

# Representações moleculares tridimensionais no ensino superior de Química: análise do conteúdo de livros introdutórios e sítios na internet

Tri-dimensional molecular representations in Chemistry higher education: content analysis of introductory textbooks and web sites

Rebeca dos Santos Cardoso, Lígia D'Ávila Bozzi e Guilherme A. Marson\*

\*gamarson@iq.usp.br

## Resumo

Este trabalho aborda o uso de representações moleculares tridimensionais em recursos didáticos adotados no ensino superior de Química. Foram analisadas as figuras de livros largamente utilizados em disciplinas de Química Geral, e o conteúdo de sítios da internet. A análise do conteúdo em livros revela grande ênfase dada a tais representações, as quais sublinham uma abordagem conceitual sub-microscópica em todos os livros analisados. Os livros são distintos quanto à ocorrência e distribuição dos tipos de representação tridimensional adotados. A análise de 97 sítios na Internet indica que é necessário aumentar a oferta de sítios que contemplem a interatividade da molécula com seu entorno textual e que favoreçam a recontextualização de conteúdos existentes e a criação de novos conteúdos pelos usuários. A importância das questões ligadas à visualização na proposição de ementas e na indicação dos materiais dos cursos introdutórios é discutida.

**Palavras-chave:** visualização; estrutura molecular; análise de livros; softwares interativos; ensino superior

## Abstract

This work approaches the usage of tri-dimensional molecular representations in didactic resources adopted in Chemistry higher education. Pictures of widely adopted General Chemistry textbooks and the content of Internet sites were analyzed. The content analysis of textbooks reveals that a significant emphasis was given to such representations, which underline a chiefly sub-microscopic conceptual approach in all books considered. The books are distinct regarding the occurrence and distribution of the types of tri-dimensional representations adopted. The analysis of the 97 Internet sites indicates that it is necessary to increase the offer of sites that: contemplate the interaction between the molecule and its entourage; favor re-contextualization of existing contents; facilitate creating new content by users. The importance of visualization related issues on the proposition of introductory course syllabuses and on the indication of course materials is discussed.

**Keywords:** visualization; molecular structure; textbook analysis; interactive software; higher education

## Introdução

Na Química, diversos conceitos são expressos através de imagens, destacando-se aqueles relacionados à estrutura molecular de compostos químicos. No cenário científico contemporâneo tais conceitos tornaram-se fundamentais não só na Química, mas nas áreas correlatas. É o caso, por exemplo da nanotecnologia, das ciências ambientais e do desenvolvimento de fármacos mais

eficazes. Estes conceitos permeiam também muitas disciplinas de diversos cursos de graduação. É o caso de cursos com ênfase no conteúdo químico como Química, Engenharia Química e Farmácia e com menor ênfase em química como geologia, engenharia de minas e metalúrgica, entre outros.

Inúmeras formas de representação da estrutura molecular de compostos químicos têm sido utilizadas na pesquisa e no ensino. Por exemplo, a dupla hélice do DNA tem sido representada de diferentes maneiras, destacando-se basicamente quatro categorias fundamentais: i- molecular bidimensional; ii- molecular tridimensional e suas variantes (bastões, bolas e bastões, volumes atômicos etc.); iii- superfície molecular; iv - representações esquemáticas da estrutura. As formas de representação têm sido mostradas em diferentes meios suporte como modelos físicos, material impresso e, mais recentemente, o meio digital. Tradicionalmente, modelos físicos têm sido propostos para finalidades didáticas, utilizando-se os mais variados materiais: rolhas e bastões de vidro, madeira, isopor, poliestireno, papelão etc.

Nos materiais didáticos impressos, é comum o uso de ilustrações com diferentes formas de representação da estrutura de moléculas, tendência que se acentua nos materiais dedicados ao ensino superior, em que os conceitos abstratos e microscópicos são tratados com mais frequência e profundidade do que no ensino médio.(Chandrasegaran et al. 2009; Treagust et al. 2003; Chittleborough et al. 2008; Adadan et al. 2009; Hand et al. 2010; Johnstone, 1991; Kozma, 1997; Kozma, 2003; Rappoport & Ashkenazi 2008) Com a ampliação do acesso a recursos computacionais, a utilização de modelos físicos cedeu lugar aos modelos gerados computacionalmente a partir de dados experimentais e de ferramentas de cálculo molecular, tanto na pesquisa quanto no ensino de Química e áreas afins.

A codificação em meio digital traz uma série de vantagens em relação aos modelos físicos, como por exemplo: i – baixo custo; ii – admite diferentes formas de representação, inclusive formas mistas na mesma molécula; iii – possibilita exprimir facilmente propriedades moleculares como momento de dipolo; iv – facilita a cópia, replicação e distribuição da estrutura da molécula; v- possibilita representar estruturas complexas impossíveis de se montar e manipular na forma física; vi - permite mostrar animações de processos moleculares dinâmicos como modos vibracionais e mecanismos de reações orgânicas. Essas vantagens podem se tornar efetivas quando, por exemplo, os modelos computacionais estejam vinculados à softwares que permitam a apropriação do computador como ferramenta (Giordan & Góis, 2005).

Apesar do uso disseminado de ilustrações e da disponibilidade de recursos computacionais, observam-se alguns fatores que limitam os benefícios potenciais do uso de representações moleculares no ensino de Química. Tais fatores podem ser divididos em três categorias, referentes a aspectos educacionais distintos: 1) disponibilidade de recursos didáticos; 2) ambiente de ensino e aprendizagem; 3) características dos estudantes como o perfil sociocultural, os conceitos prévios a motivação etc.

Os fatores ligados aos recursos didáticos relacionam-se à qualidade e ao acesso ao material disponível. Os livros usados nos cursos com abordagem molecular dos fenômenos se valem de muitas ilustrações da estrutura molecular dos compostos tratados. É de grande importância, portanto, que tais ilustrações contemplem quesitos tais quais: i - estar correta conceitualmente; ii - ser clara e possibilitar a interpretação das estruturas; iii – estar articulada com o conteúdo em texto e com outras figuras.

Nem sempre estes quesitos são contemplados satisfatoriamente nos materiais disponíveis. Salienta-se ainda a questão do acesso ao material adequado, o que inclui questões socioeconômicas e de idioma. No caso de material computacional, acrescentam-se fatores técnicos e operacionais.

Os fatores ligados ao processo de ensino e aprendizagem incidem sobre os aspectos curriculares e metodológicos em que são tratados os conceitos. Assim, incluem um feixe complexo de elementos que, como um todo, contribuem para ou dificultam o uso de representações de modelos moleculares para o aprendizado de conceitos específicos. Exemplos incluem as concepções de ensino do

docente, o tempo de instrução, a abordagem didática, a escolha de conteúdos disciplinares, a seqüência didática adotada, o método de avaliação, o desempenho docente etc.

Os fatores ligados aos estudantes abarcam as suas habilidades específicas, seus conceitos prévios e a motivação em relação ao curso, à disciplina, aos tópicos específicos e à atividade em que as representações moleculares estão presentes. No caso específico das representações moleculares, destaca-se a capacidade dos estudantes de interpretar estruturas tridimensionais e de transitar entre as diferentes formas de representação de moléculas. (Wu, 2010; Bilbokaitè, 2008; Cook, 2006; Gilbert, 2008)

Com efeito, a questão das representações múltiplas em química é considerado um ponto fundamental na natureza do conhecimento químico e num foco de dificuldade entre os estudantes para aprender Química e está intimamente ligada à interpretação de imagens utilizadas para representar os conceitos. (Justi & Gilbert, 2002; Chittleborough & Treagust, 2008; Ferreira & Arroio, 2009).

Este estudo se insere numa proposta mais ampla que se inicia com um mapeamento do uso de representações de modelos moleculares no ensino superior de Química. O presente estudo refere-se aos trabalhos na frente de pesquisa dedicada ao levantamento e a caracterização das representações de estruturas moleculares tridimensionais presentes em duas fontes de informação usadas por estudantes de cursos introdutórios na instituição em que se desenvolve a pesquisa<sup>1</sup>: o livro didático de ensino superior e os recursos computacionais de visualização da estrutura tridimensional de molécula interativos disponíveis gratuitamente na internet.

Este estudo visa delinear e caracterizar de forma geral o repertório de representações tridimensionais de estrutura molecular disponível em livros de Química Geral e em sítios da Internet.

## Metodologia

### Análise do conteúdo de livros de Química Geral

Foram selecionados os três livros mais freqüentemente indicados nas ementas das disciplinas introdutórias de Química Geral dos cursos de Química das seguintes instituições de ensino superior: Universidade de São Paulo, Universidade Estadual de Campinas, Universidade Estadual Paulista, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Universidade Federal de Minas Gerais e Universidade Federal da Bahia<sup>2</sup>. São eles: **Brown, T. L. et al.**, “*Química: a ciência central*”; **Matos, M. R. trad.** 9<sup>a</sup> Ed., São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2007.; **Atkins, P. e Jones, L** “*Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente*”; trad. 3<sup>a</sup> Ed, São Paulo: Bookman, 2006.; **3) Kotz, J. C.**, “*Química Geral e Reações Químicas*”; **Vichi, F. M. trad.** 6<sup>a</sup> Ed, São Paulo: Cengage, 2009.

Para cada livro, todas as figuras em todas os capítulos e anexos mostrando representações moleculares foram classificadas em categorias quanto a relação da figura com seu entorno (com vistas ao seu papel instrucional (Tabela 1)), bem como quanto ao tipo de representação molecular adotado, sendo adotadas as categorias seguintes: **2D** (estrutura molecular bidimensional); **2D estéreo** (como a 2D, com ligações representados átomos à frente e atrás do plano que contém a molécula); **2D esquemático** (representações que não adotam distâncias e ângulos de ligação padrão ou que apresentam outras formas ou desenhos representando moléculas ou parte das moléculas); **3D Bola-e-bastão** (representação tradicional de átomos como esferas e ligações como bastões); **3D Bastão** (representação de ligações apenas, como cilindros interconectados); **3D Volume**

---

1 Dado não publicados de pesquisa em progresso com alunos de graduação.

2 Informações obtidas nos sítios das instituições na internet

(representações de átomos como esfera adotando-se raios atômicos de van der Waals); **3D Arame** (representação de ligações apenas, como linhas finas); **3D Estrutura Secundária de Proteína** (representações de elementos da estrutura secundária de proteínas ou ácidos nucleicos: alfa-hélice, folha beta, curvas, fitas simples e duplas etc., como fitas planas); **3D Superfície** (representação da superfície isoeletrônica ou de acesso ao solvente); **3D Esquemático** (tal qual o 2D esquemático, porém para figuras tridimensionais).

Tabela 1: Categorias para classificação das relações entre o texto de entorno e a imagem:

Categorias	Relação figura entre figura e texto
0	Texto e figura são independentes. Não há menção da figura no texto e os assuntos não são correlatos.
1	Texto e figura são independentes. Não há menção da figura no texto mas os assuntos são correlatos.
2	Texto e figura são independentes. Há menção no texto mas a figura pouco facilita a compreensão do texto e vice e versa.
3	A figura facilita muito a compreensão e é mencionada no texto, mas não é imprescindível. Tratam de assuntos próximos.
4	A compreensão da figura e do texto é interdependente e tratam de assuntos próximos.
5	A compreensão da figura e do texto é interdependente e tratam do mesmo assunto.

*Nota: estas categorias foram propostas como parte do trabalho apresentado neste estudo tendo em vista relações possíveis entre informações em texto e imagem.*

Em todos os casos, cada figura foi analisada como o conjunto da imagem em si, seu título e a legenda correspondente<sup>3</sup>. Portanto, a referência ao texto neste estudo, refere-se ao texto corrido que acompanha a figura e não ao texto da legenda. Os critérios de classificação foram validados e testados pela análise em duplo cego das figuras de um terceiro livro<sup>4</sup>. No estudo também foram identificados os conceitos químicos associados a cada figura. Os dados foram compilados numa planilha para cálculo das frequências de ocorrência de cada categoria.

## **Análise do conteúdo de sítios na internet contendo representações moleculares interativas**

Foram identificados e analisados 97 sítios que contêm moléculas interativas em três dimensões a partir de buscas no motor Google (<http://google.com> - com palavras chave como “*molécula 3D*”, “*jmol*”, “*molécula interativa*”, “*chime*” etc.) durante o segundo semestre de 2010. Os sítios foram classificados e cadastrados quanto aos critérios listados abaixo.

Origem e idioma do sítio: País de origem; Idioma do conteúdo; Natureza da instituição mantenedora (universidade, escola, sítio pessoal etc.); Área do saber da instituição (Química, Física, Bioquímica etc.); Vínculo do autor/mantenedor do sítio (pesquisador, aluno, professor etc.).

Objetivos educacionais gerais: Finalidade declarada (educacional, pesquisa, divulgação) e Público-alvo (ensino superior, ensino médio, etc.).

Conteúdo: Conceitos químicos tratados; Frequência de atualização; Validação do conteúdo (revisão por pares etc.); Se o sítio figura de artigo sobre ensino; Articulação dos conteúdos no sítio (listagem

<sup>3</sup> Entendemos que desmembrar imagens das legendas e títulos descaracteriza a figura uma vez que estas são concebidas como um todo pelos autores.

<sup>4</sup> Marzzocco, A, e Torres, B. B; “Bioquímica Básica”; 3ª Ed, São Paulo: Koogan, 2007. O livro é muito usado em cursos iniciais de ensino superior e trata de conceitos químicos em mesmo nível de complexidade que os livros analisados.

não indexada em base de dados, repositório simples não articulado, repositório dinâmico com conteúdos articulados).

Interatividade da representação tridimensional: Interatividade disponível na molécula (apenas “*play e pause*”, manipular e alternar o tipo de visualização etc.); Relação da interatividade da representação da molécula com os conteúdos no entorno (sem relação; comandos a partir do entorno); Recursos de apropriação (*remissão* simples para a molécula; re-uso da molécula como objeto de aprendizagem sem ou com possibilidades de adaptação de conteúdo).

Tecnologia: a ocorrência das seguintes tecnologias<sup>5</sup> para visualização tridimensional de moléculas fora investigada: *Jmol*, *MDL Chime*, *Molecular Workbench*, *Marvin*, *Live Graphics 3D*, *ChemSymphony Lite*, *Cortona3D*, *Chemis3D*, *ADOBE Flash*.

## Resultados e discussão

### Análise das representações tridimensionais de moléculas presentes em livros de Química Geral

Foram analisadas 2134 figuras nos três livros, sendo 1162 representações tridimensionais.

Tabela 2: Importância dada ao uso de representações de estrutura molecular:

Livro	Total de figuras com representações de estrutura molecular			% da Área Impressa <sup>a</sup>
	total	2D	3D	
Brown	644	280	364	7 ()
Atkins	980	495	485	12 ()
Kotz	510	197	313	16 ()

<sup>a</sup> calculada a partir da área aproximada ocupada pela figura (25; 50; 75 ou 100% da página).

Os dados disponíveis na Tabela 2 ilustram a importância da visualização na construção e representação do repertório conceitual dos livros. Salienta-se que os livros não são homogêneos quanto a forma como dispõem destes recursos, seja na quantidade total de figuras consagradas à representação da estrutura de moléculas, seja na proporção entre representações bi (2D) e tri dimensionais (3D). A Tabela 2 mostra também os dados da estimativa do percentual da área impressa dos livros dedicada a estas representações, um parâmetro aproximado para a ênfase dada pelos autores para a representação de estruturas. Dos dados mostrados na Tabela 2, é possível inferir que os livros de Kotz e Brown, embora similares quanto ao número de figuras e à proporção 2D e 3D, são distintos quanto ao destaque destas figuras no texto como um todo.

5 “Moléculas interativas” são imagens 3D manipuláveis geradas a partir de arquivos de coordenadas atômicas.

A análise dos tipos de representação mais frequentes nos livros para os casos 2D e 3D nos fornece os dados apresentados na Tabela 3:

Tabela 3: Tipos de representações mais frequentes:

Livro	Representações 2D, % <sup>a</sup>			Representações 3D, % <sup>a</sup>		
	Simples	Estéreo	Outros	Bola-e-bastão	Volume	Outros
Brown	91	7	2	27	69	2
Atkins	98	2	0	44	49	5
Kotz	94	6	0	58	38	4

<sup>a</sup>: calculado separadamente sobre o total de figuras nas categorias 2D e 3D em cada livro.

Nota-se nos três livros a predominância das representações 2D tradicionais. No caso das 3D, embora haja predominância dos tipos Bola-e-bastão e Volume, identificam-se diferenças de abordagem. Considerando-se que, em geral, os três livros constam das ementas das disciplinas introdutórias e são tomados como equivalentes por professores e estudantes. Porém, nota-se que, para as questões representacionais levantadas aqui, a escolha de um livro ou outro pode ser relevante para o aprendizado dependendo do grau de desenvolvimento das habilidades visuo-espaciais dos estudantes, o que, grosso modo, não costuma ser levado em conta na recomendação de livros de estudo. Ademais, é interessante notar que no livro de Brown predominam o modo Volume o que não é o mais indicado para tratar de conceitos em que se deseje saber posições de átomos e ligações. Portanto, é pertinente saber para quais conceitos se recorre mais a representações 3D e qual a associação entre estes e o tipo de representação 3D. Tais dados são apresentados nas tabelas 4 e 5, respectivamente.

Tabela 4: Conceitos com maior incidência de representações tridimensionais:

Conceito	Livros		
	Brown, % <sup>a</sup>	Atkins, % <sup>a</sup>	Kotz, % <sup>a</sup>
Geometria molecular	14	8	8
Estrutura eletrônica de átomos e moléculas	15	15	6
Outros	71	77	85

<sup>a</sup> cada figura foi classificadas em até quatro categorias conceituais; os dados % incidem sobre o total de categorias de conceitos para todas as figuras 3D, para cada livro.

Tabela 5: Tipos de representação tridimensional associadas a conceitos específicos:

Grupos conceituais	Tipos de representação	Livros (dados em % <sup>a</sup> )		
		Brown	Atkins	Kotz
Estrutura eletrônica de átomos e moléculas	Volume	70	71	11
	Bola-e-bastão	30	29	89
Geometria molecular	Volume	36	63	32
	Bola-e-bastão	64	32	64

<sup>a</sup> % sobre o total de figuras em cada categoria conceitual, para cada livro.

A análise dos dados da Tabela 4 indica que o uso de representações tridimensionais é amplamente disseminado em diversos tópicos em todos os livros, mas que, como poderia se esperar, existe

recorrência nos conceitos de Geometria Molecular e Estrutura eletrônica de átomos e moléculas. Há de se considerar que, para todos os livros, estes grupos conceituais surgem distribuídos em vários outros conteúdos como por exemplo conceitos de química orgânica e de propriedades moleculares. Isto indica, pois, que estes textos, embora introdutórios, são muito similares quanta a grande ênfase na dimensão submicroscópicas dos temas tratados. Considerando-se que esta é justamente uma dimensão conceitual complexa para ser interpretada e compreendida pelos estudantes, a escolha do tipo de representação tridimensional adotado é um fator importante a ser considerado. Os dados da Tabela 5 nos revelam que, nestes grupos conceituais, há predominância das formas Volume e Bola-e-bastão em todas as obras analisadas. Contudo, há diferenças fundamentais na utilização.

Os resultados apresentados indicam que os livros Brown e Atkins são muito semelhantes quanto ao tipo de representação adotado para tratar de conceitos associados à descrição da estrutura eletrônica de moléculas e suas associações com propriedades moleculares, ao passo que no livro Kotz há, nos dois grupos de conceitos considerados na correlação, uma predominância de representações do tipo Bola-e-bastão, indicando que há uma intenção em salientar a ordem das ligações e os elementos químicos constituintes das moléculas. Do ponto de vista pedagógico, nota-se no livro Kotz a adoção de um esquema coeso de representação de moléculas associado à natureza sub-microscópica dos conceitos químicos, com predominância de tipos de representação mais detalhadas. É possível considerar, ainda, que a adoção de representações do tipo Bola-e-bastão favoreça a transposição de representações bidimensionais para modelos tridimensionais, uma vez que, no caso das representações do tipo Bola-e-bastão, representam-se átomos e ligações tal qual nos modos bidimensionais de representação molecular.

Pelo exposto, um fator importante a se considerar é qual importância relativa das figuras que representam estruturas tridimensionais na sua relação com o texto. A relação entre as figuras e seu entorno foram estudadas a partir dos dados obtidos com a aplicação do sistema de categorias apresentado na Tabela 1. Os resultados obtidos foram organizados tal qual apresentado na Tabela 6 a seguir:

Tabela 6: Relação entre texto de entorno e imagem:

Assunto	Interdependência entre texto e imagem	Figuras 3D, %		
		Brown	Atkins	Kotz
Mesmo assunto	A compreensão do texto e da imagem fica comprometida se tomados separadamente.	54	57	54
	A imagem facilita muito a compreensão do texto. A imagem pode ser compreendida separadamente, mas o texto depende da imagem para ser compreendido.	38	17	17
Assuntos correlatos	A imagem facilita a compreensão do texto. A imagem e o texto podem ser compreendidos separadamente.	7	18	26

Os resultados apresentados na Tabela 6 indicam maior uniformidade nos livros analisados quanto à relação texto e imagem e, sobretudo, ao papel desempenhado pelas representações tridimensionais na composição da informação contida nos livros. Cerca de metade das figuras são interdependentes do texto, confirmando o já conhecido papel do uso de imagens na linguagem química. Nota-se alguma variação nos casos em que texto e imagem não são vinculados. Contudo, como era de se esperar nas obras analisadas, não há figuras de estrutura molecular como elementos meramente acessórios ou desvinculados do texto, reforçando a relevância dada a estas pelos autores. Retomando as discussões anteriores, a análise dos dados da Tabela 6 reforça o papel importante dado às figuras contendo representações tridimensionais nas obras analisadas. Sublinha, portanto, a ênfase dada à dimensão sub-microscópica dos conceitos tratados, não só nos capítulos referentes à estrutura da matéria, mas em diversos tópicos.

## **Análise de sítios da internet contendo representações tridimensionais interativas de estruturas moleculares**

### **Origem, idioma e instituição mantenedora e responsáveis pelos sítios**

Dos 97 sítios analisados, a maior parte é de instituições localizadas nos Estados Unidos da América (38) e França (17), sendo do Brasil 5 sítios. Os idiomas mais comuns são o inglês (60) e o francês (18). Apenas 10 sítios estão em português, sendo a maior concentração (5) no Brasil. As universidades são as instituições que mais disponibilizam moléculas tridimensionais interativas (45), estando a maior parte dos sítios dispersos em outras categorias (39). Os sítios pessoais correspondem a um pequeno parcela do total analisado.(10). Dos 5 sítios sediados em instituições brasileiras, 3 pertencem a universidades e 1 à Sociedade Brasileira de Química. Nas universidades, os departamentos e institutos de Química (32), Biologia (14), Bioquímica (13) e Física (11) são os maiores provedores deste tipo de informação. Nos sítios brasileiros, a maioria (4) provém das áreas de Química (2) e Bioquímica (2).

Ao investigar-se o vínculo dos autores/coordenadores/responsáveis, constatou-se que grande parte (52) não fornece qualquer informação. Nos casos nos quais essa identificação fora possível, os responsáveis mais comuns pela manutenção dos sítios ocupam a posição de professor de ensino superior (38). São poucos os sítios mantidos por professores do ensino médio.

### **Objetivos educacionais gerais**

A finalidade mais comumente declarada nos sítios é educacional (78), em geral voltado para o ensino superior (79). No caso dos sítios brasileiros, todos os têm finalidade educacional, sendo 3 dedicados também ao ensino médio.

### **Conteúdo**

Assim como no caso das figuras dos livros, ao conteúdo dos sítios foram atribuídos até 4 grupos conceituais. Os conceitos químicos específicos que mais figuram nos sítios analisados são estrutura molecular (de maneira geral) (70) e estrutura de biomoléculas (29). Outros conceitos ocorrem de forma dispersa e compõe um todo relevante (57). Nos sítios brasileiros, os mesmos tópicos prevalecem (estrutura molecular química geral (4) e bioquímica e biomoléculas (4)).

Tratando-se da articulação dos objetos interativos, 60 sítios apresentam a molécula tridimensional como unidade estanque de conteúdo e como único tipo de conteúdo. 35 sítios disponibilizam este conteúdo como um repositório simples, isto é, utilizam algum tipo de base de dados, mas disponibilizam uma lista de moléculas descontextualizada de outros conteúdos. Portanto, usam a base de dados apenas para organização de itens, mas não para correlacioná-los, por exemplo, em eixos temáticos de navegação. De maneira geral, pouca ou nenhuma informação é apresentada sobre os usos da substâncias correspondente à molécula, ou sequer sobre suas propriedades físicas. Apenas 2 dos sítios analisados, 1 deles no Brasil, apresentam as moléculas no contexto das propriedades e aplicações das substâncias correspondentes.

A maioria dos sítios não informa a frequência de atualização do conteúdo. Daqueles que a indicam a maior parte o faz em intervalos superiores a 1 ano. Dos sítios analisados 94 não dispõem informações sobre os procedimentos de revisão/validação, sendo poucos os que indicam a existência de um corpo editorial ou equivalente. Na imensa maioria dos casos o autor é o único responsável pelo conteúdo. A confiabilidade das informações é decorrente da credibilidade da instituição que mantém o sítio.

### **Figuração em artigos acadêmicos dedicados ao ensino**

Uma grande parte dos sítios tanto estrangeiros como brasileiros não possuem citações em artigos, seja como produto, como objeto de pesquisa ou como recurso metodológico de ensino ou de

pesquisa. Dos sítios estrangeiros, notou-se que, daqueles poucos que foram objetos de publicação, a maior parte foi divulgada no Journal of Chemical Education.

### **Interatividade do objeto contendo a representação tridimensional interativa**

A interatividade das moléculas em si foi analisada segundo a escala: 1 - controle de animação simples (começar, pausar, avançar, retroceder); 2 - menu do *plug-in* (menu comumente oculto, visível por solicitação do usuário, com opções de visualização de átomos, ligações, superfícies etc.), 3 - opções de visualização criadas especificamente para salientar pontos de interesse, com ou sem texto; 4 - simulações; 5 - edição da molécula (categoria máxima). Dos sítios analisados, 50 não possuem dispositivos de interatividade específicos, limitando-se a apresentar a molécula e, eventualmente, instruir o usuário a acionar um menu oculto com opções de visualização do próprio *plug-in* usado para mostrar a molécula. Vários (36) sítios disponibilizam botões ou outros recursos próprios visando a facilitar ou automatizar funções específicas como, por exemplo alternar entre os diferentes tipos de representação da molécula. Na maior parte dos casos, cabe ao usuário, escolher o que salientar e como posicionar a molécula, tarefa nada trivial para os não versados em Química, e, dependendo da molécula, para os químicos não especialistas naquela classe específica de compostos. No universo investigado, apenas 1 sítio brasileiro permite a construção da molécula de forma simples.

Foi analisado também a relação entre a molécula e seu entorno, sobretudo a informação textual. Em 41 dos sítios a molécula é apresentada isoladamente, sem qualquer texto que a relacione com suas aplicações ou com elementos conceituais. Contudo, há sítios (27) em que a molécula e o texto estão intimamente relacionados quanto ao conteúdo através de comandos de interatividade disparados do texto (24). Este último recurso é considerado fundamental, pois permite explicitar relações conceituais entre as propriedades microscópicas da matéria e o comportamento macroscópico tratado no texto. Pode, portanto ser explorado como um facilitador do processo de ensino e aprendizagem de uma questão central na Química: a relação entre estrutura e reatividade dos compostos. Adicionalmente, nestes casos, este tipo de integração com o entorno pode suplantam a ausência de recursos específicos na molécula em si.

Um ponto fundamental no uso de ferramentas de mediação é a possibilidade de apropriação. A análise dos recursos de apropriação do conteúdo disponíveis ao usuário revela que apenas 4 sítios permitem reusar o conteúdo em outros contextos, sendo que apenas 1 sítio brasileiro permite adaptá-lo ao novo contexto. A maioria (87) não oferece nenhum recurso específico, ou seja, a única forma de relacionar o conteúdo do sítio a outros contextos é remissão simples como hipertexto. A questão da reutilização de conteúdo é um divisor de águas na forma como os usuários interagem com a informação digital. O reuso permite classificar o conteúdo como objeto de aprendizagem, tornando-o componente de um mosaico de informações a ser constituído pelo educador de modo a atender objetivos educacionais específicos. A inexistência de recursos que facilitem este tipo de uso obriga o usuário a mudar de contexto ao seguir um *hyperlink*, o que, em muitos casos, resulta em dispersão e perda do foco original de estudo. Dificuldades de reutilização podem, portanto, criar empecilhos tanto para o professor interessado em usar uma molécula de um sítio externo em seu material didático digital quanto para o aluno interessado em aprender com este material. Portanto, a existência de recursos de recontextualização e apropriação é altamente desejável.

### **Tecnologia**

As ferramentas de visualização mais adotadas são os *plug-ins Jmol* (42) e *Chime* (21), ambos derivados do software *RasMol*, que se tornou popular na década de 1990. Um dos fatores determinantes na tecnologia é a facilidade de uso e, no caso da Internet, a portabilidade, isto é, a possibilidade de ser executada em diferentes plataformas.

Os resultados apresentados indicam fortemente que, embora haja soluções tecnológicas bem estabelecidas para a disponibilização de moléculas tridimensionais interativas, ainda é pouca a

oferta de sítios que busca aproveitar as potencialidades desta ferramenta em sua plenitude. Como em outros casos de material instrucional desenvolvido com as novas tecnologias da informação e do conhecimento, muitos saberes construídos e divulgados pela comunidade de ensino de ciências parecem ser sistematicamente ignorados pelos desenvolvedores deste tipo de material. Predominam coleções de moléculas que operam como unidades estanques de conteúdo as quais não oferecem nenhum subsídio para orientar sua exploração. Ainda são poucos os sítios que oferecem recursos de apropriação que permitam ao professor e ao estudante se apropriar do objeto tridimensional e incorporá-lo em outros contextos.

### Sítios de destaque

Um dos frutos do estudo foi a identificação de alguns sítios que considera-se os mais interessantes no conjunto dos quesitos analisados. São eles:

Química Nova Interativa (<http://qnint.s bq.org.br>): mantido pela Sociedade Brasileira de Química, o sítio dedica-se ao ensino médio e superior. Traz um acervo crescente de conteúdos oriundo da revista Química Nova na Escola (QNEsc). As moléculas disponíveis no sítio são articulados aos conteúdos temáticos da QNEsc e podem ser reutilizadas facilmente em outros contextos.

Laboratório de Pesquisa em Ensino de Química e Tecnologias Educativas (<http://quimica.fe.usp.br/labdig/>): sítio do grupo de pesquisa homônimo, sediado na Faculdade de Educação da Universidade de São Paulo. Disponibiliza diversos recursos para o ensino de Química, destacando-se um construtor e visualizador de moléculas.

Biblioteca Digital de Ciências (<http://www.bdc.ib.unicamp.br>): sítio mantido pelo Laboratório de Tecnologia Educacional, sediado no Instituto de Biologia da Universidade Estadual de Campinas. O sítio apresenta um vasto repositório de materiais instrucionais digitais revisados, destacando-se, no assunto deste trabalho, o *Tutorial sobre Estrutura de Proteínas*. Apresenta a possibilidade de submissão de materiais pelos usuários.

Laboratório de Biologia Molecular Aplicada (<http://www6.ufrgs.br/favet/lbma/moleculas.htm>): sítio do grupo homônimo sediado na Faculdade de Veterinária da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, apresenta uma coleção de moléculas de interesse biológico, cobrindo diversos tópicos da disciplina de bioquímica. As estruturas possuem opções de visualização facilitadas.

Molecule of the Month (<http://www.chm.bris.ac.uk/motm/motm.htm>): sítio mantido pelo Departamento de Química da Universidade de Bristol, no Reino Unido. Este é talvez uma das primeiras coleções de moléculas tridimensionais, sendo ativo desde 1996. As estruturas tridimensionais são apresentadas sempre em contexto com a substância correspondente, para a qual são relacionados fatos históricos, científicos e sócio-econômicos.

### Considerações finais

Os resultados confirmam que representações moleculares tridimensionais desempenham um papel importante nos livros comumente adotados nas disciplinas introdutórias dos cursos de graduação em Química. Em parcela significativa das representações de estrutura molecular analisadas, é empregado pelo menos algum tipo de modo em três dimensões. No tocante as representações tridimensionais, este estudo nos permite concluir que os livros convergem na ênfase dada ao tratamento sub-microscópico dos conceitos. Isto se explicita na quantidade de figuras com representações tridimensionais, na sua presença em diversos tópicos (além daqueles consagrados à estrutura molecular) e no papel que essas figuras têm na interpretação do texto. Pergunta-se se esta seria a melhor abordagem para os textos introdutórios e se o papel que é dado aos livros com esta abordagem é o mais indicado para os estudantes destes cursos. Se os livros convergem na ênfase a uma abordagem sub-microscópica, não são equivalentes quanto ao tipo de representação adotado e sua distribuição. Considerando-se estas diferenças e o lugar que o livro didático ocupa como fonte

de informação, pergunta-se se as questões de visualização e de interpretação de moléculas são levadas em conta na concepção das ementas e no planejamento pedagógico dos cursos.

Uma alternativa promissora para facilitar a interpretação de estruturas moleculares em três dimensões e desenvolver habilidades de visualização seria a mobilização do repertório interativo gratuito disponível na Internet. Seria desejável que tais sítios: contemplassem a interatividade entre texto e molécula; fossem versados em língua portuguesa; contemplassem modos de apropriação para além da informação, incluindo possibilidades de recontextualização e autoria. Neste estudo nota-se que este não é o caso da maior parte dos sítios disponíveis. Felizmente para a comunidade lusófona, as alternativas mais promissoras são sítios em língua portuguesa.

Tanto no caso das figuras dos livros quanto dos sítios, as soluções parecem convergir para a incorporação de saberes sobre o papel das imagens na formulação de conceitos. É necessário, pois, intensificar as investigações neste campo e criar meios que se traduzam em diretrizes bem estabelecidas para a criação de recursos educacionais de visualização da estrutura tridimensional de moléculas. Igualmente premente nos parece fazer difundir estas idéias entre os docentes envolvidos em cursos introdutórios de Química, a começar, talvez pela busca de respostas para as questões levantadas neste estudo.

## Agradecimentos

Ao CNPq pela bolsa de iniciação científica concedida à Lígia D'Ávilla Bosi.

Ao programa Ensinar com Pesquisa, da Pró-Reitoria de Graduação da Universidade de São Paulo, pela bolsa concedida à Rebeca Cardoso.

## Referências

ADADAN, E.; IRVING, K. E.; TRUNDLE, K. C.A, Impacts of Multi-Representational Instruction on High School Students' Conceptual Understandings of the Particulate Nature of Matter, **International Journal of Science Education** v. 31, n. 13, p. 1743-1775, 2009.

BILBOKAITÈ, R., Analysis of visual thinking meaning in science education, **Problems of Education in the 21st Century**, v. 4, n. 4, p. 7-13, 2008.

CHANDRASEGARAN, A. L.; TREAGUST, D. F.; MOCERINO, M., Emphasizing Multiple Levels of Representation to Enhance Students' Understandings of the Changes Occurring during Chemical Reactions, **Journal of Chemical Education**, 86(12), 1433-1436, 2009.

CHITTLEBOROUGH, G.; TREAGUST, D., Correct Interpretation of Chemical Diagrams Requires Transforming from One Level of Representation to Another, **Research on Science Education**, v. 38, n. 4, p. 463-482, 2008

COOK, M. P., Visual Representations in Science Education: The Influence of Prior Knowledge and Cognitive Load Theory on Instructional Design Principles, **Science Education**, v. 90, p. 1073-1091, 2006.

FERREIRA, C. ; ARROIO, A., Teacher's education and the use of visualizations in chemistry instruction, **Problems of Education in the 21st Century**, v. 16, p. 48-53, 2009.

GILBERT, J. K. (2008), Visualization: An emergent Field of Practice and Enquire in Science Education. In J. K. Gilbert, M. Reiner and M. Nakhle (Eds.), Visualization: Theory and Practice in Science Education (pp. 3-24). Springer.

GIORDAN, M., GÓIS, Jackson . Constructor of molecular objects: an interface for creation and visualization in computing environments. **Enseñanza de las Ciencias**, v. extra, p. 1-4, 2005.

HAND, B.; CHOI, A., Examining the Impact of Student Use of Multiple Modal Representations in Constructing Arguments in Organic Chemistry Laboratory Classes, **Research on Science**

**Education**, v. 40, n. 1, 29-44, 2010.

JOHNSTONE, A. H., Why Is Science Difficult to Learn? Things Are Seldom What They Seem, **Journal of Computer Assisted Learning** v. 7, n. 2, 75-83, 1991.

JUSTI, R. S., GILBERT, J. K., Modelling, Teachers' Views on the Nature of Modelling, and Implications for the Education of Modellers, **International Journal of Science Education**, v. 24, p. 369-387, 2002.

KOZMA, R. B., Technology and classroom practices: an international study, **Journal of Research on Technology in Education**, v. 36, n. 1, p. 1-14, 2003.

KOZMA, R. B.; RUSSELL, J., Multimedia and Understanding: Expert and Novice Responses To Different Representations of Chemical Phenomena, **Journal of Research on Science Teaching**, v. 34, n. 9, p. 949-968, 1997.

RAPPOPORT, L. T.; ASHKENAZI, G., Connecting Levels of Representation: Emergent versus Submergent Perspective, **International Journal of Science Education**, v. 30, n. 12, p. 1585-1603. 2008

TREAGUST, D. F., CHITTLEBOROUGH, G AND MAMIALA, T. L., The Role of Submicroscopic and Symbolic Representations in Chemical Explanations, **International Journal of Science Education**, v. 25, n. 11, p. 1353-68, 2003.

WU, H-K., Modelling a Complex System: Using Novice-Expert Analysis for Developing an Effective Technology-Enhanced Learning Environment, **International Journal of Science Education**, v. 32 n. 2 p195-219, 2010.