

**USO DO SOFTWARE *DICEWIN* NA QUÍMICA GERAL
(The use of the *DICEWIN* software in general chemistry)**

Flávia Maria Teixeira dos Santos

PPGECIM - ULBRA

Av. Miguel Tostes, 101 – Prédio 14, Sala 230

92.240-280 - Canoas - RS

flaviamts@ulbra.br

Ileana Maria Greca

IF-UFRGS

Caixa Postal 15051-Campus do vale

91501-970 – Porto Alegre, RS

ileana@if.ufrgs.br

Agostinho Serrano

PPGECIM - ULBRA

Av. Miguel Tostes, 101 – Prédio 14, Sala 230

92.240-280 - Canoas - RS

serrano@ulbra.tche.br

Resumo

Neste trabalho relatamos uma experiência de utilização de um software de simulação na disciplina de Química Geral do curso de Química da Universidade Luterana do Brasil - ULBRA. Este software de simulação, o programa *DICEWIN*, usado em pesquisa científica básica, que está sendo adaptado para o uso em sala de aula por nossa equipe. Ao utilizarmos o *DICEWIN* na Química Geral temos o objetivo de possibilitar aos estudantes a modelização e a visualização do comportamento microscópico de soluções, para a construção dos conceitos envolvidos no conteúdo de Forças Intermoleculares. Nas atividades utilizamos simulações da estrutura de água líquida e de água como solvente para Na^+ , Cl^- e Ar. Os resultados preliminares, indicam que os alunos têm um ganho considerável com a utilização deste tipo de ferramenta que lhes permite não apenas visualizar e representar o comportamento cinético-molecular dos sistemas discutidos, como também se tornam capazes de aprender a utilizar diferentes representações com certa competência

Palavras-chave: Simulações Computacionais, Química Geral, Forças Intermoleculares, representações químicas.

Abstract

In this paper, we describe the use of a simulation program in a subject of General Chemistry from a Chemistry course from the Universidade Luterana do Brasil – ULBRA. The software *DICEWIN* is employed in basic research in chemistry and it is being adapted for its use in classroom. Our objective for its use in the General Chemistry is to facilitate the students' modeling processes and the visualization of the microscopic behavior of solutions, in order to construct the concepts involved in intermolecular forces. By performing a pair distribution function analysis of the solvation of Na^+ , Cl^- and Ar in water, it is shown that it is feasible to explain the differences in solvation for these differently charged solutes. Preliminary results seem to show that the students involved in the experience have a considerable gain with the use of this teaching strategy, specially in the representation of the kinetic-molecular behavior of the discussed systems and in the use of multiple representations for it.

Keywords: Simulation programs, General Chemistry, Intermolecular Forces, chemistry representations.

Introdução

A disciplina de Química Geral tem grande importância para o curso de Química (Bacharelado e Licenciatura) porque fornece os conceitos que devem fundamentar o conhecimento apresentado posteriormente no curso. Ela permite estabelecer uma certa homogeneidade entre os estudantes e possibilita a superação de defasagens iniciais. Entretanto essa disciplina pode ser desestimulante, irrelevante e desinteressante, principalmente para os alunos oriundos de cursos técnicos em Química ou de cursos de Ensino Médio com boa formação científica.

Gillespie (1991) argumenta que um dos principais problemas da Química Geral é que as ementas são extensas, com ênfase muito pronunciada na parte da físico-química e na resolução de problemas numéricos e teoria muito abstrata e difícil. Para a superação desses problemas, segundo Santos Filho (2000a), o mais importante nesta disciplina é desenvolver o pensamento químico do estudante, ou seja, o estudante deve entender o mundo material em termos de átomos e moléculas e seus arranjos e movimento, permitindo assim que o aluno seja capaz de relacionar esse mundo microscópico aos fenômenos observáveis.

Santos Filho (2000b) argumenta também que é a valorização dos princípios teóricos que permite ao aluno um amadurecimento de seu raciocínio e fornece os caminhos para a racionalização das informações de uma maneira coerente e lógica. A redução do tempo destinado à Química descritiva poderia assim favorecer o desenvolvimento de uma maneira de pensar analítica e objetiva que dá lugar ao raciocínio químico, inibindo a abordagem da memorização.

A preocupação com os problemas da química geral está refletida no interesse de pesquisadores e professores de química em todo o mundo; por exemplo, o *Journal of Chemical Education* (<http://jchemed.chem.wisc.edu>), criou um fórum de discussão intitulado “*General Chemistry Curriculum Reform*” com o objetivo de examinar o conteúdo do curso de Química Geral. As discussões, que refletem diferentes pontos de vista, procuram um detalhamento do currículo de maneira que os tópicos são desenvolvidos para que os estudantes compreendam os fenômenos considerados necessários para o curso. As temáticas propostas envolvem a estrutura atômica, ligação química, ácidos e bases, equilíbrio, termodinâmica, leis dos gases, laboratório introdutório de química, além de uma sessão denominada *miscellaneous*, constituída de tópicos como nomenclatura, unidades e cálculos, oxidação e redução, eletroquímica e bioquímica.

Essa preocupação é bastante atual e fomenta a discussão sobre a variedade de mudanças metodológicas que devem ser implementadas na Química Geral (Zeile & Jones, 2001). As mudanças propostas envolvem sugestões para minimizar os problemas podem adotar um enfoque Ciência Tecnologia e Sociedade - CTS, Química do Cotidiano, Química para a Atuação Profissional, Resolução de Problemas e várias outras formulações. A proposta que aqui apresentamos envolve a introdução de novas tecnologias no currículo da Química geral. Em particular, utilizamos um software de simulação, o programa *DICEWIN*, usado em pesquisa científica básica, que está sendo adaptado para o uso em sala de aula (Serrano et al., 2002, *submetido*).

Na produção científica, as simulações computacionais permitem explorar as potencialidades de um modelo que é utilizado para explicar um determinado fenômeno. As simulações servem para entender as propriedades físicas quando não é possível resolver analiticamente um problema por sua complexidade, proporcionam um controle muito grande sobre o sistema, o que não se consegue em situações experimentais e, além disso, permitem explorar situações imaginárias. Esses são os mesmos elementos destacados por Nersessian (1995) para processos de modelagem mental, por isto as simulações criadas a partir de modelos científicos podem ser muito úteis no processo da aprendizagem desses modelos científicos.

Ao utilizarmos o *DICEWIN* na Química Geral temos como objetivo possibilitar aos estudantes a visualização do comportamento microscópico de soluções, para a construção dos

conceitos envolvidos no conteúdo de Forças Intermoleculares. Este simulador permite a visualização dinâmica do comportamento de partículas em diferentes sistemas e sob diferentes condições, ou seja, possibilita a visualização de um modelo do comportamento microscópico de sistemas impossível de serem visualizados a olho nu. Assim, as atividades propostas estão centradas nos exercícios de simulação da estrutura de água líquida e de água como solvente para átomos de argônio (Ar), íons de sódio (Na^+) e cloretos (Cl^-).

Este trabalho foi realizado, até o momento, com três turmas (denominadas A, B e C) de Química Geral, da ULBRA, com um total de 90 alunos. A partir dos dados coletados com um questionário inicial foi possível constatar a grande heterogeneidade na formação do ensino médio dos alunos matriculados e uma homogeneidade quanto ao uso do computador: a maioria dos estudantes não apresenta dificuldades no manuseio da máquina, estando relativamente habituados a usá-la.

Os resultados preliminares, coincidentemente com outros resultados relatados na literatura (Lijnse, Licht, Vos & Waarlo, 1990; Ben-Zvi, Silberstein & Mamlok, 1990; Tsaparlis & Georgiadou, 1993) indicam que os alunos têm um ganho considerável com a utilização deste tipo de ferramenta que permite a eles não apenas visualizar e modelar o comportamento cinético-molecular dos sistemas discutidos, como também se tornam capazes de aprender a utilizar diferentes representações com certa competência.

Caracterização das turmas

O levantamento de dados para a caracterização dos estudantes envolvidos nas atividades da disciplina de Química Geral foi realizado por meio de questionário realizado nos primeiros dias de aula. O objetivo desse questionário era estabelecer o perfil das turmas, de maneira a permitir uma melhor organização da disciplina. Além disso, o questionário fornece os indicativos necessários para observar a viabilidade da implementação e utilização do software de simulação.

Das várias informações coletadas por meio desse questionário, é relevante para nossa pesquisa a diversidade da formação no Ensino Médio desses estudantes. Os dados organizados no Gráfico 1, revelam que há uma grande heterogeneidade dos alunos matriculados, o que obviamente se reflete no andamento das aulas e nas dificuldades e interesse dos alunos. Enquanto os Técnicos em Química tiveram um ensino médio com ampla formação técnica e conceitual em química, os estudantes que fizeram o Curso Científico tiveram pelo menos três anos de química, os demais, muito provavelmente, vivenciaram a química apenas no primeiro ano do Ensino Médio.

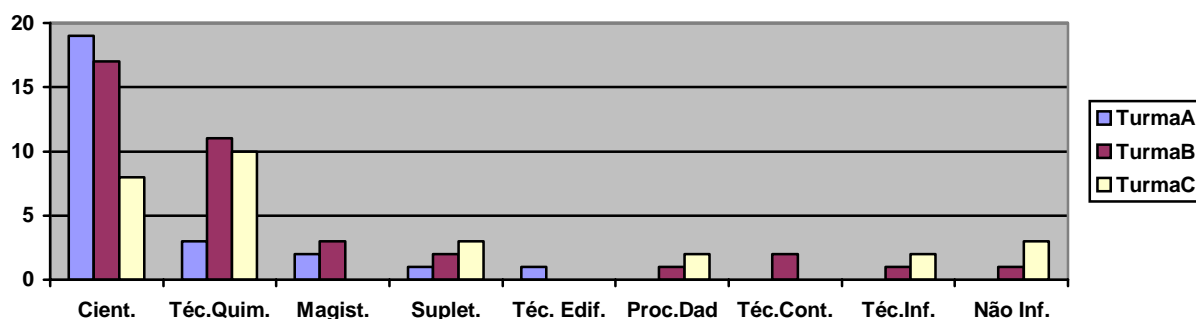


Gráfico 1- Formação no Ensino Médio dos estudantes

Outro elemento importante revelado pelo questionário inicial relaciona-se à atuação profissional desses estudantes, do curso noturno. A grande maioria dos estudantes atuam profissionalmente (Turma A - 85%, Turma B - 71% e Turma C - 69%). Entretanto, suas atividades

profissionais não estão relacionadas à química. Na Turma A apenas 13% dos estudantes trabalhadores atuam na área da química (empresas ou ensino), na Turma C são 52% e este índice é maior na Turma B, chegando a 59%.

Além desses elementos, os estudantes apresentam diferentes interesses quanto à disciplina, isto dificulta a organização e direcionamento das atividades. A disciplina reúne estudantes de diversos cursos (ver Gráfico 2), com diferentes expectativas e interesse que deveriam ser definidores dos parâmetros da atividades da disciplina. Essas diferentes visões deveriam ajudar a direcionar o desenvolvimento de materiais e estratégias de ensino que pudessem ajudar o estudante a significar de maneira consistente o curso de química, para as diferentes áreas (Holme, 2001).

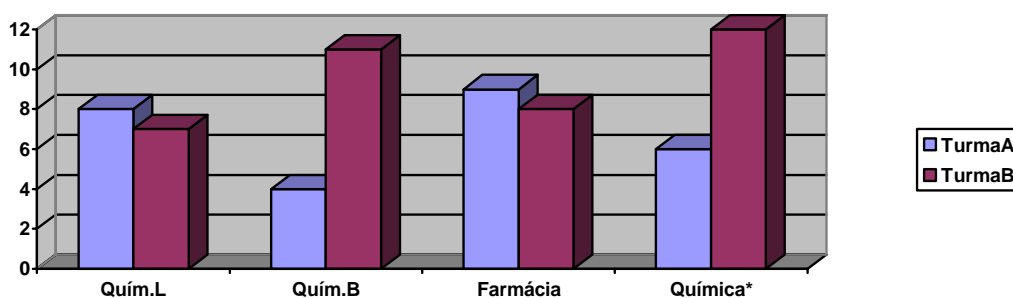


Gráfico 2- Cursos em que os estudantes estão matriculados

Quanto ao uso do computador, que está diretamente ligado ao trabalho com o *software*, observamos que em média, 89% dos estudantes usam computador e 45% deles fazem isso diariamente. O uso da Internet é apontado por aproximadamente 70% dos estudantes. Isso facilita o trabalho já que os estudantes não necessitam de muito tempo para familiarizarem-se com a ferramenta da simulação, dado que estão bastante habituados às ferramentas eletrônicas.

Descrição do DICEWIN

A utilização de ferramentas de simulação e modelagem molecular no Ensino de Química não é uma novidade e tem se revelado uma importante ferramenta para promover aprendizagem (Wu, Krajcik & Soloway, 2001). Uma revisão sobre os programas de simulação e de modelização na educação química, realizada recentemente, revela a existência de um número expressivo de *software* de simulações operacionais e conceituais, além de descrições de implementações efetivas dessas ferramentas em sala de aula, vinculadas ou não a trabalhos de pesquisas (Ribeiro e Greca, *in press*).

Em nosso estudo utilizamos um software de simulação Monte Carlo, desenvolvido dentro do grupo de pesquisa de Física Atômica e Molecular do Instituto de Física da Universidade de São Paulo. Este software reproduz com grande fidelidade a estrutura microscópica de sólidos, líquidos e gases, com uma substância ou uma mistura delas. O DICE (Coutinho e Canuto, 1994) foi adaptado para ser utilizado em sala de aula por nossa equipe (Serrano et al., 2002, *submetido*).

A criação de uma ferramenta computacional para produzir simulações não é uma tarefa simples, nem econômica; por isso optamos pela adaptação de um de software utilizado em pesquisa científica. A utilização software científico, adaptado segundo princípios de *design* de software educativos, como a simplificação da interface utilizada pelo estudante, é uma possibilidade ainda pouco explorada. Vislumbramos diversos benefícios na adaptação deste software de simulação, como o custo substancialmente menor da utilização de experimentos virtuais do que a montagem de um laboratório real para um determinado experimento. Este software é gratuito, reproduz fielmente as mais atuais teorias sobre o campo científico e, além disso, possui um conteúdo extremamente sofisticado e que, com adaptações e exemplos simples, pode ser utilizado com sucesso nas salas de aula de química.

Na tela inicial do programa, existem diversos comandos como ler/escrever arquivos e de configuração das rotinas. O usuário pode controlar diversos parâmetros como o número de espécies (moléculas, átomos ou íons) existentes na simulação, a temperatura, a pressão e a densidade do sistema (Figura 1)

Durante a simulação é possível observar o que acontece com o sistema quando é aquecido ou resfriado (variando a temperatura), quando sofre um aumento ou diminuição da densidade, e também quando se aumenta ou diminui a pressão ambiente. De fato, o programa se comporta como um laboratório virtual onde o estudante pode alterar os parâmetros e observar a resposta do sistema. Também é possível se observar um “filme”, ou animação do comportamento das moléculas durante a simulação. Para isto foi desenvolvido um software chamado *Vismol* (Coutinho e Inoue, 1999) (Figura 2).

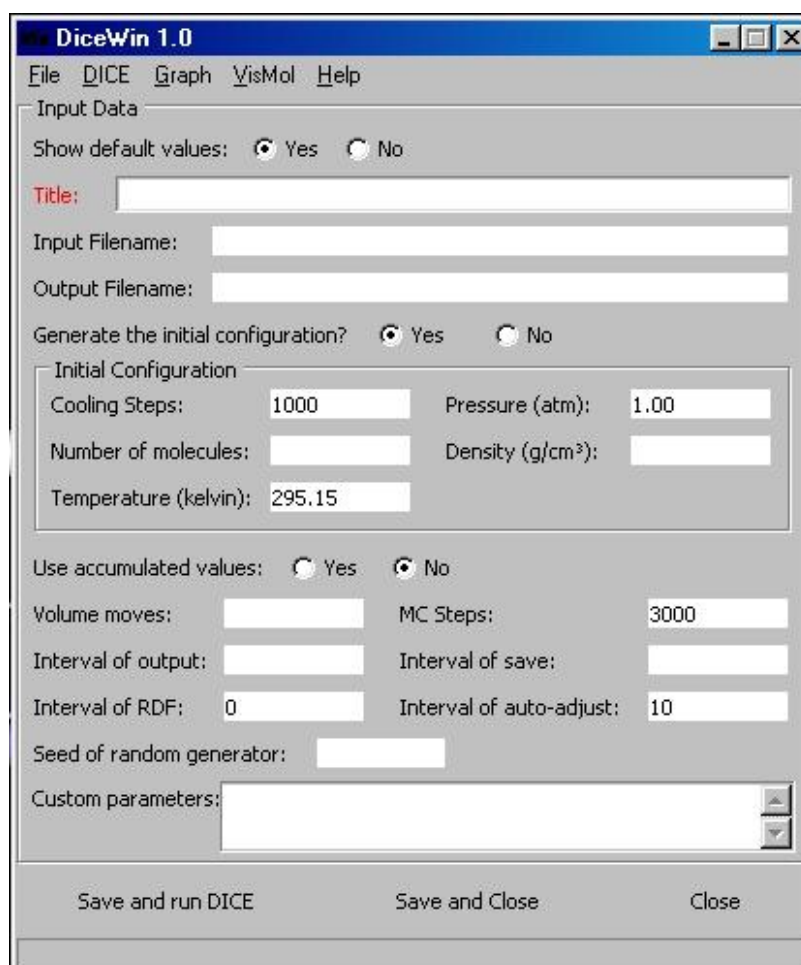


Figura 1- Janela inicial do programa DICEWIN.

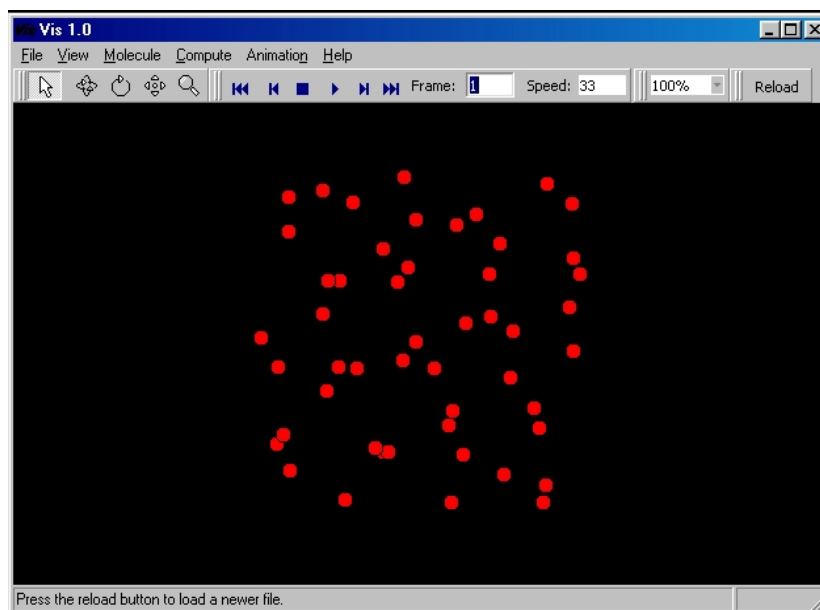


Figura 2 – Janela com a visualização da simulação

O usuário pode utilizar uma versão básica e outra avançada, e pode pedir ao programa para mostrar a simulação numérica, onde pode observar o valor da energia do sistema físico-químico variando, tal qual um sistema real iria variar. O estudante também pode observar os valores numéricos correspondentes ao gráfico.

Atividades desenvolvidas

As atividades desenvolvidas pelos estudantes com o *software* foram realizadas após as aulas teóricas, ministradas de maneira tradicional. Nessas aulas foram desenvolvidos os temas relativos ao conteúdo de Forças Intermoleculares (forças íon-dipolo, forças dipolo-dipolo, forças de London e Ligações de Hidrogênio) tendo como livro-texto de referência o Atkins e Jones (2001).

Os pré-testes realizados pelos estudantes após as aulas teóricas, revelam que estes não construíram, a partir da argumentação da professora, uma representação ou modelo do comportamento cinético-molecular das espécies envolvidas em soluções, onde estão presentes as diferentes forças de interação. Este fato foi evidenciado pela dificuldade dos alunos em representar o comportamento das espécies presentes em uma lâmpada de argônio, na água a 25°C e em um cristal de cloreto de sódio dissolvido em água. Nesta tarefa, a grande maioria dos estudantes utiliza representações macroscópicas (Figuras 3, 4 e 5) e quando utiliza representações microscópicas, as forças de interação não são consideradas na representação (Figura 6). Estes resultados parecem mostrar que os estudantes não conseguem, a partir da análise de eventos reais, utilizar os conceitos apresentados em classe para resolver as questões propostas.

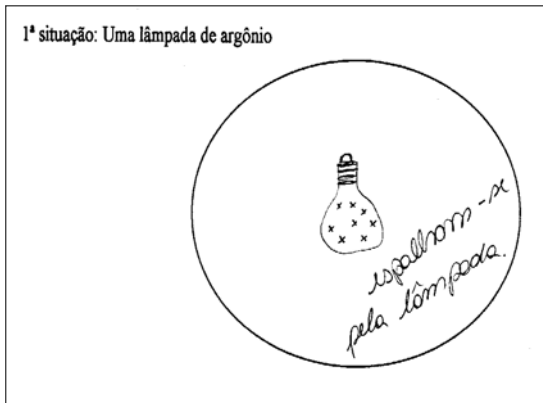


Figura 3 – Representação para a 1ª Situação

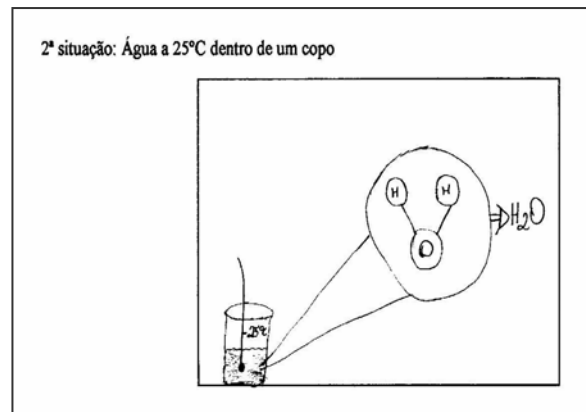


Figura 4 – Representação para a 2ª

Antes da utilização do software, os estudantes são familiarizados com o programa por meio da execução de alguns exemplares propostos no “Manual do Usuário”. As atividades contidas neste manual visam a manipulação da ferramenta, nele são encontradas as janelas e ações que devem ser executadas, assim como aquelas utilizadas para a visualização das simulações.

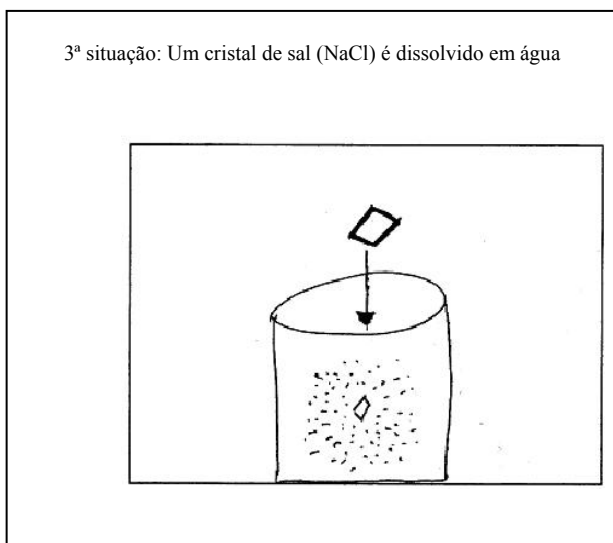


Figura 5- Representação 3ª Situação

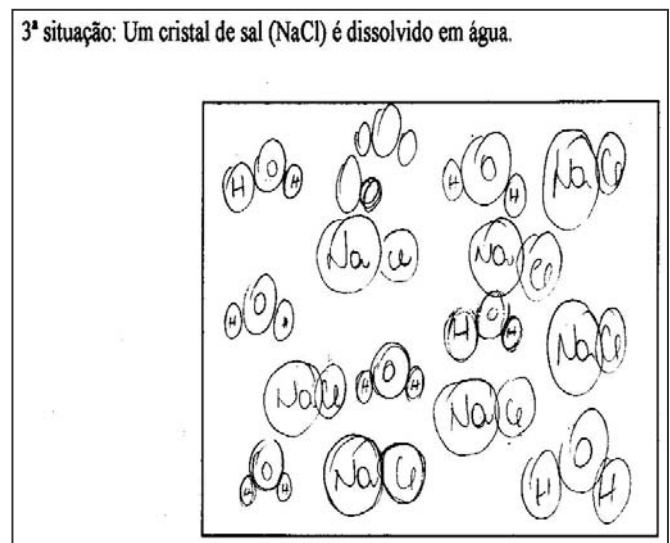


Figura 6 – Representação microscópica para a 3ª Situação

Após um rápido treino e tendo se familiarizado com a ferramenta, os estudantes realizam as simulações contidas em um “Guia para Utilização do Simulador DICEWIN”. As atividades propostas estão organizadas segundo o modelo “Predizer - Observar - Explicar (POE)” (White & Gunstone, 1992; Tao & Gunstone, 1999). As tarefas envolvem prever o comportamento de um sistema com determinados parâmetros e as conseqüências de mudanças na temperatura. A seguir os estudantes devem executar a simulação com os parâmetros propostos e após a realização da simulação devem comparar os resultados obtidos com aqueles esperados, procurando mostrar congruências e discrepâncias entre ambos. Ao final devem comentar sobre as diferenças e semelhanças entre as simulações efetuadas, assim como descrever quais as forças intermoleculares

que intervém no comportamento observado e se foi possível visualizar na simulação a ação das forças intermoleculares, teoricamente intervenientes. Além disso, os estudantes devem aplicar os conhecimentos a novas situações propostas.

O primeiro sistema proposto é o do Argônio, constituído por cinquenta átomos de argônio, que o estudante executando as simulações Ar1, Ar2, Ar3 deverá submeter a diferentes temperaturas 298,25K, 0,0K, 398,25K, respectivamente; e uma quarta simulação, Ar4, cuja temperatura deve ser definida pelo próprio aluno, normalmente acima de 500K.

O segundo sistema executado pelos estudantes é o sistema água (Aqua01, Aqua02...), também executado a diferentes temperaturas e segundo as mesmas instruções do sistema Argônio. Estes procedimentos são utilizados também para a execução das simulações do comportamento do íon sódio em presença de moléculas de água (é sugerido ao estudante simular um íon em meio a 20 moléculas de água) e do íon de cloreto em meio às moléculas de água.

As atividades foram desenvolvidas em quatro horas-aula nas Turmas A e B e em seis horas-aula na Turma C. Os estudantes trabalham colaborativamente em grupos pequenos, duplas ou trios. O objetivo do trabalho em pequenos grupos é permitir que os estudantes possam se engajar em um diálogo produtivo com seus pares. Um importante elemento da construção de conhecimento em pequenos grupos parece ser a elaboração de perguntas que servem para explicitar e articular o que o grupo não sabe; clarificar e articular as questões; discutir, interpretar e construir idéias (Hogan, Nastasi & Pressley, 2000).

Ao final da atividade o estudante deve executar um pós-teste. A execução desse pós-teste visa verificar a apreensão conceitual e representacional que o estudante obteve com o uso da ferramenta. As atividades contidas neste pós-teste têm a mesma abordagem utilizada no pré-teste, ou seja, a representação por modelos do comportamento cinético-molecular de espécies envolvidas em situações/sistemas. Algumas alterações são propostas, como a utilização de diferentes representações para as situações apresentadas no pré-teste (bolas e sticks). Além disso são propostas situações cotidianas, não trabalhadas nas atividades anteriores, as quais os estudantes devem representar aplicando os conceitos e representações utilizados nas simulações. Um exemplo de questão proposta: *“Sabemos que a solubilidade de dois líquidos é também um fenômeno relacionado à natureza das interações entre as diferentes espécies presentes (íons ou moléculas). Represente o comportamento cinético-molecular das espécies presentes em uma solução de água e álcool etílico (C₂H₆O). Represente essa situação com palavras e/ou desenho e/ou gráfico. Escolha a representação que considere mais apropriada e que melhor expressa sua idéia em relação ao fenômeno”*.

Análise dos Resultados

A análise dos pós-testes da primeira turma (N = 31) mostra que 68% (N=21) dos estudantes passam a utilizar diversos modelos de representação e aplica corretamente os conceitos relacionados às interações entre moléculas polares e os dipolos elétricos dessas moléculas com os íons em solução quando modelam as situações, semelhantes às trabalhadas com o software. 81% dos estudantes utiliza nestes modelos uma representação mista com elementos macro e microscópicos dos sistemas. Entretanto, alguns estudantes obtiveram muito pouco ou nenhum avanço conceitual ou representacional com o uso da ferramenta. Os resultados preliminares das outras turmas parecem seguir a mesma tendência.

Antes das atividades de simulação os alunos que representam os sistemas microscopicamente utilizam majoritariamente bolinhas, não necessariamente de maneira apropriada. Uma bolinha pode representar uma molécula ou um íon, assim como espécies monoatômicas são representadas por aglomerados bolinhas (Figura 5). Ocorrem ainda outras

representações: por pontos (Figura 3), bolas distorcidas, fórmulas estruturais, símbolos dos elementos, *ball and sticks* (Figura 4) (Serrano, et al., 2002).

Após o uso da ferramenta de simulação os alunos utilizam uma maior diversidade de representações e fazem isso de maneira mais apropriada. Ocorrem esferas e pontos maciços, *sticks*, *ball and sticks*, fórmulas estruturais, símbolos dos elementos e bolinhas; quase sempre utilizando apropriadamente a representação para moléculas, espécies monoatômicas e íons. Para a química são muito importantes os diferentes níveis de representação - macroscópico microscópico e simbólico (Johnstone, 1993) e é um requisito fundamental da compreensão química a habilidade de transladar de um nível de representação ao outro. Wu, Krajcik & Soloway (2001), discutem que a compreensão microscópica e a representação simbólica são especialmente difíceis para os estudantes porque suas representações são invisíveis e abstratas (Ben-Zvi, Silberstein & Mamlok, 1990), entretanto, os resultados aqui obtidos mediante o uso da ferramenta de simulação possibilitou a estes estudantes um repertório maior e mais apropriado de representações (Figuras 6, 7 e 8)

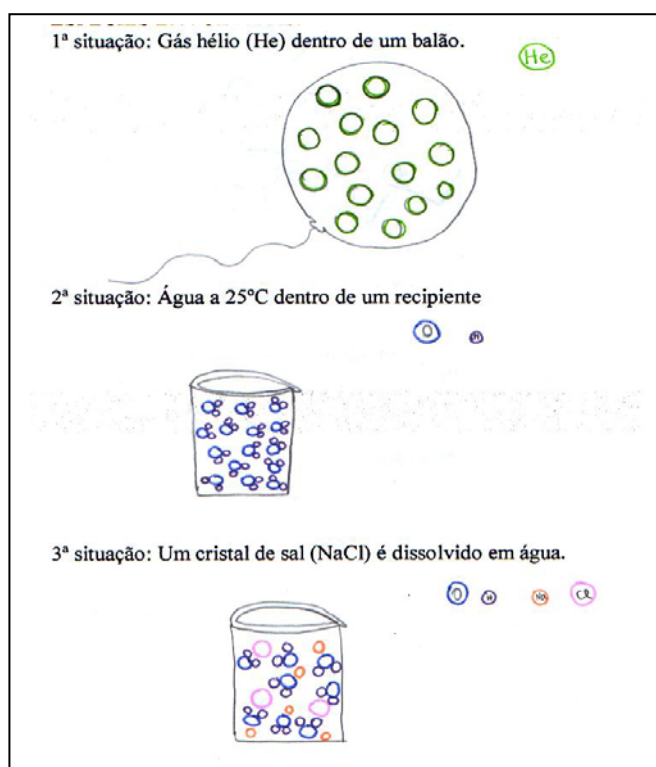


Figura 6 – Representação apropriadas para as situações propostas

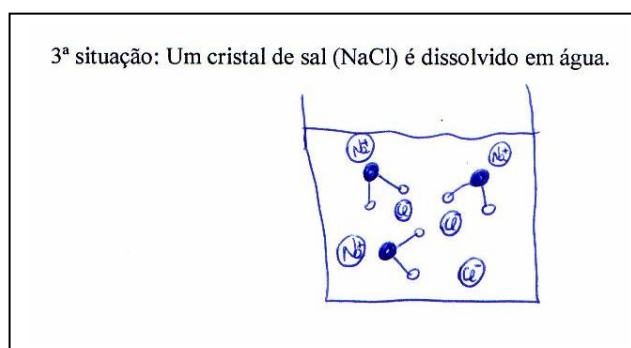


Figura 7 – Representação de *ball and sticks*.

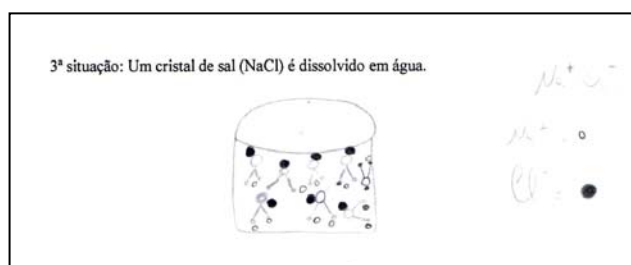


Figura 8 – Representação Mista

É interessante observar nas figuras que nas representações mistas os estudantes insistem em utilizar a representação dos recipientes que contém as soluções. Isso corrobora resultados de pesquisa que revelam que os estudantes pensam as situações propostas sobre a informação sensorial (Wu, Krajcik & Soloway, 2001).

Em relação aos conceitos associados às representações utilizadas no pré-teste aparece, em alguns casos, a idéia de movimento. O movimento é normalmente associado ao estado gasoso e poucos estudantes vinculam o movimento das partículas com a temperatura do sistema. Poucos estudantes demonstram dominar a idéia de íons, porém, em nenhum desses casos aparece a idéia de

interação. Naqueles alunos em que aparece a idéia de íons não está corretamente representada a interação entre esses íons, os íons são tratados como espécies isoladas, mesmo quando constituem um aglomerado. Em particular no caso do argônio, vários estudantes consideram o argônio um gás diatômico isso revela uma dificuldade conceitual em relação a existência de gases monoatômicos. No pós-teste os alunos, majoritariamente, exceto aqueles que não apresentaram avanço, passam a utilizar satisfatoriamente os conceitos envolvidos nas interações entre as moléculas da água, orientação do dipolo elétrico e formação das Ligações de Hidrogênio; assim como as interações entre íons e os dipolos elétricos das moléculas da água, orientação espacial e hidratação dos íons em solução.

A análise dos dados do pré e pós-teste permite também estabelecer relações entre as representações utilizadas e a compreensão conceitual dos estudantes. Os estudantes que tem domínio dos conceitos podem apresentar dificuldade em representar uma situação, e muitos utilizam os conceitos apropriadamente apenas quando a representação é fornecida na atividade. Há aqueles que apresentam alguma idéia embrionária dos conceitos envolvidos, mas apresentam dificuldade na compreensão da representação e utilizam a idéia de simetria espacial ou organização na escolha de uma representação. Na grande parte das representações do pré-teste faltam os conceitos necessários. Outros estudantes não utilizam os conceitos mas lançam mão de definições, nem sempre apropriadas à situação. Em outros casos, parece existir ausência de conceitos que dêem suporte à escolha de diferentes representações e, nesses casos, muitos utilizam a idéia de simetria visual ou organização espacial. É interessante observar que as categorias iniciais evoluem, de forma que no pós-teste encontramos mais estudantes com um uso apropriado de conceitos e sua representação. As características dessas categorias serão melhor discutidas em outro artigo (Santos e Greca, em preparação).

Conclusões

Este estudo revelou a potencialidade da ferramenta computacional para a formação do pensamento químico no que se refere às relações entre fenômenos e as representações do comportamento cinético-molecular. Propiciou, ainda, um tratamento mais aprofundado e moderno para o conteúdo de Forças Intermoleculares, apesar de que estes resultados animadores foram obtidos com um programa ainda não completamente adaptado para o uso em sala de aula e que ainda apresenta uma certa robustez e dificuldades que os alunos assinalaram na avaliação final da atividade. Consideramos que o trabalho foi bastante facilitado pela competência e experiência da maioria dos estudantes com o uso de ferramentas computacionais, que possibilitou uma maior agilidade e ganho de tempo com o treinamento.

Superar os problemas das disciplinas introdutórias envolve permitir ao estudante a possibilidade de pensar como um químico – ou pelo menos ser capaz de estabelecer relações entre dois níveis de representação e compreensão dos fenômenos o nível macro e micro. A compreensão desta conexão é provavelmente o mais importante aspecto que um estudante pode ter em um curso introdutório de química (Gillespie,1997). Por isso, os livros didáticos devem continuamente enfatizar as relações entre as observações do mundo macroscópico e o mundo microscópico de átomos e molécula e o professor propiciar várias oportunidades de representações nos diferentes níveis. Nesse sentido e apesar do pouco tempo de utilização da ferramenta seu uso resultou bastante satisfatório, principalmente por possibilitar ao estudante o contato com diferentes formas de representação além de propiciar o estabelecimento de conexões entre os diferentes níveis de representação do conhecimento químico (Johnstone, 1993). Isto torna-se mais relevante se levarmos em consideração que no pré-teste a maioria dos estudantes apresentava sérios problemas de representação, a pesar de que grande parte deles já cursara no segundo grau ou em cursos técnicos disciplinas de química que deveriam ter enfatizado esta compreensão. Possivelmente seria

desejável, como indica Jones (2001), complementar esta abordagem com os experimentos de laboratório tradicional para solucionar o fosso que separa aspectos da química teórica e da química prática.

Além disso, o estudo corroborou a concepção tácita entre os pesquisadores em Ensino de Química sobre a fragilidade e ineficiência de aulas teóricas, por mais cuidadosa e melhores que elas sejam para a formação de um pensamento químico.

Referências

- Atkins, P e Jones, L.L. *Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. Trad. Caracelli, I ...[et al.]. Porto Alegre: Bookman, 2001.
- Ben-Zvi, R., Silberstein, J. , Mamlok, R. Macro-micro relationships: a key to the world of chemistry. In Lijnse, P. L.; Licht, P.; Vos, W. de; Waarlo, A. J. *Relating macroscopic phenomena to microscopic particles: a central problem in secondary Science Education*. CD-β Press: Utrecht, 1990. P. 183-197.
- Coutinho, K. e Canuto, S. *DICE: Software de Simulação computacional*. Instituto de Física, Universidade de São Paulo. 1994.
- Coutinho, K. e Inoue, J. *VISMOL: Software de Visualização de Moléculas*. Universidade de Mogi das Cruzes. 1999.
- Gillespie, R.G. What is wrong with the general chemistry course? *Journal of Chemical Education*. v. 68 , 1991. p.192.
- Gillespie, R.G. Commentary: Reforming the General Chemistry Textbook. *Journal of Chemical Education*. v. 74, 1997. p.484.
- Hogan, K. Nastasi, B.K. and Pressley, M. Discourse Patterns and Collaborative Scientific Reasoning in Peer and Teacher-Guided Discussions. *Cognition and Instruction*, v.17, n.4, 2000. p. 379-432.
- Holme, T. Divergence of Faculty Perceptions of General Chemistry and Problem Solving Skills. *Journal of Chemical Education* v. 78, n. 12, 2001. p.1578.
- Johnstone, A.H. The development of chemistry teaching. *Journal of Chemical Education*. v. 70, n.9, 1993. p. 701-705.
- Jones, M. B. Molecular Modeling in the Undergraduate Chemistry Curriculum. *Journal of Chemical Education*. v. 78, n. 7, 2001. p. 867.
- Lijnse, P. L., Licht, P. L. , Vos, W. de, Waarlo, A. J. Relating macroscopic phenomena to microscopic particles: a central problem in secondary science education, CD-β Press: Utrecht, 1990.
- Nersessian, N. Should physicists preach what they practice? *Science & Education*. v. 4, 1995. p.203-226.
- Ribeiro, A.A. e Greca, I.M. Simulações Computacionais e Ferramentas de Modelização em Educação Química: Uma Revisão de Literatura Publicada. *Química Nova*. in press.
- Santos Filho, P.F. Os trinta anos da disciplina “Química Geral” oferecida aos alunos ingressantes no curso de graduação do Instituto de Química da UNICAMP. *Química Nova*, v.23, n. 4, 2000a. p. 563-567.
- Santos Filho, P.F. Uma disciplina teórica de Química Geral para alunos ingressantes no curso de graduação em Química. *Química Nova*, v. 23, n. 5, 2000b. p. 699-702.
- Serrano, A., Santos, F.M.T., Perry, G., Greca, I.M. e De Boita, L. Adaptação de um Software Científico de Modelagem de Líquidos Moleculares para uso em Ensino de Química: Perspectivas e Problemas. In: XI Encontro Nacional de Ensino de Química. Anais... 2002. p. 154.
- Serrano, A., Santos, F.M.T. and Greca, I.M. Teaching Ionic Solvation Structure with a Monte Carlo Liquid Simulation Program. *Journal of Chemical Education*, *submetido*.
- Tao, P-K & Gunstone, R.F. The Process of Conceptual Change in Force and Motion during Computer-Supported Physics Instruction. *Journal of Research in Science Teaching*, v. 36, n.7, 1999. p.859-882.

- Tsaparlis, G. & Georgiadou, A. A three-cycle method of teaching beginning high school chemistry students, based on the macro, the representational and the sub-micro levels of chemistry. In Bargellini, A.; Todesco, P. *Proceedings of the 2nd European Conference on Research in Chemical Education*. University of Pisa: Pisa, 1993. p. 357-362.
- White, B.Y & Gunstone, R.F. *Probing Understanding*. London: Falmer,. 1992.
- Wu, Ksin-Kai, Krajcik, J.S. & Soloway, E. Promoting Understanding of Chemical Representations: Students' use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching*. v. 38. 2001. p. 821.
- Zeile, J.V. & Jones, L.L. Teaching Chemistry in the New Century: General Chemistry. *Journal of Chemical Education*.. v. 78, n. 9, 2001. p.1170.

Recebido em 13.12.2002

Aceito em 22.04.2003