

A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química

Daniele Raupp¹

Agostinho Serrano²

Tales Leandro Costa Martins³

Resumo

A química computacional vem sendo desenvolvida no seio das universidades como uma alternativa para a pesquisa em química, sendo já reconhecida como área de pesquisa. Neste artigo, discutimos o uso do referencial vygotskyano para compreender como se processa o aprendizado de conceitos e representações químicas com o uso da mesma. Apresentamos as alternativas que professores possuem para utilizar softwares de química computacional, bem como um exemplo de atividade que foi desenvolvido pela pesquisadora na própria Fundação Liberato. Concluimos que, mesmo ainda sendo tema de pesquisa em ensino, é inegável sua atual contribuição ao aprendizado de química, e, portanto, recomendamos o seu uso.

Palavras-chave: Química computacional. Aprendizado de conceitos químicos. Estereoquímica.

Abstract

Computational Chemistry is being developed within the universities as an alternative for researching chemistry, being already recognized as a research field in chemistry. In this paper, we discuss the use of the Vygotskian theoretical framework to understand how the learning of concepts and chemical representations occurs. We also present the alternatives teachers have to use computational chemistry software, as well as a sample activity that was developed by the researcher in the Fundação Liberato. We conclude that, even thou still being a current research field, its undeniable that computational chemistry already contributes to the learning of chemistry, and, therefore, we recommend its use.

Keywords: Computational chemistry. Learning of chemical concepts. Stereochemistry.

¹ Licenciada em Química. Aluna do Programa de Pós Graduação em Ensino de Ciências e Matemática (PPGECIM) da Universidade Luterana do Brasil (ULBRA) Canoas. E-mail: danieleraupp@hotmail.com

² Doutor em Física Atômica e Molecular (USP). Professor do Programa de Pós Graduação em Ensino de Ciências e Matemática (PPGECIM) da Universidade Luterana do Brasil (ULBRA) Canoas. E-mail: asandraden@gmail.com

³ Doutor em Química (IME). Professor do Programa de Pós Graduação em Ensino de Ciências e Matemática (PPGECIM) da Universidade Luterana do Brasil (ULBRA) Canoas. E-mail: taleslcm@gmail.com

1 Introdução

Melhorar a compreensão dos alunos de conceitos de Química tem sido um dos principais objetivos dos pesquisadores em Ensino de Química (bem como de Ciências em geral) durante as últimas décadas. Um dos recursos que vem sendo utilizado desde a década de 60 como instrumento para a aprendizagem é o computador, como se pode observar nos pioneiros trabalhos de Atkinson (1968), Suppes; Morningstar (1968). As possibilidades de uso desta tecnologia são muito grandes e, com o passar dos anos, tem evoluído e se modificado, como podemos constatar em alguns artigos selecionados para investigar a presença desta temática no universo da Química (RIBEIRO; GRECA, 2003). No início da década de 70, na University of Lancaster, Inglaterra, um curso de Química Quântica foi cuidadosamente organizado pelo químico B. Duke a fim de recuperar a motivação perdida devido às tentativas frustradas de cientistas da computação que, ao introduzir técnicas computacionais no ensino de química, não utilizavam assuntos relevantes para a Química. Essa colocação revela que, em 1972, o uso de computadores na educação química já era foco de pesquisas, porém não estava sendo conduzido de maneira a incentivar os estudantes. No seu experimento, Duke utilizou um programa para calcular as propriedades de compostos aromáticos pelo Método dos orbitais moleculares¹. Felizmente o quadro de insatisfação foi superado como constata Duke (1972), “Este experimento prático provou-se bem sucedido na medida em que a maioria dos estudantes aprenderam um corpo substancial de conhecimento sobre a aplicação da teoria de orbitais moleculares à química orgânica e se mostram bastante interessados (tradução nossa)”. Ainda era muito cedo para concluir algo, mas os comentários gerais acerca desta nova modalidade já eram favoráveis. Anos mais tarde, o mesmo tópico foi abordado na University Chemical Laboratory de Cambridge, no Reino Unido, onde microcomputadores eram usados como

ferramenta de ensino para a Teoria do Orbital Molecular. “Acreditamos que programas deste tipo são de grande ajuda no ensino de química teórica (tradução nossa)” (COLWELL; HANDY, 1988). Mas, dez anos depois, a Real Academia de Ciências da Suécia outorgou o Prêmio Nobel de Química de 1998 aos pesquisadores: Walter Kohn (Universidade da Califórnia, Santa Barbara, Califórnia, EUA), por sua contribuição ao desenvolvimento da Teoria do Funcional de Densidade e John A. Pople (Universidade North western, Evanston, Illinois, EUA), por sua contribuição ao desenvolvimento de métodos computacionais em química quântica. Com esses desenvolvimentos que foram iniciados a partir da década de 1960, a química reafirma-se como uma ciência exata, computável (FREITAS, 1998). A IUPAC define a química computacional da seguinte forma: “aspectos da pesquisa molecular que são tornados práticos pelo uso de computadores” (IUPAC, 2008).

A partir de então, o progresso no desenvolvimento de softwares e hardwares aliado a uma redução constante de custo dos materiais informáticos, torna a química computacional uma das áreas mais promissoras deste novo século. Mais recentemente a química supramolecular (compostos formados por várias moléculas) foi abordada simultaneamente por pesquisadores da Université Louis Pasteur da França e da Novosibirsk State University da Rússia no ano de 2000, através de um curso baseado no modelo CAI, de instrução auxiliada pelo computador (Computer Aided Instruction), que, segundo os pesquisadores Varnek *et al.*, (2000), “permite a visualização de estruturas complexas e a realização de alguns cálculos modestos enquanto concomitantemente ocorre a leitura do texto.” Ademais, cursos assistidos por computador são facilmente atualizáveis, o que é especialmente importante para campos (da ciência) que se expandem e desenvolvem-se rapidamente (tradução nossa)”. No mesmo ano, no Departamento de Química e Bioquímica da Brigham Young University em Utah, Estados Unidos,

¹ Teoria de Mulliken que considera os elétrons de valência estão em orbitais espalhados pela molécula inteira, diferente da Teoria de Pauling que considera que os elétrons de valência estão localizados entre os átomos ligados através da sobreposição de orbitais atômicos semi-preenchidos.

foi desenvolvido um método de ensino que incluía um pacote com animações para a compreensão de Orbitais Moleculares nas reações orgânicas. O objetivo do uso de simulações era facilitar a visualização e compreensão deste tópico. Com este método os autores Fleming, Hart e Savage (2000) concluíram que “estudantes podem se beneficiar de representações computacionais tridimensionais de eventos químicos” (tradução nossa).

O desenvolvimento e o posterior uso de softwares em sala de aula auxiliam a resolução de problemas químicos, e a versatilidade da química computacional permite não só sua aplicação no ensino de química como também nas áreas de pesquisa e desenvolvimento de laboratórios e indústrias. A modelagem molecular, por exemplo, é uma ferramenta importante no desenvolvimento de fármacos e pode ser utilizada no planejamento racional de novos medicamentos.

Segundo Rodrigues (2001, p. 43), “a modelagem molecular fornece informações importantes para o processo de descoberta de fármacos. Ela permite a obtenção de propriedades específicas de uma molécula que podem influenciar na interação com o receptor”.

Hoje muitos softwares estão disponíveis na Internet para download totalmente livre, e outros podem ser comprados dos seus fabricantes. Pode-se salientar que estas ferramentas, quando devidamente aplicadas, além de motivar aprendizagem, colaboram com a adaptação do aluno a uma sociedade cada vez mais tecnológica. Dentro deste panorama de crescente popularização do uso de softwares de ensino de química e química computacional, o que se pode afirmar sobre sua contribuição para a aprendizagem em química?

Tome-se a frase de Fleming, Hart e Savage (2000), “descobrimos que estudantes podem se beneficiar de representações computacionais tridimensionais de eventos químicos (tradução nossa)”. No início deste artigo, é mencionado que a implementação de química computacional, na sala de aula, foi inicialmente um fracasso em Lancaster devido ao fato de que fora implementada por profissionais da área da computação, e não por químicos. Da mesma forma,

é possível observar que existem vários relatos de “aprendizado” em química com o uso de química computacional, mas estes relatos, feitos em geral por químicos lecionando e não pesquisadores em ensino de química carecem de observações e considerações mais detalhadas que possam elucidar quais – e como – aspectos do uso de computadores de fato auxiliam o aprendizado de conceitos químicos. Sendo assim, uma visita a referenciais teóricos de cognição e aprendizado pode nos auxiliar a compreender o que ocorre durante a interação entre estudantes e computadores.

2 Referencial teórico

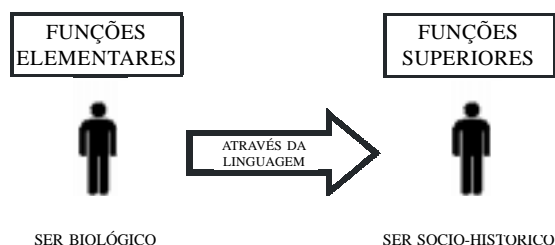
O aporte teórico deste trabalho é a Teoria da Mediação do russo Lev Semionovitch Vygostky (1899-1934), teórico que trouxe inúmeras contribuições para a educação. Diversos temas unificam a Teoria de Vygostky considerada complexa e abrangente. O primeiro tema é a importância da cultura, o segundo é o papel central da linguagem, e o terceiro é como Vygostky identifica o aprendizado ocorrendo dentro do que o mesmo chama de ZDP, a “Zona de Desenvolvimento Proximal”.

2.1 A importância da cultura e o papel da linguagem

O desenvolvimento cognitivo não pode ser entendido sem referência ao contexto sócio-cultural no qual ele ocorre. Sem a cultura, o nosso funcionamento intelectual é tão limitado quanto o dos primatas, formado apenas por funções mentais elementares, que são determinadas imediata e automaticamente pelos estímulos externos ou pelos estímulos internos baseados nas necessidades biológicas. Quando a cultura e a linguagem fazem parte do nosso meio, nos tornamos capazes de desenvolver as chamadas funções mentais superiores (pensamento, linguagem e comportamento volitivo) envolvidas no pensamento, raciocínio, lembrança e assim por diante. As funções mentais superiores são construídas ao longo da história social do homem, na sua relação com o mundo, mediadas

pelos instrumentos e signos desenvolvidos culturalmente, fazendo com que o homem se distinga dos outros animais nas suas formas de agir no e com o mundo. Definimos instrumento como algo utilizado para realizar alguma coisa e signo algo que significa alguma outra coisa. Uma criança pequena, por exemplo, usa os dedos (instrumento) para realizar a operação de soma. À medida que esta operação é internalizada, os instrumentos são substituídos por signos internos (representações mentais). Quanto mais os signos são utilizados, mais vão modificando as operações psicológicas das quais o indivíduo é capaz e quanto mais instrumentos ele aprende usar, tanto mais se amplia a gama de atividades nas quais pode aplicar suas novas funções psicológicas.

Dos três temas, o principal de sua teoria é a importância da linguagem no desenvolvimento das funções mentais superiores. Vygostky acreditava que a linguagem é um fenômeno social e cultural que está envolvido no desenvolvimento do pensamento (LEFRANCOIS, 1988; MOREIRA, 1999).



2.2 O desenvolvimento cognitivo do estudante ao dominar progressivamente a “linguagem” química

A elaboração – e a eventual publicação – de sua teoria de desenvolvimento cognitivo baseado na mediação causaram um impacto profundo na compreensão do aprendizado em geral e, mais especificamente, no aprendizado de ciências. A importância que Vygostky dá a linguagem como modeladora das funções psíquicas superiores pode ser transportada naturalmente para as ciências e matemática, visto que ambas possuem um conjunto de símbolos e representações que devem ser pro-

gressivamente dominadas pelos estudantes e que são criados no seio do meio sócio-histórico-cultural de suas respectivas áreas. De um ponto de vista filosófico dentro das ciências, o filósofo Laudan (1986) pode ser utilizado para compreender que o progresso de uma ciência advém de sua crescente capacidade de resolver problemas empíricos e conceituais. Esta crescente capacidade de resolver problemas é fruto da articulação do seu sistema simbólico, que sofre modificações no sentido de aprimorá-lo e refiná-lo. Assim, um estudante, que apresenta um domínio maior do sistema simbólico químico advindo – porque não? – da química computacional pode ser a chave para compreensão do sentido que a palavra “aprendizado” toma quando utilizamos química computacional em sala de aula.

2.3 Zona de desenvolvimento proximal (ZDP)

Tecnicamente, é a distância entre o nível de desenvolvimento real (que é determinado por aquilo que a criança é capaz de fazer sozinha, porque já tem um conhecimento consolidado) e o nível de desenvolvimento potencial (é determinado por aquilo que a criança ainda não domina, mas é capaz de realizar com auxílio de alguém mais experiente) determinado através da solução de problemas sob a orientação de um adulto ou em colaboração com companheiros mais capazes (VYGOTSKY, 1998).

Dentro deste contexto, para Vygostky, todo ambiente social pode servir como uma ZDP para o aprendiz. Uma questão importante é quando um programa computacional pode ser visto como “um par mais capaz”, dentro da ZDP de um aprendiz. Esta questão encontra-se já resolvida para a comunidade de informática na educação, que reconhece que é possível, sim, falar nestes termos (SALOMON; GLOBERSON; GUTERMAN, 1989). Dentro de nossa perspectiva em química computacional, contemplamos a formação, principalmente, de dois tipos de ZDP para o aprendiz: uma em que o par mais capaz é o professor, e o programa computacional serve como um instrumento de aprendizado, e outra em que o computador é, efetivamente, o par mais capaz.

3 Exemplos e possibilidades do uso de química computacional no ensino de química

De uma forma geral, o desenvolvimento de softwares para química computacional seguiu dois caminhos distintos, com a complementação atual de um terceiro. Inicialmente, trabalhou-se com o desenvolvimento de códigos capazes de resolver as equações da mecânica quântica para sistemas atômicos de forma estrita, baseadas em “primeiros princípios”². Estes cálculos envolvem a resolução de uma quantidade grande de integrais, mesmo depois de aplicadas as simplificações de praxe, como a aproximação de Born-Oppenheimer (*grosso modo* pode ser visto como a separação do movimento nuclear e eletrônico) e a inexistência de efeitos relativísticos, dentre outros. A partir disso, chegou-se a um compromisso inicial resultando em um método chamado SCF (*Self-Consistent Field*), praticamente onipresente em todos os programas de química computacional. Este método induz a uma nova aproximação que ignora a interação elétron-elétron³; que é “re-introduzida” de diversas formas, a mais popular é via teoria de perturbação, nos métodos abreviados por MP(n), onde o efeito de correlação eletrônica (interação entre elétrons) é introduzido via TP-RS (Teoria de Perturbação Rayleigh-Schrödinger). O segundo caminho de desenvolvimento seguiu não a partir de primeiros princípios, mas de aproximações e resultados de cálculos parametrizados por grupos atômicos, a fim de economizar etapas de cálculo computacional. Com o intuito de “abraçar” rapidamente o cálculo de sistemas maiores, e, portanto, de maior interesse químico, os métodos semi-empíricos parametrizaram diversos cálculos que os métodos *ab initio* necessariamente repetem a cada novo sistema. Assim, ganharam-se escalas de poder de cálculo, com uma natural perda de precisão. Dentre os métodos mais populares, encontram-se o método INDO, CNDO e os mais

usados AM1 e PM3. Finalmente, nas últimas décadas, uma nova escala de cálculo foi introduzida, com os métodos de simulação DM (Dinâmica Molecular) e Monte Carlo (ALLEN; TILDESLEY, 1987), que, basicamente, não tratam o sistema químico como obedecendo a regras da mecânica quântica, mas como sistemas atômicos clássicos, utilizando potenciais clássicos para modelar o comportamento destes sistemas. Aplica-se a sistemas como milhares de átomos, tipicamente para modelagem de sistemas de interesse biológico ou solvatação, onde esta aproximação encontra-se justificada pelo seu interesse químico. É comum os softwares atualmente existentes em química computacional utilizarem estes métodos ou métodos derivados, que não discutiremos aqui. Parte destes métodos pode ser utilizada tanto para a pesquisa como também para o ensino de química.

No ensino de química, as ferramentas disponíveis possibilitam tanto a demonstração quanto a simulação de vários conceitos e podem facilitar o aprendizado por meio de visualização dinâmica em vários campos da química. Um total de seis softwares será discutido a seguir, todos eles originalmente concebidos para uso acadêmico em pesquisa em química, mas que contemplam também o seu uso didático no ensino. Na Química Analítica, por exemplo, o *CHEMLAB* (figura 1) é uma ferramenta de demonstração e simulação com a qual é possível executar diversos experimentos como titulações, reações de oxidação e análises gravimétricas. Além da parte experimental, possui a parte teórica relacionada a cada experimento com os passos necessários para sua construção. Na Química Quântica um dos softwares mais utilizado é o *GAUSSIAN* (figura 2) que utiliza as leis da Mecânica Quântica para prever as energias, estruturas e propriedades e a frequência vibracional de sistemas moleculares. O *CHEMSKETCH* (figura 3) é uma ferramenta avançada de desenho químico que fornece às propriedades moleculares, otimização e visualização 3D, capacidade de

² Existem inúmeras referências para esta temática, entre elas Szabo, 1989.

³ Com a exceção da imposição da anti-simetria da função de onda eletrônica, que seria considerada posteriormente como a primeira aproximação do efeito de correlação eletrônica.

nomear as moléculas, conforme de IUPAC, e ainda possui um grande banco de dados com estruturas químicas e materiais de laboratório. Em particular, para a aplicação que foi desenvolvida, neste artigo, utilizamos a ferramenta de construção bidimensional de moléculas, que permite adicionar átomos ou grupamentos atômicos e conectá-los por ligações químicas representadas por linhas de variados tipos (ligações simples, duplas, aromáticas, etc). O software calcula automaticamente a valência de cada átomo e restringe a construção da molécula com base na regra do octeto, a não ser que seja instruído a não fazer esta limitação. Em seguida, é possível solicitar a construção da forma espacial 3D da espécie estudada, o que aciona outra janela onde o estudante pode, agora, rotacionar tridimensionalmente a espécie estudada, além de observar estas espécies em diferentes visualizações (*Ball and sticks*, *sticks only*, *spacefill*, *wireframe*, *dots only* e *disks*) com possibilidade de visualizar ligações e arranjo espacial das espécies de forma realçada em cada uma destas representações. O *SPARTAN* (figura 4) é “Kit” modelo eletrônico que possibilita a utilização de modelos moleculares na instrução da química e fornece aos estudantes os métodos computacionais para resolução de problemas. Na área de modelagem molecular, construção de gráficos e projeto de fármacos, o *ARGUSLAB* (figura 5) é uma ferramenta em 3D especializada em estruturas moleculares de interesse para a medicina, indústria farmacêutica e química orgânica. O programa permite desenhar complicadas configurações de proteínas obtendo cadeias helicoidais de aminoácidos, de hélice alfa, etc. Na área de espectroscopia uma das alternativas é o *HYPERCHEM* (figura 6) que além da capacidade para a simulação a priori de espectros NMR através de métodos quânticos, contém uma base de dados com cerca de 10.000 moléculas, aplicável a macromoléculas assim como moléculas pequenas. O software também possui visualização 3D e animação, além de cálculos de química quântica e mecânica molecular.

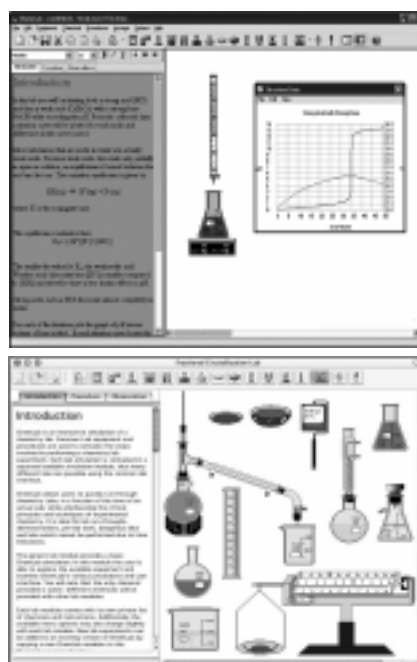


Figura 1 – Ilustração do software CHEM LAB da ModelScience

Pode-se observar o ferramental utilizado para simulações na área de Química Analítica.



Figura 2 – GAUSSIAN da Gaussian Inc

Na figura 2 (superior) observamos diversas janelas que são utilizadas para preparar o cálculo quântico, bem como a visualização de resultados, também ilustrados na janela da figura inferior.

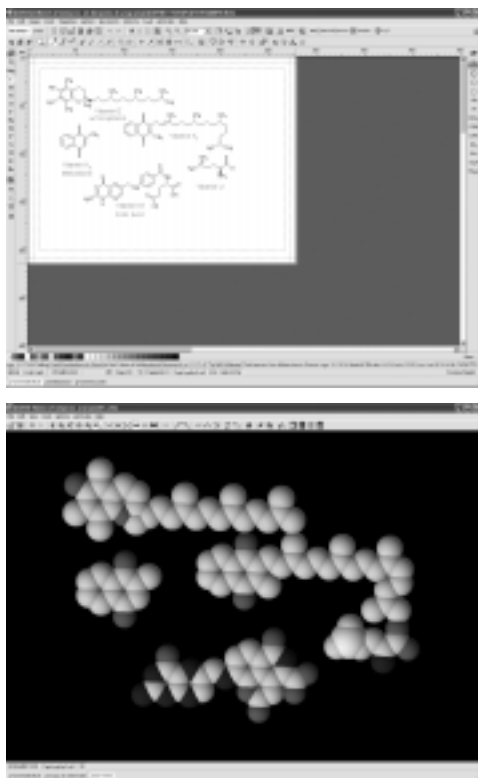


Figura 3 – CHEMSKETCH da ACD Labs

Na figura 3 (superior) está desenhada uma reação química e na seguinte, uma ilustração de materiais de laboratório.

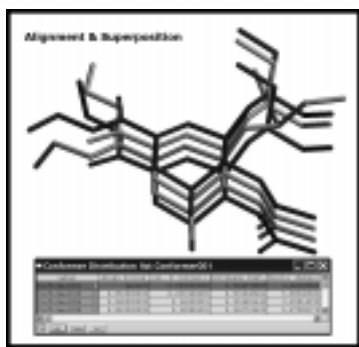


Figura 4 – SPARTAN da Wavefunction

A funcionalidade de Spartan (figura 4) é semelhante à de Gaussian (figura 2), mas com recursos mais limitados de cálculo, em compensação, de mais fácil uso e melhores ferramentas de visualização.

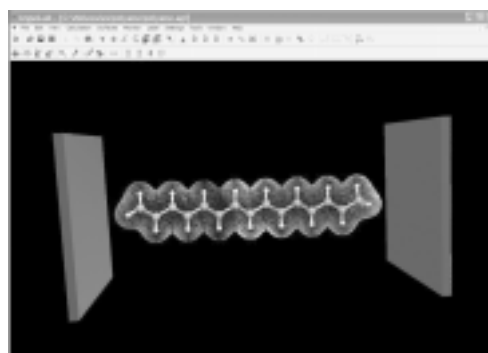
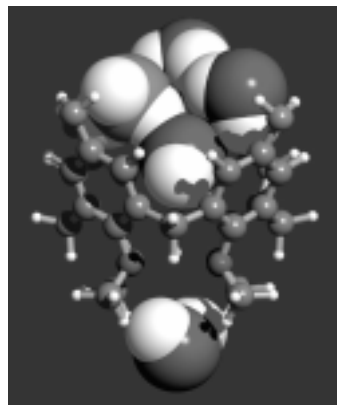


Figura 5 – ARGUSLAB da Planaria Software

Conforme pode ser visto na figura 5, o Arguslab dedica-se ao estudo de macromoléculas, principalmente de interesse biológico, mas também se pode utilizar para investigações em polímeros (figura 5 inferior).

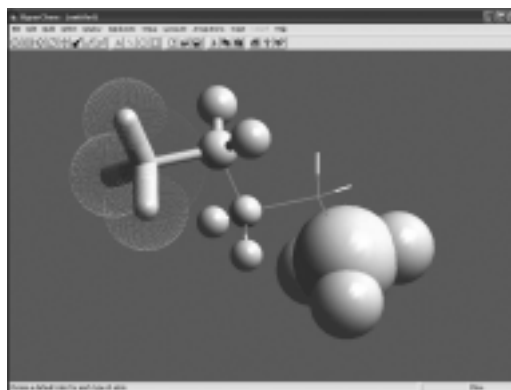


Figura 6a – HyperChem da HyperCube

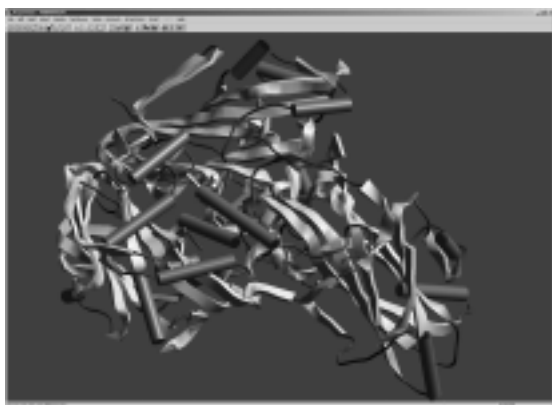


Figura 6b – HyperChem da HyperCube

Na figura 6a, pode ser observado um sistema pequeno, tratável segundo as regras da mecânica quântica; na figura 6b, um sistema passível de ser tratado com simulação tipo MD (ver texto).

Um exemplo da utilização de ferramentas computacionais foi aplicado com estudantes de 4ª série do Curso Técnico de Química da Fundação Escola Técnica Liberato Salzano Vieira da Cunha da cidade de Novo Hamburgo-RS no ano de 2007. Em um curso sobre química computacional, um dos temas abordados foi estudo e representações de isômeros geométricos. Este tópico foi selecionado devido à dificuldade de aprendizagem encontrada pelos estudantes de química orgânica básica quando é requerida a manipulação e a percepção espacial destas representações. O experimento foi realizado em três etapas: pré-teste, sessões de instrução com software de Simulação ChemSketch (figura 3) e pós teste. O experimento iniciou-se com uma breve revisão sobre os conceitos dos tipos de isomeria, focando a isomeria espacial geométrica também denominada *cis-trans*. Após, foi aplicado o teste para desenhar pares de isômeros conforme os conhecimentos prévios. Após o teste, foram realizadas quatro sessões de instrução de quatro horas acerca de isomeria com o auxílio do programa ChemSketch 10.0 (ACD/ChemSketch Free-ware, 2006), para auxiliar na representação de moléculas-exemplo, cuja complexidade representacional variava desde modelos simples até formas complexas, sendo os alunos incentivados a interagir com as fórmulas

planas e os seus respectivos modelos 3D exibidos no computador. Após a construção de cada uma das moléculas, tanto a fórmula estrutural quanto a 3D foram transferidas para o Microsoft Word (Pacote Microsoft Office) para mostrar o potencial de aplicabilidade do software na confecção de trabalhos, relatórios, artigos, etc. Todos os estudantes executaram diligentemente a atividade, construindo adequadamente as estruturas. Posteriormente (duas semanas depois), sem o uso do software, aplicamos um segundo teste com os mesmos materiais, selecionando moléculas de semelhante grau de dificuldade diferentes das utilizadas no pré-teste.

4 Resultados

Ao se compararem os pré e pós-testes, analisamos:

- Representação das Ligações: todos os átomos apresentam todas as ligações de forma correta?
- Representação dos Átomos: O estudante preocupa-se em usar cores e tamanhos diferentes para diferenciar os átomos da molécula?
- Visão 3D: há evidências de que o desenho representa uma visão 3D da molécula?

As representações das moléculas produzidas no pós-testes mostraram-se mais elaboradas, com todas as ligações contempladas, apresentando os diferentes átomos por tamanho e cores além de uma melhor representação em 3D (figura 7). Ao representar as espécies moleculares, os estudantes evidenciaram diferenciar as posições espaciais dos grupos atômicos que diferenciam estrutura *cis* e *trans*, além de adquirirem, via interação tanto com um parceiro (instrutor) mais capaz e

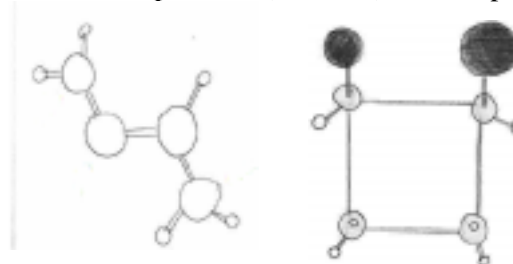


Figura 7 – Representações utilizadas por um estudante nas avaliações

um instrumento, ou apenas com o programa computacional como um “instrutor mais capaz”, competência representacional.

Na figura 7, à esquerda, o número de ligações não está correto, e espécies atômicas não foram devidamente representadas no pré-teste. Observando o pós-teste, na imagem à direita, verificam-se todas as espécies atômicas devidamente representadas, bem como a utilização da haste desenhada à frente/trás (circulado) da espécie atômica para evidenciar sua posição geométrica 3D, planificada.

5 Conclusões e perspectivas

O desenvolvimento histórico da química computacional possibilitou que inúmeros softwares fossem desenvolvidos, sendo que um dos seus maiores desenvolvedores, Pople, foi agraciado com o Nobel de Química em 1998 exatamente por conta de sua contribuição ao desenvolvimento de métodos computacionais, o que levou à eventual popularização dos mesmos. Ainda estamos explorando a potencialidade destes softwares no ensino de química, mas resultados preliminares indicam que existem definitivos ganhos em aprendizagem, que ocorrem devido à formação de uma díade entre o computador e o aluno e da eventual criação de uma ZDP vygotskyana onde o sistema simbólico da química pode ser manipulado e assimilado pelo estudante. Assim, o computador é utilizado como ferramenta para se adquirir uma “linguagem” química, que se revela potencialmente poderosa para que o estudante seja capaz de resolver situações-problemas químicas. Dessa forma, encorajamos o uso crescente (desde que feito como os devidos cuidados pedagógicos) destes softwares em sala de aula, não apenas pelo seu impacto no aprendizado de conceitos e representações químicas, mas pela eficiência da ferramenta como preparação do estudante para um futuro profissional onde a química computacional estará cada vez mais presente.

Referências

- ACD/CHEMSKETCH FREeware, version 10.00. Advanced Chemistry Development, Inc., Toronto, ON, Canada, www.acdlabs.com, 2006.
- ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. **Computer Simulation of Liquids**. Oxford: Oxford University Press, 1987.
- COLWELL, S.; HANDY, N. Computerized instruction and the learning process. **American Psychologist**, Washington, DC, v. 23, p. 225-239, 1968.
- COLWELL, S.; HANDY, N. The microcomputer as a Teaching Tool for Molecular Orbital Theory. **Journal of Chemical Education**, Washington, DC, v. 65, n. 1, p. 21-23, 1988.
- DUKE, B. Use the Hückel Molecular Orbital Computers Program in Teaching. **Journal of Chemical Education**, Washington, DC, v. 49, n. 10, p. 703-704, 1972.
- FLEMING, S. A.; HART, G. R.; SAVAGE, P. B. Molecular Orbital Animations for Organic Chemistry. **Journal of Chemical Education**, Washington, DC, v. 77, n. 6, p. 790-793, 2000.
- FREITAS, L.C. Prêmio Nobel de Química 1998. **Química Nova na Escola**, São Paulo n. 8, p. 3-6, 1998.
- IUPAC. Glossary of terms used in medicinal chemistry. **Iupac recommendations 1998**. Disponível em: < <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/medchem/ah.html> > Acesso em: 29/09/2008.
- LAUDAN, L. **El progreso y sus problemas. Hacia una teoría del crecimiento científico**. Madrid: Encuentro Ediciones, 1986, 279p.
- LEFRANCOIS, G.R. **Psychology for Teaching**. 6. ed. California: Wadsworth, 1988.
- MOREIRA, M.A. **Teorias de Aprendizagem**. São Paulo: EPU Editora, 1999.
- RIBEIRO, A.A.; GRECA, I.M. Simulações Computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão da

literatura publicada. **Química Nova**, São Paulo, v. 26, n. 4, p. 542-549, 2003.

RODRIGUES, C. Processos Modernos no Processamento de Fármacos: Modelagem Molecular. **Química Nova na Escola**, São Paulo Cadernos Temáticos, n. 3, p. 43-49, 2001.

SALOMON, G.; GLOBERSON, T.; GUTERMAN, E. The Computer as a Zone of Proximal Development: Internalizing reading-related metacognitions from a reading partner. **Journal of Educational Psychology**, Washington, DC, v. 81, n. 4, p. 620-627, 1989.

SUPPES, P.; MORNINGSTAR, M. Computer-assisted instruction. **Science**, Washington, DC, v. 166, p. 343-350, 1968.

SZABO, A.; OSTLUND, N. S. **Modern Quantum Chemistry**. Dover, New York, 1989.

VARNEK, A. et al. Computer-Assisted Instruction in Undergraduate and Graduate Chemistry Courses. **Journal of Chemical Education**, Washington, DC, v. 77, n. 2, p. 222-226, 2000.

VYGOTSKY, L. S. **Formação social da mente**. São Paulo: Martins Fontes, 1998.