor os átomos, são coloridos e tamanhos diferentes facilitam a distinção atômica (AP, p.56; Die, p.61; Dio, p.66; Ju, p.79; Ke, p.83; Ta, p.96);
- O modelo arame é o escolhido como o melhor modelo para a visualização das ligações duplas e triplas, contudo a falta de “textura” ou volume dificulta

a visualização dos átomos (AP, p.56; Die, p.61; Dio, p.66; Dou, p.73; Va, p.98; Ke, p.84; Ta, p.96);

- No modelo sólidos há dificuldade na visualização das ligações e átomos, concordam que o volume é excessivo (Va, p.98; Ke, p.84; AP, p.56);

- No modelo pauzinhos comentam que o mesmo volume, para todos os elementos da espécie química, dificulta o reconhecimento atômico (Dou, p.73; Ke, p.84).

Concluem que as diferenças de tamanho são importantes para melhor diferenciar um átomo do outro. Certamente, este fato corrobora com a escolha feita pela maioria dos estudantes, utilizando o modelo “*paus e bolinhas*” para as representações consideradas complexas. Somente a estudante (Va), empregou os modelos: *arame* e *pauzinhos*, além do modelo *paus e bolinhas*.

No pós-teste (b), foi marcante o bom desempenho dos estudantes nas representações das estruturas complexas e desenhos adequados, conforme solicitado: Representar, no papel, três espécies químicas, utilizando um dos modelos representacionais do programa Chems sketch 11.0.

As estruturas representadas seguem modelo padrão do programa, acima citados, com a maior preferência para “*paus e bolinhas*”, os átomos estão dispostos no espaço, optando não formarem ângulos ortogonais, entretanto em planos diferentes (tridimensionalidade).

Na espécie química $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$, os estudantes (Die, Ju, Dio, Ke) representaram no papel a seqüência de carbonos formando “ziguezague”, (Die, Dio) destacam as ligações *Pi* outros não. Ora, esta formatação é compatível com estruturas orgânicas trabalhadas, representadas no programa Chems sketch e também visualizadas nos modelos representacionais: *arame*, *paus e bolinhas*, *pauzinhos* e *sólidos*. O fato de destacar as ligações *Pi* ou não é subjetivo, pois o programa não destaca tais ligações em seus formatos, exceto o modelo *arame* que não foi utilizado na representação da espécie em questão.

Em função destas análises comentadas, concluímos que a utilização do software educativo, para este grupo de estudantes, foi significativa em função dos relatos nas entrevistas pós-teste pertinentes a conceitos relacionados à geometria molecular, que se refletiram nas representações pós-teste, após o uso da ferramenta computacional.

Destacamos a presença do átomo central e afastamentos atômicos observados em torno dele, como conceitos pertinentes à geometria molecular. Possivelmente causado pela repulsão dos pares de elétrons, que caracteriza a teoria de repulsão dos pares de elétrons da camada de valência (TRPECV) - um modelo prático para prever a geometria molecular de uma espécie química, proposta por Gillespie e Ronald na década de 60, e muito utilizado na literatura do ensino médio.

Nas representações pós-teste (a) e (b) os estudantes elegem átomos centrais, fato não ocorrido no pré-teste, e a partir desta centralização seguem as demais ligações atômicas. É possível que a centralização atômica seja oriunda das espécies químicas representadas no software educativo que, conseqüentemente, tornaram-se significativas. Contudo, 16hs de atividades não são suficientes para uma afirmação segura.

CONCLUSÃO

Após a utilização do software educativo, percebemos formas de representações simbólicas no papel e organização atômica mais elaboradas, tanto para estruturas simples como para estruturas complexas. As representações produzidas no pós-teste, lembram conhecimentos relacionados à geometria molecular, como exemplo: a escolha do átomo central, nas representações pós-teste que, possivelmente, nos remete ao conceito dos pares de elétrons do átomo central, onde eleger um átomo central passa a ser uma prioridade.

As angulações não ortogonais e representações tridimensionais são procedentes deste mesmo conceito, onde o software educativo, através da visualização simbólica (modelos representacionais) explora; corroborando suas representações significativas no mesmo plano e/ou planos diferente. Característica do desenvolvimento da perspectiva - visão espacial que foi inédito no pré-teste.

Foi relevante constatar o entendimento das ligações atômicas, principalmente, das ligações *Pi* que ora é esboçado no papel ora não, entretanto os estudantes tem internalizado sua presença na espécie química e conseqüentemente conseguem representá-la, fato confirmado em entrevista, ainda que não haja tal visualização no modelo representacional mais utilizado – *paus e bolinhas*.

O modelo *arame* foi citado como o melhor para a visualização das ligações atômicas e os demais (*pauzinhos e sólidos*) pouco influenciaram seus desenhos, devido a distinção atômica e pouca visibilidade das ligações químicas, respectivamente.

Os critérios adotados para execução das representações pré-teste estão baseados, unicamente, na regra do Octeto que por falta de domínio e/ou inconsistência cognitiva da referida regra, conduzem a erros de ordem estrutural com geometria molecular irregular. No pós-teste a regra do Octeto continua sendo considerada, contudo é agregado nas suas representações, o conceito do átomo central. Observa-se nas representações pós-teste que as ligações atômicas partem dele, estruturando as espécies químicas adequadamente, obtendo-se uma geometria vigente, conforme IUPAC.

A linearidade na disposição atômica, característica marcante no pré-teste, foi suprimida no pós-teste, onde se percebe nos desenhos realizados, o cuidado com a estruturação da espécie química, seja simples ou complexa. Provavelmente, o software educativo fomentou tal adequação, baseando-se em conceitos implícitos de organização atômica, tornando-os explícitos nas suas representações.

Certamente, esta investigação aproxima o uso das tecnologias na educação – ensino da química, explorando suas aplicações, constatando limitações e despertando o interesse para novas investigações. Maior tempo de atividades utilizando o software educativo seja oportuno, bem como maior variedade de espécies químicas com geometria molecular conhecida. Também a investigação sobre os conceitos que permeiam a escolha correta do átomo central e como a utilização do software educativo pode enriquecer futuras representações no papel.

Evidentemente, o software educativo não nos torna iguais após seu uso, porém, comparando o pré-teste com pós-teste, percebemos que o uso do software educativo, como ferramenta, estimulou a visualização da disposição atômica, através de imagens tridimensionais e modelos representacionais, refletindo nas suas representações neste grupo de estudantes do ensino médio.

REFERÊNCIAS

AMARAL, A.; LOMBARDI, E.; SANTOS, V. J. R. M. **Sistema Interativo de Ensino: versão 2008**. Tatuí: Casa Publicadora Brasileira, 2008.

BOGDAN, R.; BIKLEN, S. **Investigação Qualitativa em Educação: uma introdução à teoria e aos métodos**. Portugal: Porto, 1994.

CARVALHO, Geraldo C. de. **Química Moderna**. São Paulo: Scipione, 1997.

COELHO, Lílian W.; JUNQUEIRA, G. M. A.; HERRERA, J. O. M.; MACHADO, S. de P. Aplicação de Mecânica Molecular em Química Inorgânica. **Química Nova**. São Paulo, v. 22, n. 3, mai. / jun. 1999.

DIAS, K. A. F. D; CARDOSO, A. A. Aspectos Macro e Microscópicos do Conceito de Equilíbrio Químico e de sua Abordagem em Sala de Aula. **Química Nova**, n. 27, fev. 2008. Disponível em: <<http://www.qnesc.sbq.org.br/online/qnesc27/08-peq-3106.pdf>>. Acesso em: 15 jul. 2008.

EICHLER, M.; DEL PINO, J. C. Computadores em Educação Química: estrutura atômica e tabela periódica, São Paulo: Química Nova, 2000.

EMERSON, T. **Virtual Reality Technology Selected Citations on Education anTraining Applications**. Dec. 1994. Disponível em: <http://www.hitl.washington.edu/projects/knowledge_base/edvr>. Acesso em: 05 ago. 2008.

FONSECA, Martha Reis Marques da. **Química Integral: 2º grau. v. único**. São Paulo: FTD, 1993.

FONSECA, Martha Reis Marques da. **Coleção completamente química, ciências, tecnologia e sociedade**. São Paulo, FTD, 2001.

FURIÓ, C.; CALATAYUD, M. L. **Journal of Chemical Education**, v. 1, n. 73, p. 36-41, 1996.

GIBIN, G. B.; FERREIRA, L. H. Relações entre Desempenhos de Alunos do Curso de Química com Enunciados Discursivos e com Imagens. 7º Jornada Científica da UFS. **Anais de Eventos da UFS**. São Paulo: Carlos, v. 3, p. 2010, abril, 2007.

GIORDAN, M. O Papel da Experimentação no Ensino de Ciências. **Química Nova na Escola**, n. 10, p. 43-49, 1999.

GRECA, I. M.; MOREIRA, M. A. **Além da Detecção de Modelos Mentais dos Estudantes, uma Proposta Representacional Integradora**: investigações em ensino de Ciências. Porto Alegre, 2002. Disponível em: <<http://www.ufrgs.br/ienci>>. Acesso em: 25 jul. 2008.

GRINGS, E. T. O.; CABALLERO, C.; MOREIRA, M. A. **Revista Brasileira de Ensino de Física**. São Paulo, v. 28, n. 4, 2006.

KOZMA, R. B.; RUSSELL, J. J. **Res Sci Teaching**, n. 34, p. 949, 1997.

KOZMA, R; CHIN, E.; RUSSEL, J. The Roles of Representations and Tools in the Chemistry Laboratory and Their Implications for Chemistry Learning. **The Journal of the Learning Sciences**, v. 9, n. 2, p. 105-143, 2000.

LEHNINGER, Albert L.; NELSON, David L.; COX, Michael M. **Princípios de Bioquímica**. 2. ed. São Paulo: Savier, 1995.

MATURANA, Humberto. **Cognição, Ciência e Vida Cotidiana**. Belo Horizonte: UFMG, 2001.

MELEIRO, Alessandra; GIORDAN, Marcelo. Hipermídia no Ensino de Modelos Atômicos. **Química Nova na Escola**, n. 10, p. 17-20, nov. 1999.

MELO, João R. Freitas de; MELO, Elda Silva do Nascimento. Softwares de Simulação no Ensino da Química: uma representação social na prática docente. **Educação Temática Digital**. Campinas, v. 6, n. 2, p. 43-52, jun. 2005.

MORAN, José Manuel. Novas Tecnologias e o Re-encantamento do Mundo. **Em revista: Tecnologia Educacional**. Rio de Janeiro, v. 23, n. 126, p. 24-26, set. / out. 1995.

MOREIRA, Marco Antônio. **A Teoria dos Campos Conceituais de Vergnaud**: o ensino de ciências e a pesquisa nesta área. Porto Alegre: UFRGS, 2002. Disponível em: <www.if.ufrgs.br/ienci>. Acesso em: 20 jul. 2008.

MUNDIM, Kleber C. **Estrutura de Átomos e Moléculas**: modelo VSEPR. out. 2000. Disponível em: <<http://www.unb.br/iq/kleber/CursosVirtuais/QG/aula-10/aula-10.html>>. Acesso em: 10 dez. 2008.

NETO, A. S. A.; KREUTZ, Danusa A.; MOREIRA M. A. Do Uso de Representações Simbólicas e seus Atributos no Aprendizado de Gases: evolução conceitual por aprendizagem significativa, de um perfil conceitual ou de representações e seus invariantes? **VI Encontro de Pesquisa em Ensino de Ciências**. Florianópolis: 2007.

OAIGEN, E. R. **Atividades extraclasse e não-formais**: uma política para a formação do pesquisador. Chapecó; Grifos, 1996.

PAVLINIC, Slavica; BUCKLEY, Paul; BURNS, Janet; WRIGHT, Tony. **Computing in stereochemistry – 2D or 3D representations?** Palmerston North, New Zealand: Institute of Fundamental Sciences – Chemistry, Department of Educational Studies

and Community Support, Massey University, 2001. Disponível em: <<http://www.ipn.uni-kiel.de/projekte/esera/book/b076-pav.pdf>>. Acesso em 25 jul. 2008.

PELUZZO, Tito M.; CANTO Eduardo L. **Coleção Base**: química. v. único, 1. ed. São Paulo: Moderna, 1999.

PELUZZO, Tito M.; CANTO Eduardo L. **Química**: na abordagem do cotidiano, 1ª edição, São Paulo: Moderna, 1993.

PINHO, M. S. Realidade Virtual como Ferramenta de Informática na Educação. **VII Simpósio Brasileiro de Informática na Educação**. Belo Horizonte, 1996.

RIBEIRO, Ângela A.; GRECA, Ileana M. Simulações Computacionais e Ferramentas de Modelização em Educação Química: uma revisão da literatura publicada. **Química Nova**. São Paulo, v. 26, n. 4, jul. / ago. 2003.

SANTOS, A. A.; GALVÃO, R. S. **Modelagem e Visualização 3D de Moléculas**. Salvador: Faculdade Ruy Barbosa, 2006. Disponível em: <http://minimol.files.wordpress.com/2008/02/monografiaalessandroraaphael_200611.doc>. Acesso em: 28 jul. 2008.

SANTOS, B. F. dos; PORRO, Sílvia. O Grupo Focal na Pesquisa sobre o Ensino de Química: mapeando representações docentes. **XVI Encontro Nacional de Ensino de Química**. Curitiba: UFPR, 21 a 24 jul. 2008. Disponível em: <<http://www.quimica.ufpr.br/eduquim/eneq2008/resumos/R0783-1.pdf>>. Acesso em: 05 ago. 2008.

SANTOS, F. M. T.; GRECA, I. M. Promovendo Aprendizagem de Conceitos e de Representações Pictóricas em Química com uma Ferramenta de Simulação Computacional. **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 4, n. 1, 2005.

SANTOS, W. L. P; MOL, G. de Souza. **Química & Sociedade**: ensino médio. v. único. São Paulo: Nova Geração, 2005.

SEBATA, C. E. **Aprendendo a Imaginar Moléculas: uma proposta de ensino de geometria molecular**. Dissertação mestrado. Brasília: Universidade de Brasília, dez. 2006. Disponível em: <http://www.unb.br/ppgec/dissertação/trabalhos/dissertação_claudiosebata.pdf>. Acesso em: 28 jul. 2008.

SOFTWARE Livre. Disponível em: <<http://br-linux.org/tag-softwarelivre>>. Acesso em: 06 mai. 2008.

TRINDADE, J. A.; FIOLEAIS, C. **A Realidade Virtual no Ensino e na Aprendizagem da Física e da Química**. Disponível em: <http://nautilus.fis.uc.pt/softc/Read_c/RV/Ensino/artigo.htm>. Acesso em: 10 jul. 2006.

VALENTE, M.; MOREIRA, H. **Estrutura de Lewis e Geometria Molecular**. out. / dez. 2006. Disponível em: <http://www.spq.pt/boletim/docs/boletimPQ_103_025_15.pdf>. Acesso em: 06 mai. 2008.

VI ENCONTRO de Pesquisa em Ensino de Ciências. 2007. **Anais do VI ENPEC**. Florianópolis: v. 1, p. 200-212, 2007.

WU, H-K.; SHAH, P. **Exploring Visuospatial Thinking in Chemistry Learning Science Education**, v. 88, n. 3, p. 465-492, 2004.

APÊNDICES

APÊNDICE 1

QUESTIONÁRIO PRÉ-TESTE

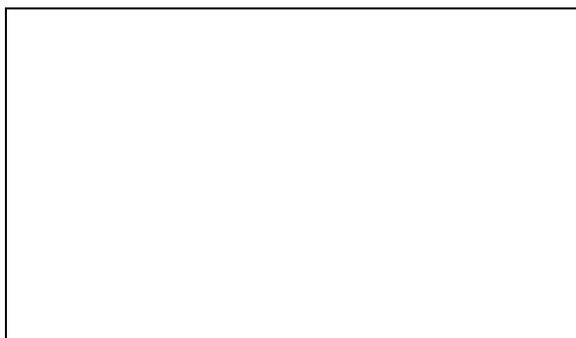
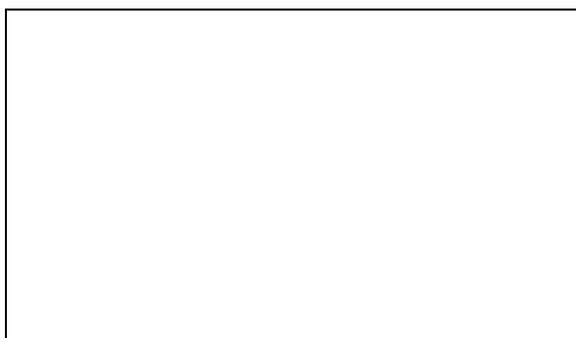
UNIVERSIDADE LUTERANA DO BRASIL
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DIRETORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Nome: _____

Data: _____

PRÉ-TESTE

Abaixo, estão algumas espécies químicas. Represente, no papel, estas espécies da forma que desejar, montando sua estrutura tridimensional.

1) H_2S 2) SOBr_2 3) PO_2Cl 

APÊNDICE 2

QUESTIONÁRIO PÓS-TESTE

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

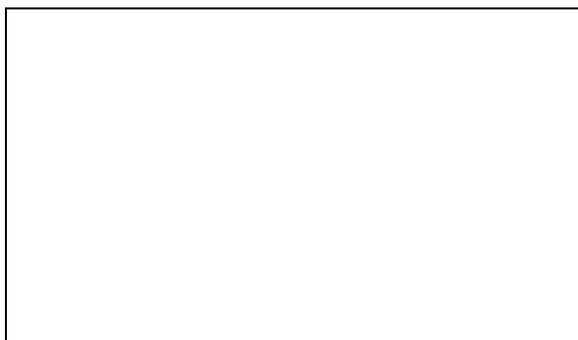
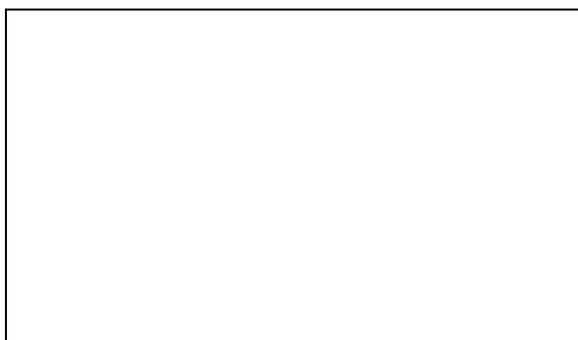
Nome: _____

Data: _____

PÓS-TESTE

a) Abaixo, estão listadas algumas espécies químicas. Represente, no papel, estas espécies da forma que desejar, montando sua estrutura tridimensional.

1) NOCl

2) SOCl₃3) CCl₂F₂

b) Observe as estruturas químicas. Represente-as, no papel, utilizando um dos modelos representacionais do programa Chemsket 11.

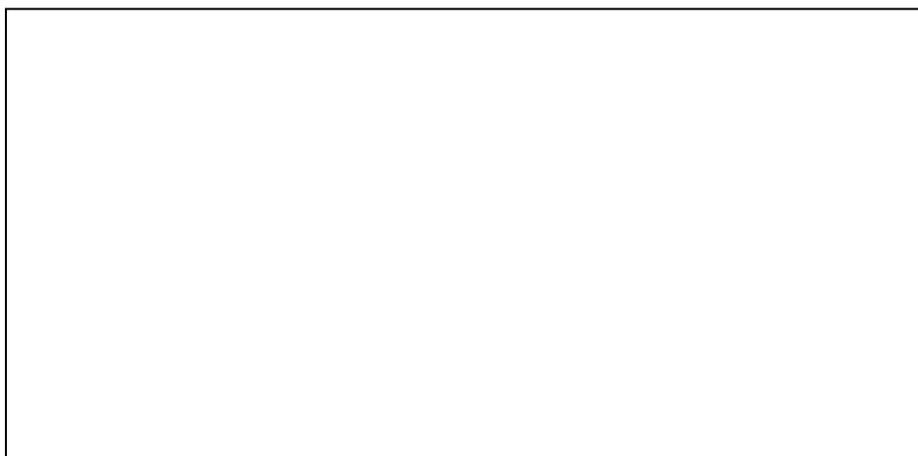
1) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$



2) $\text{C}_2\text{H}_5\text{ON}$



3) $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CHO}$



APÊNDICE 3

ATIVIDADES PARA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

APÊNDICE 4

ATIVIDADES: AULA DE REVISÃO

ANEXOS

ANEXO 1

ATIVIDADES PRÉ-TESTE

ANEXO 2

ATIVIDADES PÓS-TESTE

ANEXO 3

TRANSCRIÇÕES DAS ENTREVISTAS – PRÉ-TESTE

ANEXO 4

TRANSCRIÇÕES DAS ENTREVISTAS – PÓS-TESTE

ANEXO 5

MODELOS REPRESENTACIONAIS