

UMA REVISÃO DE LITERATURA RELATIVA AO USO DE SOFTWARES DE MODELAGEM MOLECULAR NA EDUCAÇÃO QUÍMICA

A Review of Literature Concerning the Use of Software of Molecular Modeling in Chemistry Education

Autores: Adriana de Farias Ramos; Agostinho Serrano

IFRS – Campus Porto Alegre; ULBRA/RS

adriana@ifrspoa.edu.br; asandraden@gmail.com

RESUMO

Este trabalho busca oferecer uma breve revisão da literatura acerca da utilização de *softwares* de modelagem molecular no ensino de química nos últimos dez anos, promovendo uma reflexão sobre as possibilidades de utilização destas ferramentas nos currículos de química. Foram pesquisados os termos “modelagem molecular”, “molecular modeling” e “modelaje molecular” nos títulos, resumos e palavras-chave de artigos publicados nos principais periódicos especializados em Educação Química do Brasil, da América Latina, dos Estados Unidos e da Europa. A modelagem molecular a partir do uso de *softwares* tem se tornado ferramenta importante para a química profissional, bem como facilitadora na compreensão das propriedades de átomos e moléculas. No entanto, apesar dos esforços de pesquisadores e de fomento governamental, existem muito poucas publicações em pesquisa em educação química sobre modelagem molecular, que possam contribuir para a formação inicial e continuada de professores de química, assim como demais profissionais da área.

Palavras-Chave: Ensino de Química; Modelagem Molecular; Química Computacional; Revisão de Literatura.

ABSTRACT

This paper aims to offer a brief review of the the literature about the use of molecular modeling software in teaching chemistry in the last ten years, promoting a reflection regarding the possibilities of using these tools in the curriculum of chemistry. We searched the terms "molecular modeling", "molecular modeling" and "molecular modelaje" in the titles, abstracts and keywords of the main journals of chemical education in Brazil, Latin America, the United States and Europe. Computer molecular modeling has become an important tool for chemistry professionals, as well as facilitating the understanding of the properties of atoms and molecules. However, despite the efforts of researchers and government promotion, there are few publications

in chemistry education research on molecular modeling, which can contribute to initial and continuing education of teachers in chemistry, as well as other professionals.

Key-words: Chemistry Teaching; Molecular Modeling; Computational Chemistry; Review of Literature.

INTRODUÇÃO

Este artigo pretende apresentar uma breve revisão da literatura acerca da utilização de softwares de modelagem molecular no ensino de química, publicados nos principais periódicos especializados em educação química na América Latina, Estados Unidos e Europa. Partindo dessa realidade, promovemos uma reflexão sobre as possibilidades de utilizações de software de modelagem molecular nos currículos dos cursos de química no Brasil.

MODELAGEM MOLECULAR: SITUANDO A QUESTÃO

Santos (2001) define, dentro da literatura em educação química, que modelagem molecular constitui “*a aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria*”. O autor informa que, historicamente, a modelagem molecular surgiu com a necessidade de representação das fórmulas estruturais das moléculas, ocorridas inicialmente em 1874 com as contribuições de van't Hoff e Le Bel, para o arranjo tetraédrico do carbono.

Por sua vez, a IUPAC – que representa a comunidade de pesquisadores em Química – conceitua modelagem molecular como:

*A parte da química que trata da investigação de estruturas moleculares e propriedades usando a química computacional e técnicas de visualização gráfica, a fim de fornecer uma representação plausível tridimensional sob um determinado conjunto de circunstâncias” (PAC, 1997, pg. 1147).
Tradução nossa.*

No entanto, as dificuldades matemáticas encontradas na solução das equações da mecânica quântica, em especial a solução correspondente para a equação de Schrödinger, impediram avanços mais significativos desde a década de 1930 (FREITAS, 1998). Segundo o autor, essa dificuldade leva ao surgimento da química quântica e a um longo caminho de afirmação desta nova ciência até meados da década de 1960, quando John A. Pople “*vislumbra que a sinergia entre facilidades computacionais e programas eficientes desempenharia um papel importante no desenvolvimento da pesquisa química*”.

A modelagem molecular tem como principal objetivo prever o comportamento de sistemas reais. É a partir dela que podemos prever e descrever o comportamento de estruturas moleculares antes mesmo de sintetizá-las em laboratório. Para tanto, é preciso estabelecer e definir um modelo que possa descrever corretamente o comportamento de um sistema, incluindo

as interações intermoleculares e intramoleculares; realizar os cálculos necessários e analisar os resultados obtidos a fim de chegar à conclusão da validade do modelo.

Com o avanço da tecnologia, as ferramentas computacionais tornaram-se cada vez mais poderosas e os *softwares* cada vez mais utilizados na tarefa de desenvolvimento de novos compostos. Rodrigues (2001) aborda os métodos de desenvolvimento de fármacos e aponta que “a maioria dos programas de modelagem molecular são capazes de desenhar a estrutura molecular e realizar os cálculos de otimização geométrica e estudos de análise conformacional”.

Além disso, os *softwares* de modelagem podem ser utilizados para efetuar o planejamento teórico de novas moléculas; para definir parâmetros estéricos e eletrônicos; para compor o mapa de potencial eletrostático, bem como todas as informações sobre os orbitais HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) e LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), dentre outros.

A modelagem molecular também é largamente utilizada na produção de fármacos (BARREIRO, 2002), na criação de estratégias de combate à AIDS (PEÇANHA, 2002), na pesquisa de processos de polimerização (LENZI, 2004), na obtenção de novos produtos para a indústria de cosméticos (SCOTTI, 2007), dentre várias outras aplicações largamente descritas em artigos publicados nos periódicos da área encontrados nesta revisão.

Segundo nosso ponto de vista, investigar a modelagem molecular como recurso didático é de interesse da comunidade de educação química latino-americana, pois como veremos mais adiante, nos Estados Unidos vários são os relatos desta utilização como recurso didático, ao passo que na América Latina, e em especial no Brasil, o mesmo não acontece. Fazemos aqui a ressalva que a comunidade que utiliza modelagem molecular para fins científicos no Brasil (a comunidade de Química Quântica) é uma das mais produtivas do mundo, mas este artigo foca na produção em Educação Química.

A importância deste tema também cresce na medida em que as ferramentas computacionais tornam-se cada vez mais poderosas e, de certa forma, acessíveis aos docentes e alunos. Aliado a isso está a busca dos pesquisadores de educação química em estratégias que visem a melhoria da compreensão conceitual dos alunos (RIBEIRO; GRECA, 2002).

Hessley (2004) argumenta com muita clareza todas as potencialidades possíveis do uso de *softwares* de modelagem molecular no ensino de química, pois estes auxiliam os alunos na visualização da natureza dinâmica de átomos, das ligações e das moléculas. Tais ferramentas, segundo a autora, abordam conceitos abstratos e de difícil apropriação por parte dos alunos, e que estão no cerne da base conceitual da química, tais como: distribuição de elétrons, tamanho de átomos e íons, diversos movimentos de ligações, formatos de orbitais moleculares, dentre outros.

A autora ainda salienta:

(...) A Formulação de imagens visuais para conceitos abstratos em química tem sido feita para tornar mais fácil aos alunos a compreensão e retenção dos significados e importâncias, para compreender mais plenamente o significado dos termos, e para mais facilmente fazer

conexões entre os conceitos relacionados. (HESSLEY, 2004, pg.1).
Tradução nossa.

Dessa forma, a formação inicial dos professores poderia ser facilitada, assim como a transposição didática para a utilização destes softwares de modelagem molecular no nível do ensino médio.

A MODELAGEM MOLECULAR E OS CURRÍCULOS DE FORMAÇÃO DE PROFESSORES

O fato dos alunos não nutrirem interesse pelas aulas e conteúdos de química, na educação básica, não é novo. Isso, muitas vezes, não ocorre por opção desses alunos, e sim pela forma predominante como o ensino de química é ministrado desde os anos finais do ensino fundamental.

Segundo Chassot (1993), a forma como os conceitos de química são abordados é extremamente *“burocrática, asséptica, abstrata, dogmática e não histórica, privilegiando a memorização”*. Outros fatores também vão contribuir para a caracterização desse cenário negativo. Dentre eles, destacamos as diferentes linguagens, culturas, interesses entre os docentes e os alunos, além do fato dos docentes frequentemente não conseguirem estabelecer os vínculos necessários entre o currículo e as metodologias com a diversidade de necessidades e interesses dos alunos. E essa dificuldade docente está diretamente relacionada com a sua formação.

Há aproximadamente trinta anos, educadores têm desenvolvido pesquisa em educação química e essa pesquisa tem rendido bons frutos. Schnetzler (2002) realizou um “estado da arte” sobre esse tema, apontando que na década de 1980, formou-se um movimento destes educadores chamado “movimento das concepções alternativas”, cujos trabalhos acabaram encorpando essa área de pesquisa, ampliando-a para a área de didática das ciências.

O desenvolvimento dessa linha de pesquisa se justificou pela necessidade de formação científica da população, e também devido ao reconhecimento de que o conhecimento químico por si só não é suficiente para o sucesso escolar, ou seja, para a apropriação deste conhecimento pela população em geral e, especificamente, pelos alunos.

Segundo Schnetzler (2002), o enfoque behaviorista presente nos primeiros trabalhos publicados, na década de sessenta, foi sendo substituído por uma “linha piagetiana”, na década de oitenta e na década de noventa, a autora aponta:

(...) a realização de trabalhos que também incorporam a dimensão sócio-interacionista à análise do processo de ensino-aprendizagem. Nesse âmbito, interações discursivas e a negociação social de significados são consideradas fundamentais na construção de conhecimentos”.
(SCHNETZLER, 2002, pg. 16).

A área de Ensino de Ciências e Matemática (Área 46) na Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) surgiu em 2000 para investigar problemas didáticos específicos em Ciências e Matemática, inclusive Química. Esta iniciativa

teve como principal argumento favorável à sua criação o reconhecimento de que as ciências como a Química possuem especificidades que não se comunicam com outras áreas investigadas pela Educação.

Logo no início da criação da chamada área 46, foram aprovados dezesseis cursos de mestrado e dois cursos de doutorado, o que evidencia o crescimento em potencial da área e a grande demanda de formação específica. Essa tendência se configura como correta na medida em que no ano de 2010, segundo informações da avaliação trienal da CAPES, já temos cinquenta e quatro cursos de pós-graduação na área de ensino de ciências e matemática – um aumento de 240% em dez anos.

A partir de então, muito tem se produzido sobre o ensino de ciências e de química. Vários periódicos passaram a publicar textos e pesquisas na área. Eventos têm sido realizados para debater diferentes e alternativas formas de ensinar química.

Esse vasto e denso material de pesquisa na área de ensino de química, entretanto, ainda não surtiu o eco necessário nas salas de aula, o que pode ser consequência da formação dos nossos professores de química, que ainda é linear e centrada no empirismo, sem uma visão da função social das ciências.

A REVISÃO DA LITERATURA

Na revisão de literatura proposta, buscamos os principais periódicos especializados em ensino de química. No Brasil optamos pelos periódicos da Sociedade Brasileira de Química (SBQ): *Química Nova* (<http://quimicanova.sbq.org.br/index.php>) e *Journal of the Brazilian Chemical Society* (<http://jbcs.sbq.org.br/>). Em que pese o *Journal of the Brazilian Chemical Society* não ser considerado um periódico especializado na área de educação química, ou mesmo em ensino de ciências, achamos importante acrescentar os artigos publicados como contribuição. Na América Latina, escolhemos o periódico *Revista Electronica de Investigacion en Educacion en Ciencias* (<http://reiec.sites.exa.unicen.edu.ar/>).

Nos Estados Unidos, optamos pelo principal periódico de ensino de química da *American Chemical Society*: o *Journal of Chemical Education* (<http://jchemed.chem.wisc.edu/index.html>). Seguindo o mesmo critério, na Europa escolhemos os periódicos *Chemistry Education: Research and Practice* (<http://www.uoi.gr/cerp/>) e *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias* (<http://www.saum.uvigo.es/reec/>).

A pesquisa foi realizada nas páginas dos periódicos na internet, com a ferramenta “search”, buscando as entradas no título e no resumo do termo “*molecular modeling*”. No caso dos periódicos em espanhol, foi feita pesquisa direta nos títulos. Os artigos encontrados tiveram seus conteúdos analisados para verificação da utilização de algum *software* de modelagem molecular.

Em função da natureza dos trabalhos encontrados, dividimos os artigos em três categorias:

- a) experimento: esta categoria trata de trabalhos produzidos a partir de estudos teóricos (sínteses ou outros experimentos de natureza teórica) desenvolvidos em laboratório cujos resultados foram relatados em artigo.
- b) aplicação didática: nesta categoria encontram-se relatos de trabalhos ou projetos desenvolvidos com alunos de graduação em sala de aula ou em laboratório que utilizam softwares de modelagem molecular como centro do trabalho ou como ferramenta auxiliar.
- c) pesquisa em educação: esta categoria apresenta trabalhos teóricos ou aplicados de pesquisa na área educação, sem necessariamente ter um referencial teórico ou metodológico claro, mas com a clara intenção de se comunicar com a comunidade de Educação Química.

Ao todo, encontramos 126 (cento e vinte seis) artigos que abordam diretamente a modelagem molecular, distribuídos nas categorias de análise conforme gráfico 1, a seguir:

Distribuição dos Artigos nas Categorias de Análise

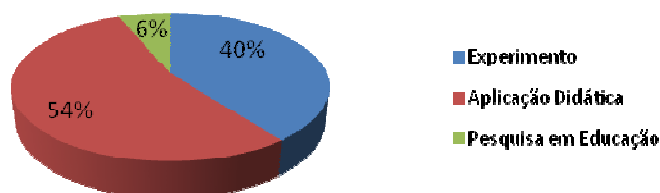


Gráfico 1: distribuição dos artigos publicados nos principais periódicos especializados em ensino de química da América Latina, Estados Unidos e Europa nas categorias Experimento, Aplicação Didática e Pesquisa em Educação.

A informação acima apresentada mostra que poucas publicações (6%) são de pesquisa em ensino em sua essência. A maioria das publicações (54%) é de aplicação didática, nas quais a proposta do artigo é relatar um trabalho ou um projeto realizado em sala de aula ou mesmo em laboratório, envolvendo alunos, mas que em uma das etapas existe o uso de algum *software* de modelagem molecular.

Uma quantidade considerável de trabalhos (40%) são de experimentos, nos quais há o relato de alguma atividade teórica – em que pode ou não haver procedimentos de laboratório – e que não envolve a participação direta de grupos de alunos, mas que pode ser utilizada por professores em suas transposições didáticas, motivo pelo qual encontram-se publicados em periódicos de ensino de química.

O gráfico 2 disposto a seguir, apresenta informações importantes e que devem ser analisadas com profundidade. A primeira informação que chama atenção é o fato de que, nos periódicos *Revista Electronica de Investigacion en Educacion en Ciencias (REIEC)* e *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias (REEC)* não encontramos nenhuma ocorrência de publicação envolvendo direta ou indiretamente o uso de *softwares* de modelagem molecular nos últimos 10 anos em nenhuma das categorias analisadas.

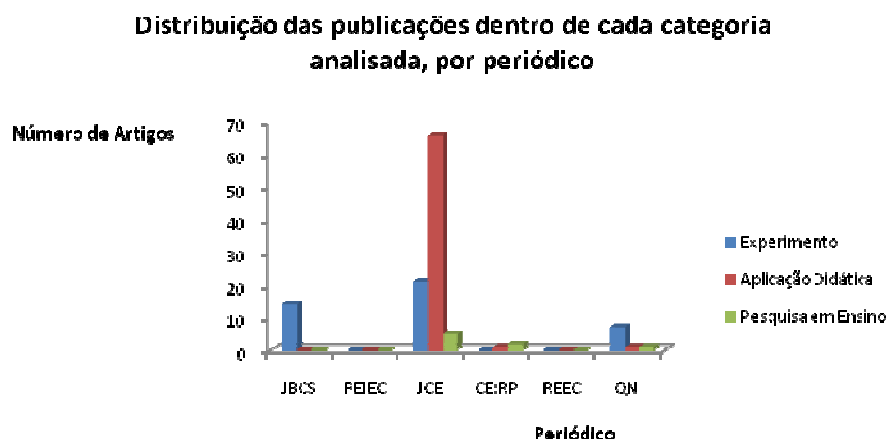


Gráfico 2: distribuição dos artigos publicados por periódico e em cada categoria de análise.

Frente ao publicado em periódicos como o *Journal of Chemical Education (JCE)*, esta evidência é um forte indício que são necessárias mais investigações, dentro da área de Ensino de Ciências e Matemática, sobre o resultado da aplicação de Modelagem Molecular em sala de aula ou mesmo em experimentos teóricos.

A segunda informação importante que podemos extrair do gráfico 2 é que, nos periódicos Química Nova (QN) e *Journal of Brazilian Chemical Society (JBCS)*, existe alguma produção científica na categoria experimento. Além disso, no JBCS não há produção nas categorias aplicação didática e pesquisa em educação – o que era de se esperar, pois não se trata de um periódico especializado em ensino de química.

No periódico QN, ainda verificamos a existência de 1 (um) artigo publicado no período de dez anos nas categorias aplicação didática e pesquisa em ensino, o que caracteriza uma produção extremamente baixa em categorias que são, por natureza, essencialmente vinculadas ao ensino de química.

Da mesma forma, encontramos no periódico *Chemistry Education: Research and Practice (CE:RP)* uma discreta publicação de trabalhos cujo tema direta ou indiretamente esteja relacionado com modelagem molecular. Foram apenas duas publicações na categoria pesquisa em educação e uma publicação em aplicação didática, o que evidencia que na Europa, assim como na América Latina, praticamente inexistem trabalhos nesta linha.

A principal fonte de publicações de artigos que envolvem o uso de *softwares* de modelagem é, sem dúvida, o periódico JCE. Este periódico apresenta quantidade expressiva de publicações nas categorias experimento e, mais fortemente, na categoria aplicação didática, o que demonstra que são vários os relatos de uso de *softwares* de modelagem molecular envolvendo alunos de graduação nos Estados Unidos e em outros países nos últimos dez anos.

Mais precisamente, encontramos nos últimos dez anos no JCE 21 (vinte e um) artigos publicados na categoria experimento, cujos conteúdos também podem ser utilizados por professores em transposições didáticas; 66 (sessenta e seis) artigos publicados na categoria aplicação didática e apenas 6 (seis) artigos publicados na categoria pesquisa em educação. Dentre estes seis, apenas dois trazem resultados de pesquisa para a área, como visto abaixo. Podemos afirmar que, no conjunto, é uma sólida produção, principalmente em comparação com os demais periódicos pesquisados.

O ESTADO DA ARTE DA PRODUÇÃO CIENTÍFICA DE MODELAGEM MOLECULAR

A figura 1, a seguir, apresenta a distribuição dos países nos quais estão situadas as Instituições cujos pesquisadores são autores dos artigos que compõem esta revisão de literatura. Podemos verificar que existem densidades diferenciadas e locais nos quais há uma robustez e uma solidez de produção, tais como nos Estados Unidos, Brasil, Canadá e Reino Unido, pela ordem numérica.

Cabe ressaltar que esta figura mostra um estudo mais voltado aos autores dos diversos artigos publicados nos periódicos. Na produção brasileira, decidimos expandir a nossa seleção para incluir os trabalhos de Química Quântica, que não possuem uma relação direta com a Educação Química, enquanto que os trabalhos publicados nos Estados Unidos possuem um perfil mais direcionado para aplicação em sala de aula (categoria de análise aplicação didática).

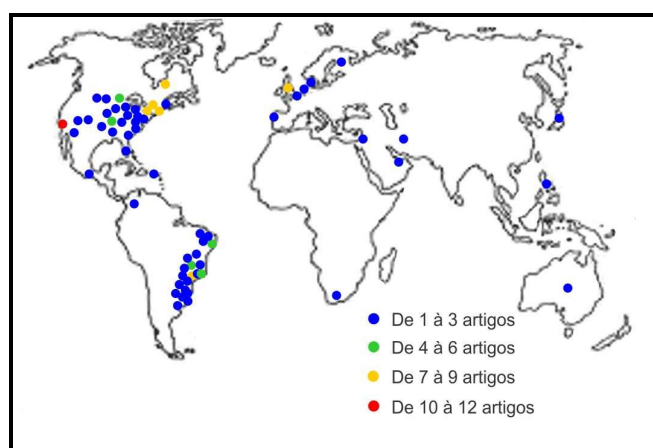


Figura 1: distribuição dos países de origem dos pesquisadores/autores dos artigos que fazem parte da revisão de literatura.

Para fins específicos da categoria pesquisa em educação, optamos por fazer uma análise mais aprofundada de todos os artigos. Destes, destacamos alguns artigos que poderiam, segundo nosso olhar, ser categorizados como pesquisa em educação química de fato, por envolver alguma discussão teórica ou prática fundamentada. De todo universo dos artigos encontrados, após uma seleção rigorosa, apenas cinco artigos podem ser enquadrados nesta categoria.

O primeiro artigo é o de Barnea & Dori (2000) que discute qual a percepção de “modelo” que professores de química em serviço possuem, quando comparados a grupos de estudantes de química e um grupo controle. Referenciais de epistemologia são utilizados para discutir a utilidade crucial que um modelo tem para a ciência, em especial Toulmin.

Os autores concluem que discutir a noção de “modelo” é importante porque expandiu a visão de todos os grupos participantes do estudo. O experimento em si tem uma execução longa, que envolve até mesmo uma etapa de formação de professores para utilizarem modelagem molecular.

A tomada de dados pode ser categorizada como quantitativa, porém com perguntas em aberto em um questionário cujas respostas depois são categorizadas de acordo com critérios pré-definidos pelos autores. O foco principal do artigo é a discussão da noção de “modelo” – quase em um sentido epistemológico – dos professores, e não necessariamente em outros aspectos da modelagem molecular.

Outro artigo a destacar é o de Sanger & Badger II (2001). O único que categorizamos como educação química de fato publicado no prestigioso periódico *Journal of Chemical Education* (JCE). Os autores discutem a inserção do uso de *softwares* de modelagem molecular com estudantes universitários, em especial de gráficos de densidade eletrônica para o ensino de polaridade molecular e miscibilidade.

O estudo pode ser categorizado como um estudo quantitativo, no qual duas populações foram criadas: uma controle e outra experimental. O estudo inclui testes e também a análise de uma descrição que os estudantes fazem de conceitos químicos pertinentes, que permite a categorização destes em possuindo desde uma concepção completa do conceito até nenhuma.

Os resultados indicam que estudantes que utilizam kit de modelos químicos e gráficos impressos de polaridade (controle) saíram-se pior que os estudantes que utilizaram ferramentas computacionais para desenhar a densidade eletrônica. Desta forma, conclui em favor do uso de ferramentas computacionais:

(...) os resultados de nosso trabalho sugerem que gráficos de densidade eletrônico melhoram a compreensão conceitual em estudantes de tópicos que envolvam cargas eletrônicas em moléculas individuais. Estes conceitos incluem a eletronegatividade de átomos, tipos de ligações (iônica, polar e não-polar), polaridade molecular, atração intermolecular, miscibilidade e propriedades ácido-base de compostos. (SANGER; BAGGER II, 2001, pg. 1415). Tradução nossa.

Em 2005, temos o trabalho de Jones, Jordan e Stillings (2005). Este trabalho é um resumo das contribuições realizadas durante uma força-tarefa financiada pela principal fundação governamental de apoio à ciência americana *National Science Foundation* (NSF) no sentido de investigar o papel da visualização molecular no aprendizado de conceitos químicos.

Vários projetos foram criados, e a conclusão do artigo é que este esforço, que também acreditamos ser o mesmo necessário para efetivamente utilizarmos modelagem molecular na Educação Química, deve ser realizado por profissionais de química, de educação (química), psicologia cognitiva, dentre outros; em colaboração estreita à boa comunicação.

Aksela e Lundell (2008) reportam o resultado da investigação da percepção de professores de química finlandeses sobre o uso de modelagem molecular na sua prática docente. Estes professores responderam questionários com perguntas fechadas e abertas sobre o tópico.

Dentre as razões pelas quais eles utilizam softwares de modelagem molecular, destacam-se o fato de que estes *softwares* “*ilustram conceitos difíceis para estudantes*”; “*desenvolvem a capacidade de visualização dos estudantes*” e outras respostas associadas a motivar os estudantes a aprender química. Por outro lado, as razões que os professores apontam para não utilizarem modelagem molecular em sua prática didática, destacam-se “*conteúdo programático muito extenso, incapaz de incorporar estas atividades*”; “*muitos alunos por sala de aula*” e “*dificuldades pessoais no uso de Tecnologias de Informação*”.

A investigação dos autores também levantou a prática mais comum do uso de modelagem molecular: “*estrutura espacial de moléculas e isomeria*”; “*orbitais atômicos e moleculares*”; “*ligações químicas*”; e “*densidade eletrônica e ligações química fracas (ligação de hidrogênio, forças de Van der Waals)*”. Talvez a conclusão mais importante do estudo é que, mesmo que recursos computacionais estejam implementados, os professores se recusam a utilizar a modelagem molecular sem algum tipo de treinamento que os permitam sentir-se à vontade com estas ferramentas.

Por último, destacamos o artigo de Clauss e Nelsen (2009) que discutem uma unidade didática que integra o uso de modelagem molecular no laboratório de química orgânica implementado na Universidade de Wisconsin–Madison durante alguns semestres.

O artigo foca no *feedback* dos estudantes e de suas dificuldades no uso de modelagem molecular. A conclusão, que ao nosso ver é mais pertinente, é a argumentação dos autores no sentido de aumentar a exposição dos estudantes, durante sua graduação em química, à teoria do Orbital Molecular, dentro de diversos cursos como Química Geral e Orgânica, e que isto iria auxiliar na familiarização dos estudantes com os *softwares* de modelagem molecular que sabidamente fazem uso extensivo desta teoria.

Também chama atenção a dispersão, demonstrada na presença de pesquisadores em países como Irã, Emirados Árabes Unidos, África do Sul, Austrália, Japão, dentre outros

CONCLUSÕES

Ao longo deste trabalho, encontramos contradições. Ao mesmo tempo em que existem diversos relatos de experiências de aplicações didáticas em que *softwares* de modelagem molecular como ferramenta principal ou de auxílio às atividades de sala de aula ou de laboratório por alunos de graduação, também encontramos relatos de restrições ao seu uso.

E estas restrições não são diferentes das que encontramos aqui, com nossos docentes. São dificuldades que vão desde o excesso de conteúdo a vencer durante um semestre até dificuldades pessoais no domínio da ferramenta, o que já não é novidade para quem pesquisa na área de tecnologia da informação e comunicação. No entanto, em grande parte dos trabalhos que relatam o uso dos *softwares*, os resultados alcançados pelos alunos são acima daqueles que se esperariam sem a mediação da ferramenta computacional.

Não encontramos, dentre os parâmetros escolhidos em nossa revisão de literatura, publicações que indiquem investigações no sentido da utilização destas ferramentas de forma integrada nos currículos dos cursos de química.

Acreditamos que a conclusão geral é que, apesar de esforços de pesquisadores, inclusive com incentivos governamentais (como o projeto da NSF acima descrito), existe muito pouco publicado em pesquisa em educação química sobre modelagem molecular no ensino de química.

Isto se contrapõe a outras áreas como a educação matemática, onde é possível se encontrar uma discussão profícua, contando até com encontros e congressos específicos à modelagem matemática.

Sendo assim, concluímos que a área de educação química poderia se beneficiar de investigações teoricamente e metodologicamente fundamentadas sobre aplicações didáticas de modelagem molecular no sentido da larga utilização desta poderosa ferramenta nos currículos de cursos de química, em especial os de formação de professores, bem como em cursos de formação continuada.

REFERÊNCIAS

AKSELA, Maija; LUNDELL, Jan. **Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views.** *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 2008, Vol. 9, pp. 301-308.

BARNEA, Nitza; DORI Yehudit J. **Computerized Molecular Modeling - The New Technology for Enhancing Model Perception Among Chemistry Educators and Learners.** *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 2000, Vol. 1, No. 1, pp. 109-120.

BARREIRO, Eliezer J. et al. **A química medicinal de N-acilidrazonas: novos compostos-protótipos de fármacos analgésicos, antiinflamatórios e anti-trombóticos.** *Quím. Nova*, São Paulo, v. 25, n. 1, 2002.

- CHASSOT, Attico I. **Catalisando Transformações na Educação**. Ijuí: Ed. Unijuí, 1993
- CLAUSS, Allen D.; NELSEN, Stephen F. **Integrating Computational Molecular Modeling into the Undergraduate Organic Chemistry Curriculum**. *Journal of chemical Education*, Vol. 86 No. 8, 2009.
- FREITAS, Luiz C. **Prêmio Nobel de Química 1998**. Química Nova na Escola, nº 8, novembro, 1998.
- HESSLEY, Rita K. **A Computational-Modeling Course for Undergraduate Students in Chemical Technology**. *Journal of Chemical Education*, vol. 81 No. 8, 2004.
- JONES, Loretta L.; JORDAN, Kenneth D.; STILLINGS, Neil A. **Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration**. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 2005, Vol. 6, No. 3, pp. 136-149.
- LENZI, Marcelo K.; LIMA, Enrique L.; PINTO, José C. **Modelagem da polimerização simultânea de estireno em suspensão e emulsão**. *Polímeros*, São Carlos, v. 14, n. 2, 2004.
- PAC. **Glossary of Terms Used in Computational Drug Design**. *Pure Appl. Chem.*, Vol. 69, nº. 5, pp. 1137-1152, 1997.
- PEÇANHA, Emerson P.; ANTUNES, Octavio A.C.; TANURI, Amilcar. **Estratégias farmacológicas para a terapia anti-AIDS**. *Quím. Nova*, São Paulo, v. 25, n. 6b, 2002.
- RIBEIRO, Ângela A.; GRECA, Ileana M. **Simulações Computacionais e Ferramentas de Modelização em Educação Química: uma revisão de literatura publicada**. *Quim. Nova*, Vol. 26, No. 4, 542-549, 2003.
- RODRIGUES, Carlos R. **Processos Modernos no Desenvolvimento de Fármacos: Modelagem Molecular**. *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola*, nº 3, maio, 2001.
- SANGER, Michael J.; BADGER II, Steven M. **Using Computer-Based Visualization Strategies to Improve Students' Understanding of Molecular Polarity and Miscibility**. *Journal of chemical Education*, Vol. 78, No. 10, 2001.
- SANTOS, Hélio F. **O Conceito da Modelagem Molecular**. *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola*, nº 4, maio, 2001.
- SCOTTI, Luciana. et al . **Modelagem molecular aplicada ao desenvolvimento de moléculas com atividade antioxidante visando ao uso cosmético**. *Rev. Bras. Cienc. Farm.*, São Paulo, v. 43, n. 2, 2007.
- SCHNETZLER, Roseli. **A Pesquisa em Ensino de Química no Brasil: Conquistas e Perspectivas**. *Revista Química Nova*. Vol. 25. Suplemento 1. Pág. 14 – 24, 2002.