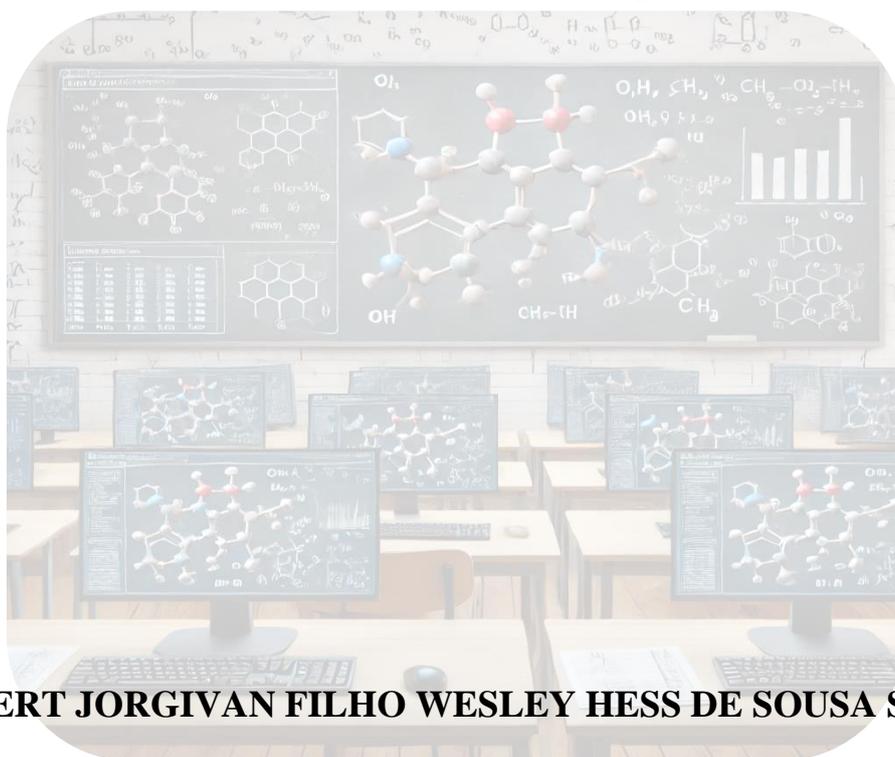




UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**Um panorama da associação entre a Química Computacional
e o Ensino de Química Orgânica**



ALBERT JORGIVAN FILHO WESLEY HESS DE SOUSA SILVA

JOÃO PESSOA – PB
Outubro/2024



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Um panorama da associação entre a Química Computacional e o Ensino de Química Orgânica

ALBERT JORGIVAN FILHO WESLEY HESS DE SOUSA SILVA



**Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Departamento de
Química da Universidade Federal
da Paraíba como requisito para o
título de Licenciado em Química.**

Orientadora: Prof^ª Dr^ª. Karen Cacilda Weber

JOÃO PESSOA – PB
Outubro/2024

Catálogo na publicação
Seção de Catálogo e Classificação

S586p Silva, Albert Jorgivan Filho Wesley Hess de Sousa.
Um panorama da associação entre a química
computacional e o ensino de química orgânica / Albert
Jorgivan Filho Wesley Hess de Sousa Silva. - João
Pessoa, 2024.
56 p. : il.

Orientação: Karen Cacilda Weber.
TCC (Curso de Licenciatura em Química) - UFPB/CCEN.

1. Ensino de química. 2. Química computacional. 3.
Química orgânica. I. Weber, Karen Cacilda. II. Título.

UFPB/CCEN

CDU 54(043.2)



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
COORDENAÇÃO DOS CURSOS DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Ata da sessão de defesa de Trabalho de Conclusão de Curso para obtenção do grau de LICENCIADO em Química do(a) discente ALBERT JORGIVAN F. W. H. S. SILVA, matrícula nº 20200074164, realizada aos 25 (VINTE E CINCO) dias do mês de OUTUBRO de 2024, às 10 h 00 min. Reuniram-se no(a) SALA DQ 03, UFPB, Campus I, João Pessoa, os membros da Banca Examinadora composta pelos(as) professores(as) CLAUDIA DE FIGUEIREDO BRAGA, CLAUDIO GABRIEL DE LIMA JUNIOR (examinadores) e KAREN CACILDA WEBER (presidente/orientador(a)), com o objetivo de proceder à avaliação do Trabalho de Conclusão de Curso de intitulado "UM PANORAMA DA ASSOCIAÇÃO ENTRE A QUÍMICA COMPUTACIONAL E O ENSINO DE QUÍMICA ORGÂNICA". Após a apresentação do trabalho pelo(a) discente e a arguição pela banca examinadora, os membros reuniram-se para deliberar sobre a nota a ser atribuída ao referido Trabalho de Conclusão de Curso. O(A) presidente da sessão, Prof.(a) KAREN CACILDA WEBER, comunicou ao aluno(a) e demais presentes que, por decisão da Banca, foi atribuída ao Trabalho de Conclusão de Curso a nota 10 (dez). Nada mais havendo a tratar, lavrou-se a presente ata que vai assinada pelos membros da Banca. João Pessoa, 25 de OUTUBRO de 2024.

Karen Weber

Orientador(a)

Claudia F. Braga

Examinador(a) 1

Claudio Gabriel Lima Junior

Examinador(a) 2

AGRADECIMENTOS

Os últimos quatro anos foram uma jornada agradável, porém exigente, a qual eu não conseguiria completar sem a ajuda e o apoio de muitas pessoas que posso incluir aqui.

Gostaria de agradecer a professora Dr^a Karen Weber, por sua orientação e apoio durante meu tempo como estudante da UFPB. Meu curso não seria a mesma coisa sem a sua presença e a dos professores Franklin Kaic, Edvan Cirino, Cláudia Braga, Cláudio Gabriel, Elizete Ventura, Ercules Teotonio e Cláudia Cunha. Obrigado a todos pelas conversas estimulantes dentro e fora das salas de aula.

Também sou grato aos meus colegas de curso de todas as disciplinas, principalmente àqueles que participaram de trabalhos em grupo comigo. À Ashley Santana e à Antônio Vicente, obrigado pelo apoio, conselhos, conversas e amizade! Muito obrigado também aos membros do LMMRQ cujo vínculo constante e paralelo ao meu percurso enquanto licenciando foi essencial. Aos professores Wagner Faustino e Rafaela Pesci, obrigado pelas orientações e dedicação quanto ao curso.

Finalmente, e acima de tudo, quero agradecer à minha família pelo incentivo, apoio infinito e carinho. Eu nunca teria concluído este trabalho sem vocês! À minha mãe, Maricilde da Silva Castro, minha patrona! Ao meu namorado, Eduardo Gonçalves, pelo amor, atenção, e momentos felizes proporcionados até hoje! Obrigado, meus amores, por me guiarem em busca dos meus objetivos acadêmicos e profissionais!

RESUMO

O objetivo deste trabalho foi verificar a influência do uso da Química Computacional no ensino de Química Orgânica como metodologia diferenciada, segundo a literatura. A base de dados selecionada foi o Portal de Periódicos Capes e artigos revisados por pares das últimas duas décadas foram avaliados. Após os processos de inclusão e exclusão, utilizou-se a Análise do Conteúdo, segundo Bardin (2015), composta por: pré-análise, exploração do material e tratamento dos resultados e interpretação, logo, restaram 24 trabalhos. Estes focaram suas pesquisas de caráter pedagógico envolvendo compostos orgânicos simples e complexos e o uso de diversas ferramentas da Química Computacional. Os resultados mostraram que houve o desenvolvimento de ideias, conceitos e conteúdos referentes a Química Orgânica e indicaram que as dificuldades de aprendizagem foram reduzidas. O contato com a Química Computacional possibilitou uma idealização mais significativa da importância e do que essa tecnologia representa. Quanto à aplicação das intervenções propostas nos trabalhos, constatou-se a existência de diferentes concepções e, para a maioria dos discentes, as aulas com o uso de programas químicos computacionais tornaram a aprendizagem mais fácil e significativa. Diante do exposto, com a intenção de colaborar com o tema, sugere-se que a Química Computacional seja utilizada com mais frequência, em especial os softwares, como ferramenta alternativa no processo de ensino e aprendizagem, o que pode possibilitar aos alunos transpor as barreiras do conhecimento químico para responder as questões que possam surgir.

Palavras-chave: Ensino de Química. Química Computacional. Química Orgânica.

ABSTRACT

The objective of this study was to verify the influence of the use of Computational Chemistry in the teaching of Organic Chemistry as a differentiated methodology, according to the literature. The database selected was the Capes Journal Portal and peer-reviewed articles from the last two decades were evaluated. After the inclusion and exclusion processes, Content Analysis was used, according to Bardin (2015), consisting of: pre-analysis, exploration of the material and treatment of the results and interpretation, therefore, 24 works remained. These studies focused on pedagogical research involving simple and complex organic compounds and the use of various Computational Chemistry tools. The results showed that there was the development of ideas, concepts and content related to Organic Chemistry and indicated that learning difficulties were reduced. Contact with Computational Chemistry allowed a more significant idealization of the importance and what this technology represents. Regarding the application of the interventions proposed in the studies, the existence of different conceptions was found and, for most students, classes using computational chemistry programs made learning easier and more meaningful. In view of the above, with the intention of contributing to the topic, it is suggested that Computational Chemistry be used more frequently, especially software, as an alternative tool in the teaching and learning process, which can enable students to overcome the barriers of chemical knowledge to answer questions that may arise.

Keywords: Chemistry Teaching. Computational Chemistry. Organic Chemistry.

LISTAS DE FIGURAS

Figura 1 – Desafios no ensino e aprendizagem na integração da Química Computacional em cursos de graduação.	16
Figura 2 – Modelo de Johnstone para os níveis de representação do conhecimento químico.....	17
Figura 3 – Regiões com a maior oferta de eletivas de QQC nos cursos de licenciatura em Química do Brasil.	19
Figura 4 – Total de artigos publicados por ano resultantes da busca com o descritor “ <i>Ensino de Química Computacional</i> ”.	24
Figura 5 – Total de artigos publicados por ano resultantes da busca com o descritor “ <i>Computational Chemistry Teaching</i> ”.....	25
Figura 6 – Número de trabalhos fornecidos por categoria pelo Portal de Periódicos da Capes.	26
Figura 7 – Principais conteúdos de Química Orgânica abordados nos trabalhos revisados.	42
Figura 8 – Um exercício no qual os alunos são induzidos a fazerem uso das representações estruturais e das energias calculadas para dar sentido a uma descarboxilação observada.	43

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Artigos estudados e seus conteúdos de Química Orgânica trabalhados.	27
-------------------------------------------------------------------------------------	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABP	Aprendizagem Baseada em Problemas
CAFe	Comunidade Acadêmica Federada
CTPC	Conhecimentos Tecnológico, Pedagógico e Científico
DFT	Teoria do Funcional de Densidade
FDA	<i>Food and Drug Administration</i>
FTIR	Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier
LMMRQ	Laboratório de Modelagem Molecular de Reações Químicas
LQQC	Laboratório de Química Quântica Computacional
QQC	Química Quântica Computacional
RMN	Ressonância Magnética Nuclear
RPP	Paradigma da Pedagogia Reflexiva
TGA	Análise Termogravimétrica
TDICs	Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	10
2. OBJETIVOS.....	13
2.1 Objetivo Geral.....	13
2.2 Objetivos Específicos	13
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	14
4. METODOLOGIA	20
4.1 Percurso Metodológico	20
4.2 Coleta de dados.....	21
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	22
5.1 Resultados da busca em Português.....	23
5.2 Resultados da busca em Inglês.....	24
5.3 Abordagens de ensino e Considerações gerais sobre a revisão	42
6. CONCLUSÕES	48
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	49

1. INTRODUÇÃO

A Química se apresenta dentro de um contexto predominantemente experimental, o qual possibilita que o método de aprendizagem seja aplicado de maneira dinâmica, ativa e tecnológica. Sendo assim, a forma de transposição didática utilizada, isto é, a mudança nos recursos ou metodologias didáticos usados, pode influenciar diretamente na maneira como os seus conteúdos serão aceitos pelos estudantes, pois dependendo de como esses assuntos serão apresentados, estes podem ser vistos como algo complexo e abstrato. As práticas pedagógicas atuais vêm acompanhadas do uso de recursos didáticos inovadores devido aos avanços científicos e tecnológicos, como ocorre com as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDICs), se configurando como instrumentos de mobilização, colaboração e interação no processo de ensino e aprendizagem (De Almeida; Borges; De Sá, 2021; Reis; Leite; Leão, 2021). Deste modo, para que o uso dessas tecnologias e dos programas de simulação se realizem de forma adequada é necessário que os futuros professores tenham acesso aos mesmos desde a sua graduação, tendo em vista que o desconhecimento sobre estes recursos é uma das grandes justificativas para o seu não uso (De Vasconcelos, 2021).

O processo tradicional de ensino de química pode se tornar muito mais atraente e eficaz para os alunos quando permeado por ferramentas tecnológicas interativas. Uma vez que a visualização de gráficos, modelagem molecular e animações, fornecem uma ideia mais clara e detalhada da dinâmica e interações moleculares, elas trazem uma nova camada de aprendizado. Os livros didáticos geralmente não fornecem informações suficientes para criar uma imagem clara do fenômeno na mente do aluno (Black, 2020; Da Silva Junior *et al.*, 2014).

Atualmente, o ensino de química em níveis de graduação e pós-graduação se beneficia enormemente dos avanços da informática. Muitos pacotes computacionais que podem ilustrar adequadamente estruturas químicas fornecem aos graduandos uma abordagem tridimensional na qual eles podem visualizar e entender melhor as estruturas orgânicas (Da Silva; Júnior; Pires, 2017). A Química Orgânica (QO) combina muitas transformações químicas as quais os alunos são forçados a memorizar, mas poucos entendem a causa ou os mecanismos das reações químicas. É ainda mais crítico para os estudantes entender a natureza das transformações químicas quando a seletividade das reações químicas é discutida. Os professores explicam a seletividade das reações químicas como o efeito da estabilidade de certos intermediários da reação na formação do produto, embora na maioria das vezes as reações químicas sejam determinadas por qual reação tem a barreira de ativação mais alta. O exercício de construir e enfatizar aos universitários a importância de compreender como se dão as reações não é uma tarefa fácil (Jursic, 1999).

Com o rápido desenvolvimento da ciência e da tecnologia, requisitos interdisciplinares que levam à um letramento científico mais profundo e diverso são indispensáveis. Dito isto, algumas metodologias, como a Química Computacional (QC) e as simulações de dinâmica molecular, foram introduzidos no ensino de química nas universidades, e vários métodos de Química Computacional são amplamente aplicados (Cencer; Suslick; Moore, 2022). A Química Computacional é única porque o estudante que a usa, não está limitado pelos limites da realidade. Essa liberdade tem vantagens e desvantagens, pois não apenas permite que o graduando seja extremamente criativo ao determinar como responder a questões químicas, mas também requer uma compreensão de todas as suposições feitas na análise (que geralmente não são triviais) (Tantillo, 2018).

As aulas práticas de química são úteis para melhorar a aprendizagem pela contextualização dos temas apresentados nas aulas teóricas, que permitem aos alunos adquirir experiência e conhecimentos para desenvolver uma atitude científica. No entanto, as aulas de laboratório geralmente são caras devido aos reagentes, materiais e equipamentos necessários. Nesse cenário, a tecnologia está cada vez mais presente na academia e o ambiente virtual tem se mostrado uma ferramenta valiosa para aumentar o interesse dos alunos pela ciência e facilitar o processo de aprendizagem. Uma aula auxiliada por programas computacionais, desde que seja bem estruturada, é geralmente agradável e atraente e ajuda na compreensão dos conceitos teóricos (Justino; Nascimento; Justino, 2021). A aprendizagem assistida por computador pode ser uma estratégia eficaz para melhorar as aulas clássicas teóricas ou de laboratório em disciplinas de Química. Algumas vantagens têm sido descritas como o baixo custo das simulações computacionais em relação a algumas aulas práticas, a possibilidade de evitar o uso de reagentes, e ainda, pode promover a independência dos alunos e um aprendizado individualizado. Na área de química, muitos estudos têm mostrado as dificuldades dos alunos em correlacionar o conhecimento molecular à sua função e construir representações mentais tridimensionais (Kobayashi *et al.*, 2021). Nesse sentido, o uso de programas computacionais permite uma melhor visualização e compreensão das estruturas, propriedades e interações químicas e torna o aprendizado mais interessante (Ferrel *et al.*, 2019). Portanto, a estratégia do uso de modelagem molecular serve como uma ferramenta para complementar o ensino de química (Abreu *et al.*, 2018).

A Química Computacional tornou-se uma área cada vez mais importante, pois os resultados teóricos têm consistentemente se mostrado úteis para uma gama diversificada de aplicações, como ciência dos materiais (Schleder *et al.*, 2019), espectroscopia (Nogueira, 2022), *design* de medicamentos (Lin; Li; Lin, 2020) e síntese de produtos naturais (Elkin; Newhouse, 2018). Como consequência da rápida expansão dos recursos computacionais nas últimas décadas, os currículos de graduação em química agora ensinam com mais frequência ou pelo menos expõem os alunos à

Química Computacional e suas aplicações. Algumas das disciplinas para enxertar o treinamento nessa área em um currículo de graduação são cursos de Química Geral, Química Orgânica (Albrecht, 2014) e Físico-química (Truhlar *et al.*, 2004; Tran *et al.*, 2020). Assim, aos poucos a presença dos métodos computacionais em todos os campos da química vem acompanhada do desenvolvimento das habilidades necessárias para produzir e interpretar adequadamente os resultados teóricos.

Reforçando o desenvolvimento dessas habilidades, Ellison e Schoolcraft (2007, p. 4) afirmam que:

Como os modelos de química computacional exigem pensamento crítico sobre o sistema que está sendo modelado, o uso de tais modelos no currículo de graduação em química pode ter resultados fortemente positivos. Os exercícios de química computacional podem ajudar os alunos a se concentrarem nos conceitos químicos e na modelagem de sistemas químicos, em vez dos detalhes das operações matemáticas.

Para Duff-Matzner e Pacheco (2012), a geração de estudantes que hoje frequenta a universidade é diferente da geração anterior, pois cresceu com computadores, *videogames* e *internet*. Esses “nativos digitais” nunca experimentaram um mundo sem TICs. Os alunos atuais não têm apenas boas habilidades técnicas nessas tecnologias, mas também formas de aprender e pensar que são radicalmente diferentes das gerações anteriores. Portanto, novos métodos de ensino devem ser considerados, a fim de preencher a lacuna entre os métodos de ensino atuais, de química em particular, e como os novos alunos aprendem.

A incorporação de métodos computacionais será uma característica crítica do ensino de graduação de futuros estudantes de química. O amplo uso dos métodos computacionais pode ser justificado porque aprimora a compreensão dinâmica dos sistemas moleculares. Os cientistas são capazes de desenvolver um nível de perspicácia e intuição que não são facilmente obtidos apenas com experimentos ou equações. É de vital importância que os universitários entendam os métodos fundamentais, aprendam a pensar criticamente sobre aproximações e métodos específicos empregados e desenvolvam a habilidade e o incentivo para avaliar cuidadosamente os resultados obtidos de qualquer cálculo (Wolf *et al.*, 2022).

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Avaliar os estudos que investigaram a correlação entre Química Computacional e o ensino de Química Orgânica através de um levantamento bibliográfico no Portal de Periódicos da Capes no período de 2005 a 2024.

2.2 Objetivos Específicos

- ✓ Realizar uma busca na literatura e obter uma amostra de publicações científicas através da aplicação de critérios de inclusão e exclusão pré-estabelecidos;
- ✓ Revisar as abordagens e ferramentas de Química Computacional utilizadas para o ensino de conceitos de Química Orgânica, bem como sua eficácia pedagógica.
- ✓ Com base na revisão bibliográfica, sugerir recomendações para futuras pesquisas e práticas educacionais que explorem ainda mais a interseção entre as Químicas Orgânica e Computacional.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Quando os alunos se deparam com a Química Orgânica pela primeira vez, a disciplina parece avassaladora, aparentemente uma enorme coleção de fatos não relacionados: reagentes, solventes, temperatura e produtos. Parte da beleza da Química Orgânica provém de padrões e regras os quais podem ser discernidos para ajudar a organizar e generalizar esses fatos. Químicos orgânicos pensam em termos de transformações de grupos funcionais e mecanismos de reação para trazer ordem ao campo, permitindo que os químicos projetem sínteses complexas de novos materiais com grande sucesso.

A Química Orgânica ganhou a reputação de ser um curso difícil, com altas taxas de evasão em algumas universidades (Asmussen; Rodener; Bernholt, 2023; O'Dwyer; Childs, 2017). Devido a estas taxas e ao papel essencial que ela desempenha no currículo de ciências, inúmeras reformas curriculares foram propostas e implementadas em um esforço para melhor apoiar o aprendizado e o sucesso dos alunos (Clauss; Nelson, 2009; Esselman; Hill, 2016; Lafarge; Morge; Méheut, 2014; Provencher *et al.*, 2020).

Ao mesmo tempo, várias pesquisas identificaram tópicos que apresentam aos discentes dificuldades específicas em Química Orgânica. Tais estudos incluíram investigações sobre o uso da notação de seta curva para transmitir o fluxo de elétrons durante processos mecanicistas (Grove; Cooper; Cox, 2012; Grove; Cooper; Rush, 2012), a construção e utilidade percebida de representações estruturais (Cooper; Grove; Underwood, 2010), as características essenciais de ácidos e bases orgânicos (Cartrette; Mayo, 2011; Dood, *et al.*, 2019) e a compreensão significativa dos alunos sobre reações orgânicas (Vachliotis; Salta; Tzougraki, 2013). Embora seja inegável que esses estudos forneçam valor para o praticante, relatos mais holísticos das experiências dos alunos em Química Orgânica também são valiosos (Grove; Bretz, 2012).

O ensino centrado no aluno tornou-se cada vez mais comum nos níveis básico e superior, pois muitos pesquisadores demonstraram sua eficácia nas últimas décadas (Bosco, 2020; De Oliveira *et al.*, 2020). Nesse sentido, Dong, Li e Zhang (2021) estabeleceram um método eficiente de Aprendizagem Baseada em Problemas (ABP), que pode ajudar os graduandos a aprender o conteúdo de Química Orgânica combinando materiais didáticos, literatura experimental e métodos computacionais de maneira autodirigida, sistemática e profunda. Neste trabalho, foram utilizados o método ABP combinado com cálculos DFT (Teoria do Funcional de Densidade) para estudar as reações de alquilação de Friedel-Crafts. A partir dos exemplos, exercícios e discussões realizados os alunos puderam explicar os diversos conceitos químicos envolvidos e foram capazes de prever a seletividade dessas reações. A melhora no desempenho dos estudantes sugere que a Química

Computacional deva ter mais funções nos currículos de graduação para que os alunos possam se tornar totalmente ativos na ABP da química moderna.

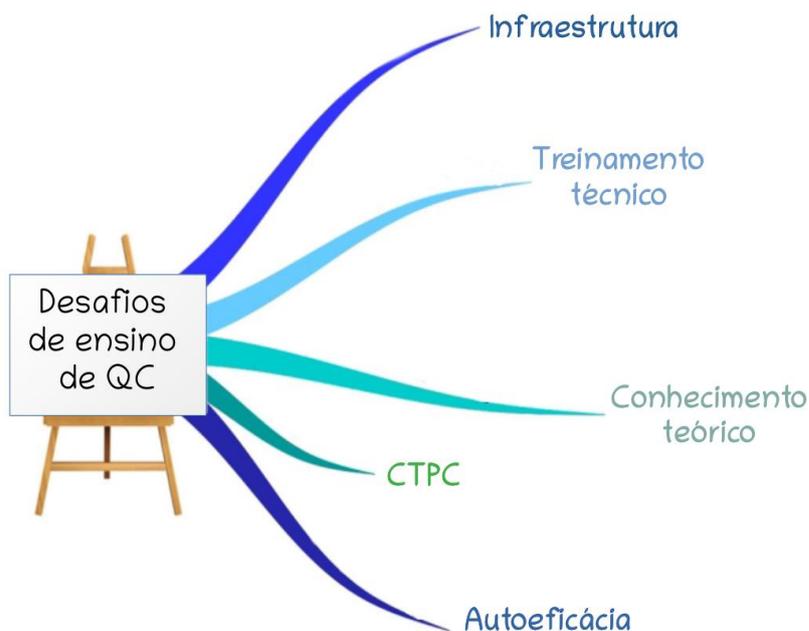
Vários artigos sugerem que a manipulação de modelos computacionais em cursos de laboratório e palestras pode melhorar a compreensão do aluno sobre os conceitos de química (Springer, 2014). Pemberton, Magers e King (2019) envolveram seus alunos num pensamento de alto nível, pois eles sintetizaram resultados através de várias técnicas. Foram utilizadas a análise termogravimétrica (TGA), a espectroscopia de infravermelho por Transformada de Fourier (FTIR) e a Química Computacional em conjunto para avaliar a decomposição térmica do acetato de cálcio monohidrato, $\text{Ca}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$. A análise computacional das frequências vibracionais do carbonato foi realizada para demonstrar os conceitos de frequências vibracionais e prever seus valores principais números, além de auxiliar na identificação do segundo intermediário de decomposição, CaCO_3 . Essa abordagem integrada também incentiva os alunos a apreciar os pontos fortes e fracos de várias técnicas e reconhecer que muitas vezes a análise química requer o uso de várias ferramentas.

Outro estudo também apresentou aos alunos técnicas computacionais e de modelagem, reforçando simultaneamente os seguintes tópicos de aula: (1) a base do pK_a , (2) ressonância, (3) as diferenças entre substituintes equatoriais e axiais em ciclohexanos em conformação de cadeira e (4) os diagramas de coordenadas de reação para reações de substituição e eliminação. Seus autores, Csizmar e colaboradores (2013), justificaram o estudo pela (i) presença crescente da Química Computacional na química moderna e (ii) com base em seus trabalhos anteriores, os alunos geralmente apresentam dificuldade em entender os tópicos examinados em aulas teóricas. Os autores não realizaram uma avaliação formal do impacto do procedimento computacional na aprendizagem dos graduandos, mas as perguntas nas avaliações no final dos cursos demonstraram que os alunos perceberam os exercícios computacionais como benéficos para sua aprendizagem. Além disso, as mesmas avaliações demonstraram que os estudantes tinham uma opinião favorável sobre o software e os cálculos.

Como mostrado nesta revisão, e conforme Esselman *et al.* (2020) e Rowley, Woo e Mosey (2009), a estreita colaboração entre químicos teóricos e experimentais tem desempenhado um papel crucial nos estudos mecanísticos. As abordagens computacionais fornecem previsões quantitativas, verificação, prova de seletividade e mecanismos de reações, além das propriedades. No entanto, a precisão e o tempo dos cálculos depende de muitos fatores, como modelos de reação e a escolha do método e funções de base que oferece a maior eficiência para implementar nas disciplinas de química. Deste modo, a utilização de recursos e metodologias didáticos como a Química Computacional é um passo nessa direção, e pode ajudar os estudantes universitários a superar algumas das barreiras vivenciadas ao estudar Química Orgânica.

Apesar dos benefícios da Química Computacional como ferramenta auxiliar no ensino universitário de Química documentados até então, é preciso estruturar a alfabetização nessa área. Para isto, Tuvi-arad (2021) relata alguns dos principais desafios do ensino e aprendizagem para a integração da Química Computacional nos cursos de graduação, particularmente nas disciplinas cujo foco não seja a própria Química Computacional. A Figura 1 demonstra um esquema resumido desses obstáculos.

Figura 1 – Desafios no ensino e aprendizagem na integração da Química Computacional em cursos de graduação.



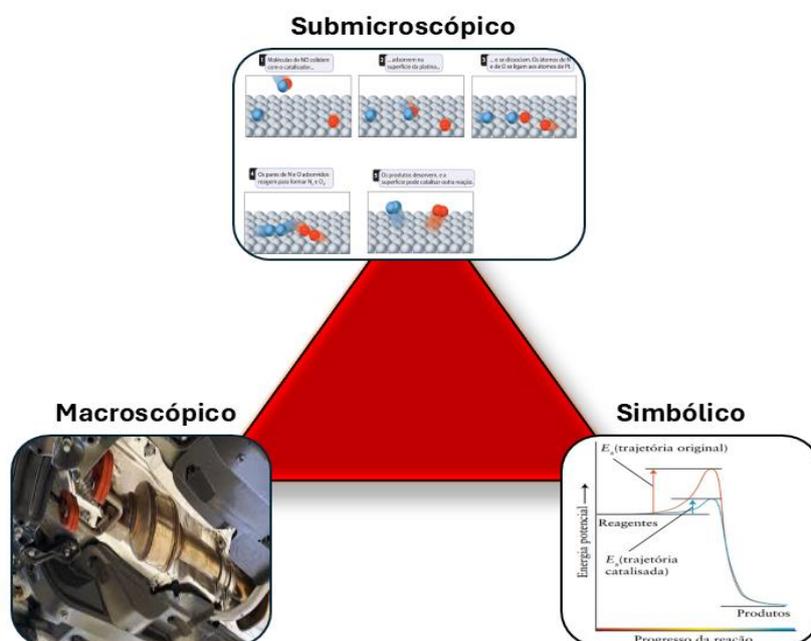
Fonte: Adaptada de Tuvi-Arad (2021).

Segundo Tuvi-arad (2021), a **Infraestrutura** corresponde a disponibilidade do pacotes computacionais, onde muitos estão disponíveis gratuitamente. Contudo, também são necessários computadores com CPUs adequados, pois certos níveis de cálculos exigem mais memória e alta velocidade no processamento dos dados. O **Treinamento técnico** dos estudantes também é um desafio, uma vez que as interfaces do software nem sempre são auto-explicativas, principalmente para usuários novatos. Elas exigem alguma prática para permitir que os usuários trabalhem com eficiência, começando com os comandos necessários para desenhar, girar e excluir uma molécula, passando pelos comandos para definir os cálculos e todo um conjunto de opções que controlam a visualização dos resultados. Outro ponto importante é o **Conhecimento teórico e o limite de tempo de aula**. Antes de executar os cálculos, os alunos devem estar familiarizados com a base teórica em um nível que considere o nível do curso, o objetivo do exercício e o conhecimento prévio dos alunos. Isso pode ser simplificado ou altamente detalhado, mas ainda requer que os professores dediquem tempo de aula, horário que não necessariamente está disponível. A quarta barreira apresentada pela

autora é centrada em três vias, são elas: os **Conhecimentos Tecnológico, Pedagógico e Científico (CTPC)**. A última refere-se ao assunto que deve ser ensinado; o conhecimento pedagógico, às práticas, processos, estratégias, procedimentos e métodos de ensino; o conhecimento tecnológico, à familiaridade com computadores, *internet* e, no caso da Química Computacional, o software específico. Assim, CTPC significa a capacidade dos professores de integrar esses três componentes do conhecimento para promover seus resultados de ensino e a compreensão de que esse conhecimento integrativo é diferente do conhecimento das teorias científicas (Rodríguez-Becerra *et al.*, 2020). A **Autoeficácia** denota as crenças dos professores quanto à sua capacidade de integrar a Química Computacional em seu ensino, principalmente se a mesma não for sua área de especialização. Pesquisas apontam que o ensino com tecnologia em si pode dissuadir os professores devido à falta de autoeficácia (Chai; Koh; Tsai, 2013), mesmo quando as teorias quânticas não estão envolvidas no assunto. Nesse sentido, a autoeficácia não se limita aos professores e geralmente influencia o aprendizado dos alunos (Ferrel; Barbera, 2015; Mataka; Kowalske, 2015).

Estudantes com uma compreensão profunda da química são aqueles com um grande domínio e alta capacidade de conectar três níveis de compreensão: o nível macroscópico, o nível submicroscópico (ou molecular) e o nível simbólico (Johnstone, 1991; Dori; Hameiri, 2003). A Figura 2 demonstra os níveis citados para um conversor catalítico de gás de escapamento de automóvel.

Figura 2 – Modelo de Johnstone para os níveis de representação do conhecimento químico.



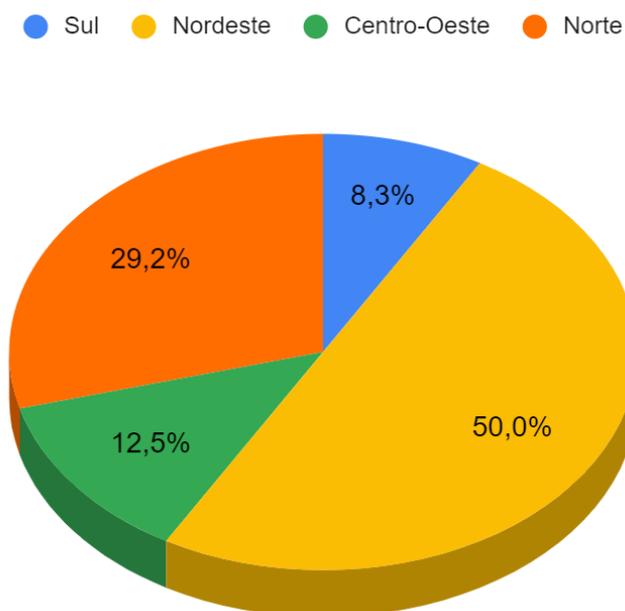
Fonte: Autoria própria.

No entanto, entender conceitos químicos no nível molecular costuma ser desafiador para os alunos, pois eles devem aplicar o pensamento abstrato. Na tentativa de dar suporte a esse desafio, os

professores de química têm usado ferramentas digitais para visualizar estruturas e processos químicos (Bernholt *et al.*, 2019; Dorfman *et al.*, 2019). Simulações, por exemplo, podem servir como uma ferramenta eficaz para visualizar modelos de partículas e estruturas submicroscópicas em 3D, na tentativa de tornar o mundo quântico mais tangível e claro para os alunos entenderem (Pelter *et al.*, 2020; Syarif; Supriatini, 2023). Hati e Bhattacharyya (2016) descreveram o uso de modelagem e simulações computacionais para ensinar os alunos sobre as relações entre estrutura, dinâmica e função de proteínas, como parte de um curso de química biológica. Após o curso, os discentes poderiam contribuir para a comunidade científica publicando artigos em periódicos revisados por pares, o que serve como um exemplo de professores usando seus CTPC para promover habilidades de apresentação de resultados entre os alunos.

Levando em consideração o Brasil, um levantamento de dados sobre como as instituições de ensino superior tratam os componentes curriculares Química Quântica e Química Quântica Computacional (QQC) na matriz dos cursos de licenciatura em Química foi realizado há poucos anos pela doutoranda Hemilly Oliveira Souza. Segundo ela, a análise dos componentes da área de QQC, revelou que, em todo o nosso país, apenas a Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP) campus de Bauru, oferta esse componente como disciplina obrigatória no curso de licenciatura em Química. Em contrapartida, a análise deste mesmo componente sendo ofertado como disciplina eletiva é mais comum. A Figura 3 apresenta a divisão de eletivas dessa disciplina em cada uma das regiões brasileiras. O Nordeste se destaca como a região que mais oferta os componentes da área de QQC de forma eletiva, compreendendo 12 ofertas em um universo de 89 cursos de licenciatura em química. A região Sudeste não aparece na Figura 3 por não oferecer nenhum componente da área de QQC de forma eletiva em seu currículo (Souza, 2021).

Figura 3 – Regiões com a maior oferta de eletivas de QQC nos cursos de licenciatura em Química do Brasil.



Fonte: (Souza, 2021).

Souza (2021) ainda destaca uma análise ao estado da Paraíba, ao qual a autora está inserida. A Paraíba oferta 7 cursos de licenciatura em Química nas instituições de ensino superior públicas e presenciais, destas, apenas a Universidade Federal da Paraíba (UFPB), nos *campus* de Areia e João Pessoa, ofertam disciplinas da área de Química Quântica como componentes curriculares obrigatórios, e dispõe em seu currículo disciplinas eletivas da área de Química Quântica Computacional. No caso da UFPB é de se esperar que os componentes eletivos de QQC sejam ofertados com frequência tendo em vista a presença do Laboratório de Química Quântica Computacional (LQQC) e do Laboratório de Modelagem Molecular de Reações Químicas (LMMRQ). A maneira que estes componentes são estruturados na matriz do curso merece atenção, pois é necessário priorizar a Química Quântica como componente básico, para ofertar a posteriori os componentes de QQC que aplicam os conhecimentos previamente apresentados, sendo assim uma eletiva ofertada com pré-requisitos.

Sob outra perspectiva, os graduandos em Química da UFPB, na capital do estado, passam pela disciplina obrigatória Computação para Química onde são trabalhados o uso de softwares de edição de estruturas e reações químicas, aplicação de planilhas de cálculo numérico e estatístico para o tratamento de dados químicos, utilização de ferramentas gráficas para apresentação de dados, uso de softwares de cálculo diferencial e integral e álgebra linear aplicados a problemas químicos e noções de modelagem molecular. Todas estas atividades práticas fornecem uma base sólida para os usos futuros de ferramentas de informática e da Química Computacional.

4. METODOLOGIA

4.1 Percurso Metodológico

O presente trabalho compreende uma revisão narrativa em que se pauta em publicações amplas, apropriadas para descrever e discutir o desenvolvimento ou o “estado da arte” de um determinado assunto, sob o ponto de vista teórico ou contextual.

As revisões narrativas constituem, basicamente, de análise da literatura publicada em livros, artigos de revista impressas e/ou eletrônicas na interpretação e análise crítica pessoal do autor (Paré *et al.*, 2015). Ademais, ela consiste na compilação de documentos e pesquisas sobre uma temática em diferentes campos do conhecimento, tentando responder aos aspectos e às dimensões que vêm sendo destacados em diferentes lugares e épocas, as formas e as condições que essas produções têm sido produzidas (Brizola; Fantin, 2016).

Este trabalho tem como principal aporte teórico-metodológico a pesquisa qualitativa de caráter bibliográfico proposto por Cervo, Bervian e Da Silva (2006) cujo intuito é identificar o panorama das pesquisas realizadas a respeito de um tema, especificamente, o entrelaçamento entre a Química Computacional e a Química Orgânica relacionadas com o processo de ensino.

Para isso, foram utilizadas quatro expressões de busca: i) “*Ensino de Química Computacional*”; ii) “*Computational Chemistry Teaching*”; iii) “*Ensino de Química Orgânica Computacional*” e iv) “*Computational Organic Chemistry Teaching*”. Os termos em inglês foram empregados para a realização íntegra do processo, permitindo um amplo rastreamento de trabalhos vinculados ao tema. Alguns filtros foram aplicados para a pesquisa: apenas artigos revisados por pares foram considerados, uma vez que a participação de especialistas na revisão dos trabalhos contribui para a qualidade das publicações, beneficiando toda a comunidade acadêmica. O período de busca indexada compreende os últimos 20 anos, tendo em vista que o intuito de identificar os anos de publicação do tema no início do século XXI.

O banco de dados escolhido foi Portal Periódicos Capes, o qual fornece acesso a vários trabalhos com dados abrangentes de citações para muitas disciplinas acadêmicas diferentes. A conexão foi feita através da Comunidade Acadêmica Federada (CAFe), disponibilizada pela UFPB como portal de periódicos de livre acesso.

Os artigos elencados foram analisados quanto ao ano de publicação e quanto à área ou categoria de aporte que a base possui, com a finalidade de verificar desde que ano se aborda o assunto e quais os anos com maior quantidade de publicação; e quanto à área ou categoria, para identificar se o artigo realmente tratava do assunto proposto, visto que algumas publicações podem estar categorizadas em outra área de trabalho como Ciência da Computação, a qual não faz parte do interesse atual.

Após a primeira identificação citada acima, foram selecionados os artigos que apresentassem em seu escopo o tema proposto, no caso, que tivessem uma abordagem vinculada ao ensino e contemplassem os conteúdos de Química Orgânica Computacional. Após essa segunda avaliação, os artigos selecionados foram analisados de acordo com o conteúdo proposto em cada um deles.

Assumiu-se a Análise do Conteúdo proposta por Bardin (2015), considerando as três fases indicadas pela autora: pré-análise; exploração do material; tratamento dos resultados, inferências e interpretação. Na primeira fase, fez-se a organização da análise, em que se pautaria na leitura e interpretação do título, resumo e palavras-chaves. Na segunda, deu-se a execução da leitura, explorando o material a fim de identificar a relação entre o Ensino de Química Orgânica e a Química Computacional presentes no artigo. Por fim, o tratamento dos resultados, as inferências, as interpretações e as considerações que pudemos evidenciar de todo esse processo. Sobre essas três fases, comentaremos na sequência.

4.2 Coleta de dados

A coleta de dados foi realizada durante o período de Agosto a Setembro de 2024. De acordo com o tema estabelecido, foram selecionados artigos publicados de 2005 a 2024, ou seja, adotou-se uma faixa temporal de vinte anos para a elaboração da revisão bibliográfica.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A frase “Se eu vi mais longe, foi por estar de pé sobre os ombros de gigantes.” é uma metáfora famosa declarada por Isaac Newton (1642–1727 d.C.), em sua carta a Robert Hooke, em 1675 (Chen, 2003). Esta declaração é uma comparação a qual descreve o progresso da ciência como “descobrir a verdade com base em descobertas anteriores” (Keith *et al.*, 2016).

Além das contribuições científicas dos indivíduos, essa metáfora anda de mãos dadas com o acúmulo de conhecimento e a prática da revisão de literatura, os quais favorecem uma melhor compreensão da amplitude da pesquisa e do desenvolvimento de um campo científico. Nesse contexto, conduzir uma revisão de literatura busca ilustrar o corpo de conhecimento sobre um tópico usando a literatura existente, que contribui para o campo elucidando novas perspectivas e alterando/adicionando conceitos. Uma revisão de literatura pode ser realizada para vários propósitos, como elaborar o contexto teórico de um trabalho de pesquisa e um estudo empírico — equivalentemente conhecido como estudo primário; no entanto, de uma perspectiva mais ampla, uma revisão de literatura se refere a uma contribuição de pesquisa distinta, comumente conhecida como estudo secundário, o qual visa revisar e sintetizar as informações acumuladas de estudos primários relacionados a uma questão de pesquisa específica (Azarian *et al.* 2023).

Para fornecer à comunidade acadêmica descobertas válidas e confiáveis, conduzir um estudo abrangente da literatura na ausência de interpretações tendenciosas e síntese de informações é um fator significativo.

O acúmulo de conhecimento é uma condição essencial para que um campo “seja científico” e se desenvolva. Mais precisamente, conduzir revisões de literatura eficazes é essencial para avançar o conhecimento e entender a amplitude da pesquisa sobre um tópico de interesse, sintetizar a evidência empírica, desenvolver teorias ou fornecer um contexto conceitual para pesquisas subsequentes e identificar os tópicos ou domínios de pesquisa que requerem mais investigação. As revisões de literatura também são valiosas como um meio de se orientar em um domínio emergente e como um auxílio no ensino (Paré *et al.*, 2015). Em resumo, pode-se citar diversos benefícios da revisão da literatura, segundo Brizola e Fantin (2016):

- ✓ Delimitar o problema da pesquisa;
- ✓ Auxiliar na busca de novas linhas de investigação para o problema que o pesquisador pretende investigar;
- ✓ Evitar abordagens infrutíferas, ou seja, através da revisão da literatura o pesquisador pode procurar caminhos nunca percorridos;
- ✓ Identificar trabalhos já realizados, já escritos e partir para outra abordagem;

- ✓ Evitar que o pesquisador faça mais do mesmo, que diga o que já foi dito, tornando a sua pesquisa irrelevante.

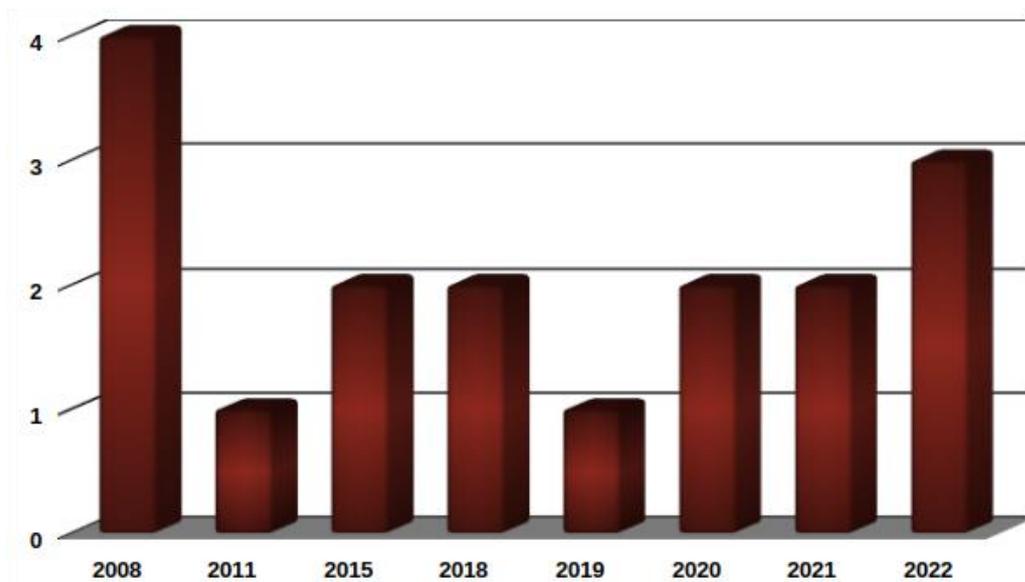
Dando início ao panorama da literatura, a pesquisa documental com o descritor “*Ensino de Química Orgânica Computacional*” e “*Computational Organic Chemistry Teaching*” obteve 1 e 83 artigos, respectivamente, valores significativamente menores do que com uso dos descritores originais. Além disso, as consultas em inglês resultaram nos mesmos artigos, logo, apenas o levantamento sem o termo “*Orgânica*” (“*Organic*”) foi relevante e considerado.

Já a procura por “*Ensino de Química Orgânica Computacional*” indicou um manuscrito que relata uma investigação sobre o ensino de Química Orgânica cujo estudo foi feito de maneira comparativa sobre qual recurso pedagógico seria mais efetivo para aprendizagem significativa dos alunos: quatro turmas do 3º ano do Ensino Médio foram divididas em grupos, onde uma delas foi inserida em suas aulas a experimentação, outra a simulação computacional (softwares educativos), uma turma teve acesso a ambos os recursos e a última turma teve suas aulas sem o uso de tais recursos (Santos Junior *et al.*, 2021). Ambas os recursos são fundamentais para a promoção da aprendizagem significativa, entretanto, o presente trabalho foge do escopo da Química Computacional. Sendo, portanto, descartado para avaliação.

5.1 Resultados da busca em Português

Como resultado inicial da busca realizada com a expressão “*Ensino de Química Computacional*”, foram encontradas um total de 17 publicações. O artigo mais antigo foi publicado em 2008 e o mais recente há dois anos, como mostrado na Figura 4. As seguintes categorias foram: Ciências Humanas (13), Ciências Exatas e da Terra (5), Ciências Biológicas (3), Ciências Sociais Aplicadas (2). Nota-se que as áreas de Ciências Humanas são predominantes quando se trata de pesquisas voltadas ao Ensino de Química por meio de metodologias de Química Computacional. Ademais, há uma escassez de trabalhos revisados por pares voltados a temática estudada, visto que apenas 17 artigos foram obtidos com a busca utilizando o presente descritor.

Figura 4 – Total de artigos publicados por ano resultantes da busca com o descritor “*Ensino de Química Computacional*”.

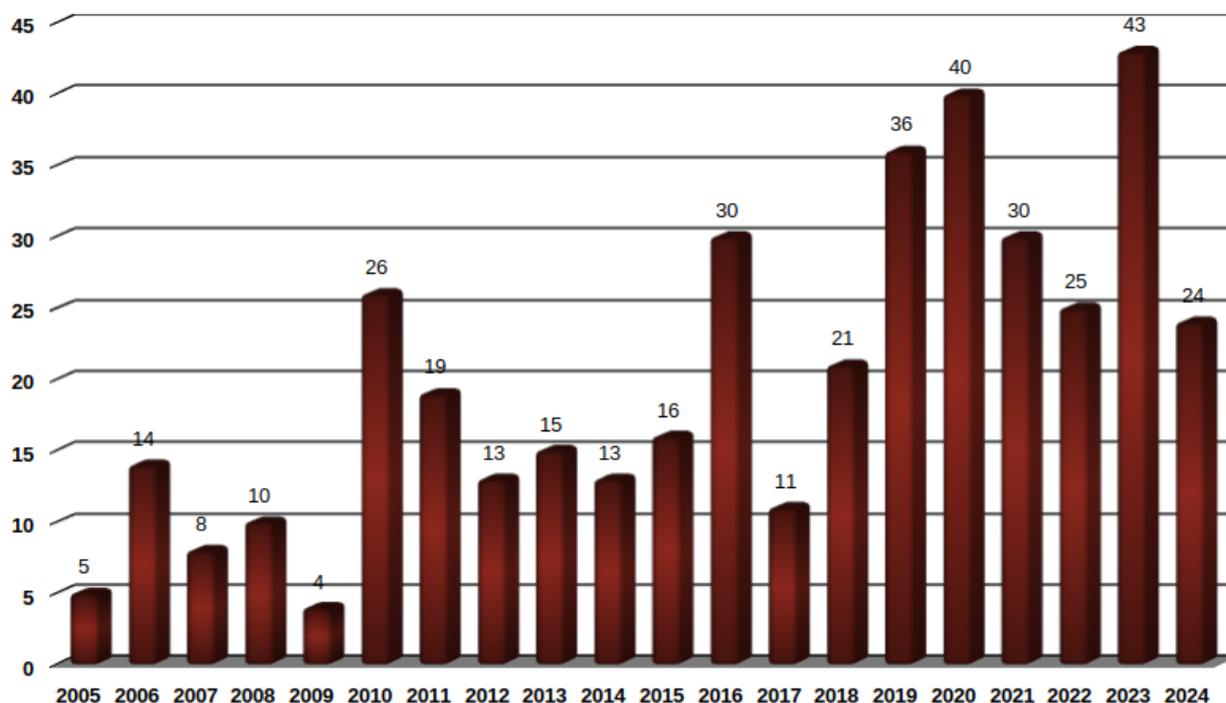


Fonte: Autoria própria.

5.2 Resultados da busca em Inglês

A busca em inglês nos Portal de Periódicos da Capes forneceu uma quantidade maior e mais diversificada de artigos, tendo em vista que o algoritmo de pesquisa da base de dados alcança muitas outras revistas internacionais. A Figura 5 aponta o número de artigos publicados por ano, excluindo-se os artigos de revisão, no período avaliado. Foram obtidas 405 publicações, destas, observa-se que nos primeiros dez anos de análise (2005-2014) menos estudos (127) foram divulgados pela comunidade acadêmica aliando o Ensino de Química a Química Computacional. Este tema tem sido mais explorado mais recentemente, porém pesquisas vêm sendo realizadas desde que a Química Computacional foi se estabelecendo nos departamentos de graduação e se infiltrando nas pesquisas em Ensino de Ciências.

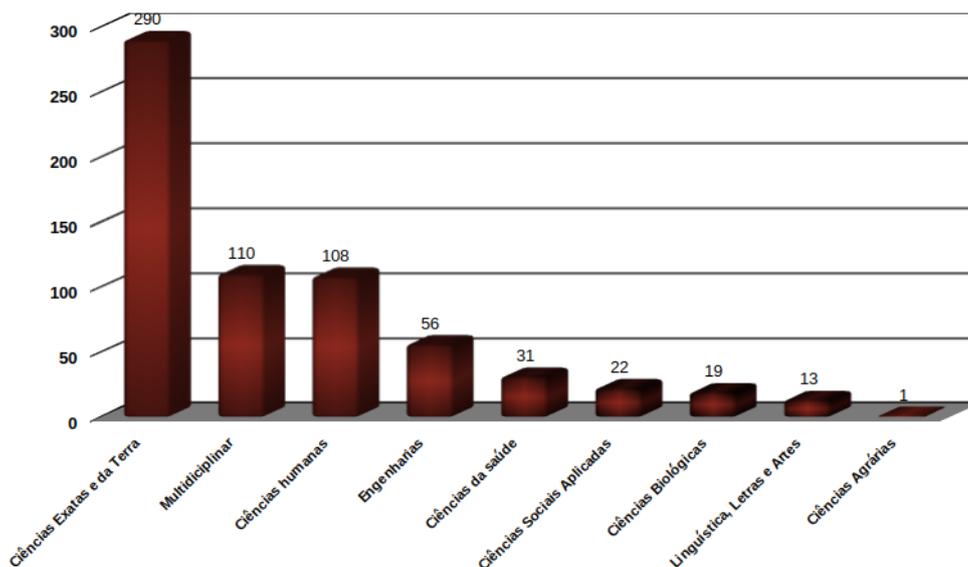
Figura 5 – Total de artigos publicados por ano resultantes da busca com o descritor “*Computational Chemistry Teaching*”.



Fonte: Autoria própria.

A Figura 6 organiza as categorias detectadas. O maior número de artigos indexados pertence a área de Ciências Exatas e da Terra, o que reflete uma ampla participação de profissionais das Ciências da Computação, Química Computacional, Modelagem Molecular, Quimioinformática e pesquisadores interessados em TDICs. Observa-se que a adição das quantidades expostas na Figura 6 ultrapassa 405 trabalhos, pois um mesmo artigo pode possuir mais de uma área de classificação, segundo a base de dados utilizada.

Figura 6 – Número de trabalhos fornecidos por categoria pelo Portal de Periódicos da Capes.



Fonte: Autoria própria.

Como citado, a busca com “*Ensino de Química Computacional*” levou a 17 resultados, enquanto sua tradução “*Computational Chemistry Teaching*”, levou a 405 objetos para análise. Notou-se que nem todos os 17 resultados encontrados convergiam com os 405, pois a pesquisa em português abrange, em sua maioria, jornais acadêmicos nacionais.

Durante a primeira e a segunda fases, indicada por Bardin (2015), verificou-se que diversos deles não eram relevantes para nossas pretensões, por exemplo: estudos apenas de Bioinformática, uma vez que a intenção era analisar resultados de pesquisa publicados nos artigos dentro do âmbito da Química Computacional relacionada ao ensino de compostos orgânicos.

Dentre os 422 artigos que estão quantificados nas Figuras 4 e 5, reiniciamos os procedimentos indicados por Bardin (2015), retomando todas as três fases novamente, considerando agora esse novo corpus analítico. Ou seja, os 422 trabalhos pré-selecionados foram avaliados quanto ao seu título, resumo e palavras-chave, para verificar se realmente contemplavam os parâmetros propostos para o levantamento que objetivamos realizar, fato que nos levou a apenas 24 artigos (destes, 2 foram resultados da busca em português). Os demais foram desconsiderados, pois suas tratativas não compunham o escopo da pesquisa – Ensino de Química Orgânica por meio da Química Computacional.

O Quadro 1 traz os símbolos dados a cada artigo, numerados de acordo com a data de publicação e resultantes da busca em inglês (AI) ou português (AP). Nas colunas seguintes organizamos informações quanto à autoria, título, periódico, ano de publicação e conteúdos de Química Orgânica empregados nos trabalhos. Após o Quadro 1, inserimos algumas descrições relativas ao teor do que foi apresentado pelos autores dos artigos e acrescentamos críticas e inferências importantes a respeito dos processos de ensino adotados em cada um deles.

Quadro 1 – Artigos estudados e seus conteúdos de Química Orgânica trabalhados.

Símbolo	Público-alvo*	Conteúdos de QO abordados	Referência
AP-1	EET	Isomeria cis-trans.	RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química. Revista Liberato , v. 9, n. 12, p. 13–22, 2008.
AP-2	PEB	Isomeria geométrica.	PAULETTI, F.; CATELLI, F. Um estudo de caso: programas computacionais mediando o ensino de isomeria geométrica. Revista Brasileira de Ensino de Ciências e Tecnologia , v. 11, n. 1, p. 250–269, 2018.
AI-1	EG	RMN; Análise conformacional; Coordenadas de reação, incluindo otimização de reagentes, produtos e estado de transição.	O'MALLEY, P. J. A resource for introducing molecular modelling into the undergraduate chemistry curriculum. New Directions in the Teaching of Natural Sciences , n. 2, p. 45–46, 2006.
AI-2	EGePG	Análise conformacional.	ARROIO, A.; HONORIO, K. M.; WEBER, K. C.; HOMEM-DE-MELLO, P.; DA SILVA, A. B. F. O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. Química Nova , v. 28, n. 2, p. 360–363, 2005.
AI-3	EGePG	Reações de adição eletrofílica a alcenos; Regra de Markovnikov; Análise conformacional; Cinética química; Termodinâmica; Regiosseletividade.	MARIANO, A.; VENTURA, E.; DO MONTE, S. A.; BRAGA, C. F.; CARVALHO, A. B.; ARAÚJO, R. C. M. U. O.; DE SANTANA, O. L. Ensino de Reações Orgânicas usando Química Computacional: I. Reações de Adição Eletrofílica a Alquenos. Química Nova , v. 31, n. 5, p. 1243–1249, 2008.
AI-4	EG	Estrutura, estereoquímica e estabilidade de proteínas.	ELMORE, D. E.; GUAYASAMIN, R. C.; KIEFFER, M. E. A Series of Molecular Dynamics and Homology Modeling Computer Labs for an Undergraduate Molecular Modeling Course. Biochemistry and Molecular Biology Education , v. 38, n. 4, p. 216–223, 2010.
AI-5	EG	Estereoquímica; Ângulos e distâncias de ligação.	COLEMAN, W. F. Comparing Solid, Gas Phase, and Solution Structures Using the Cambridge Structural Database. Journal of Chemical Education , v. 87, n. 8, 2010.
AI-6	EG	Estereoquímica; Termodinâmica.	SUTCH, B. T.; ROMERO, R. M.; NEAMATI, N.; HAWORTH, I. S. Integrated Teaching of Structure-Based Drug Design and Biopharmaceutics: A Computer-Based Approach. Journal of Chemical Education , v. 89, p. 45–51, 2012.

*O público-alvo de trabalho segue os seguintes códigos: EET: Estudantes do Ensino Técnico; EG: Estudantes de Graduação; PEB: Professores do Ensino Básico; EGePG: Estudantes de Graduação e Pós-Graduação; EPG: Estudantes de Pós-Graduação; PEG: Professores e Estudantes de Graduação.

Continuação do Quadro 1:

Símbolo	Público-alvo*	Conteúdos de QO abordados	Referência
AI-7	Não houve	Reações de substituições nucleofílica e eletrofílica; Reatividade química; Termodinâmica.	LÓPEZ-AGUDELO, V. A.; BARRAGÁN, D.; PARRA, W. Un método para enseñar el porqué suceden las reacciones químicas. Química Nova , v. 36, n. 1, p. 177–180, 2013.
AI-8	EPG	Ácidos moles e duros; Orbitais de Fronteira.	VASCONCELLOS, M. L. A. A. A Teoria de Pearson para a disciplina de química orgânica: um exercício prático e teórico aplicado em sala de aula. Química Nova , v. 37, n. 1, p. 171–175, 2014.
AI-9	EG	Estereoquímica; Espectroscopia de RMN; Análise conformacional; Epoxidação.	HII, K. K.; RZEPA, H. S.; SMITH, E. H. Asymmetric Epoxidation: A Twinned Laboratory and Molecular Modeling Experiment for Upper-Level Organic Chemistry Students. Journal of Chemical Education , v. 92, p. 1385–1389, 2015.
AI-10	Não houve	Estrutura tridimensional e Mecanismos de reações orgânicas.	JWANG, J. Research on Application to College Study in Organic Chemistry Teaching based on Computer Software. MATEC Web of Conferences , v. 44, 2016.
AI-11	EG	Reação de Diels-Alder; Regiosseletividade; Estereoquímica; Orbitais moleculares.	JUNG, J. ZIRPOLI, S.; SLICK, G. Implementation of Computational Aids in Diels-Alder Reactions: Regioselectivity and Stereochemistry of Adduct Formation. Journal of Computational Science Education , v. 8, p. 2153–4136, 2017.
AI-12	EG	Análise conformacional; Superfície de energia potencial (Termodinâmica); Isomeria e equilíbrio químico; Acidez e basicidade.	ZDANOVSKAIA, M. A.; SCHWARZ, C. E.; HABIB, A. D.; HILL, N. J.; ESSELMAN, B. J. Access to Computational Chemistry for Community Colleges via WebMO. Journal of Chemical Education , v. 95, p. 1960–1965, 2018.
AI-13	EG	Análise conformacional de alcanos.	WINFIELD, L. L.; MCCORMACK, K.; SHAW, T. Using iSpartan To Support a Student-Centered Activity on Alkane Conformations. Journal of Chemical Education , v. 96, p. 89–92, 2019.
AI-14	EG	Estereoquímica; Termodinâmica.	TANTILLO, D. J.; SIEGEL, J. B.; SAUNDERS, C. M.; PALAZZO, T. A.; PAINTER, P. P.; O'BRIEN, T. E.; NUÑEZ, N. N.; NOURI, D. H.; LODIEWYK, M. W.; HUDSON, B. M.; HARE, S. R.; DAVIS, R. L. Computer-Aided Drug Design for Undergraduates. Journal of Chemical Education , v. 96, p. 920–925, 2019.

*O público-alvo de trabalho segue os seguintes códigos: EET: Estudantes do Ensino Técnico; EG: Estudantes de Graduação; PEB: Professores do Ensino Básico; EGePG: Estudantes de Graduação e Pós-Graduação; EPG: Estudantes de Pós-Graduação; PEG: Professores e Estudantes de Graduação.

Continuação do Quadro 1:

Símbolo	Público-alvo	Conteúdos de QO abordados	Referência
AI-15	PEG	Desenho e visualização de estruturas orgânicas.	YULIYANTO, E.; HIDAYAH, F. F.; ISTYASTONO, E. P.; WIJOYO, Y.; HARTAYU, T. S. Preparation of Reflective Pedagogy Paradigm Learning For The Lecturers based on Computational Chemistry. Unnes Science Education Journal , v. 8, n. 2, 2019.
AI-16	EG	Visualização de proteínas.	ABDEL-HALIM, H. Distant learning challenges and solutions: Incorporation of 3D protein visualisation in an undergraduate pharmacy medicinal chemistry course. Pharmacy Education , v. 20, p. 17–18, 2020.
AI-17	EG	Mecanismos de reação; Alquilação de Friedel-Crafts; Coordenada de reação; Termodinâmica; Cinética química.	DONG LI-KAN; LI, ZI-HAO; ZHANG, SHU-YU. Using Computational Chemistry to Improve Students' Multidimensional Understanding of Complex Electrophilic Aromatic Substitution Reactions: Further Analysis of the Solvent Effect, Temperature Influence, and Kinetic Behaviors. Journal of Chemical Education , v. 98, p. 3226–3236, 2021.
AI-18	Não houve	Não houve, pois apresenta a ferramenta computacional, suas funcionalidades e aplicações pedagógicas.	POLIK, W. F. ;SCHMID, J. R. WebMO: Web-based computational chemistry calculations in education and research. WIREs Computational Molecular Science , v. 12, 2021.
AI-19	PEB	Visualização de estruturas orgânicas; Isomeria; Análise conformacional; Interações intermoleculares.	TRAUBE, T.; BLONDER, R. A Computational Chemistry Course for Teachers: From Research Laboratories to High-School Chemistry Teaching. Journal of Chemical Education , v. 100, p. 4360–4368, 2023.
AI-20	EG	Estereoquímica; Interações intermoleculares; Termodinâmica.	HUANG, M.; DU, Y.; LIU, Y.; ZHAO, Y.; GUO, Y.; LIU D.; ZHAO, L.; WANG, J. Computer-aided drug design course for pharmacy major students in Shenyang Pharmaceutical University following the COVID-19 pandemic: Challenges and opportunities. Biochemistry and Molecular Biology Education , v. 51, p. 691–699, 2023.
AI-21	EG	Estereoquímica; Interações intermoleculares; Termodinâmica.	DA SILVA, R. V. A.; MONTEIRO, L. M.; BRANCO, CHLGT.; GUILHON-SIMPLICIO, F. Planejamento de Fármacos contra COVID-19: Uma Experiência de Ensino Remoto de Química Farmacêutica. Química Nova , v. 46, n. 4, p. 381–389, 2023.
AI-22	EG	Interações moleculares; Fundamentos de reações químicas.	KUROKI, N.; MOCHIZUKI, Y.; MORI, H. Practical Computational Chemistry Course for a Comprehensive Understanding of Organic, Inorganic, and Physical Chemistry: From Molecular Interactions to Chemical Reactions. Journal of Chemical Education , v. 100, p. 647–654, 2023.

Fonte: Autoria própria.

AP-1

Neste caso particular, houve a discussão do uso do referencial vygotskyano para compreender como se processa o aprendizado de conceitos e representações químicas com o uso da mesma. Os estudantes foram apresentados a softwares de Química Computacional e atividades foram desenvolvidas. Os resultados preliminares indicam que existem ganhos definitivos em aprendizagem, os quais ocorrem devido à formação de uma díade entre o computador e o aluno e da eventual criação de uma Zona de Desenvolvimento Proximal vygotskyana cujo âmbito 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 discente seja capaz de resolver situações-problemas. Os autores encorajam o uso crescente (desde que feito com os devidos cuidados pedagógicos) destes softwares em sala de aula, não apenas pelo seu impacto no aprendizado de conceitos e representações químicas, mas também pela eficiência da ferramenta como preparação do estudante para um futuro profissional onde a Química Computacional estará cada vez mais presente.

AP-2

Aqui foram investigadas as possibilidades de uso dos programas de simulação computacional no Ensino de Química, especificamente a isomeria geométrica. O estudo foi constituído a partir de uma pesquisa bibliográfica e de um estudo de caso numa escola pública, na qual foram realizadas entrevistas semiestruturadas com três professores de Química. A metodologia empregada foi a Análise Textual Discursiva. Os resultados mostraram que o ensino de isomeria geométrica pode ser potencializado com o uso de aplicativos computacionais, numa dimensão em que os níveis de representação macroscópico, molecular e simbólico são explorados a partir da multiplicidade de simulações suscitadas nesses aplicativos. Embora os aplicativos computacionais ofereçam grande margem de interação e sejam bem aceitos pelos estudantes, ainda são ferramentas praticamente inexploradas na escola. Pois na escola visitada há recursos que permitem o estudo do conteúdo citado, porém o ensino desse conteúdo não se concretiza, nem com a tecnologia digital e nem sem ela. Segundo os entrevistados a razão principal é a “falta de tempo” e o desconhecimento dos programas computacionais.

AI-1

Este trabalho se deu como resultado da experiência no desenvolvimento de um curso incluindo palestras com os princípios da Química Teórica Computacional, com ênfase em sessões práticas usando um software de Química Computacional. Embora os aspectos teóricos fundamentais tenham sido introduzidos, reconheceu-se que a ênfase excessiva e a confiança na compreensão teórica podem desencorajar muitos alunos. A abordagem tratou a modelagem molecular de forma semelhante à interpretação espectroscópica, onde uma interpretação de um espectro de Ressonância

Magnética Nuclear (RMN) nem sempre requer uma apreciação profunda da teoria de base de RMN. Apesar da existência de vários livros didáticos sobre química teórica, há poucos que ensinam modelagem molecular direcionada especificamente ao nível de graduação. Portanto, é benéfico ter um recurso que introduza o contexto dos princípios envolvidos, acompanhado de uma série de exercícios práticos. De forma mais detalhada, o percurso metodológico ocorreu para uma turma de estudantes de graduação. Com base nos questionários preenchidos pelos alunos, a grande maioria deles considerou o recurso de uso significativo e aumentou muito sua apreciação da modelagem molecular. A disponibilidade de atividades práticas paralelas ao material de aula ajudou os estudantes a apreciar as aplicações da técnica a problemas reais, como a análise de densidades eletrônicas e mapas de potencial eletrostático de compostos orgânicos. Muitos alunos também aproveitaram a oportunidade de usar o software *Gaussian* para explorar alguns dos aspectos mais avançados do programa de forma independente.

AI-2

Aqui a problematização desenvolvida foi o planejamento de fármacos. A metodologia foi efetuada por trabalhos em grupo envolvendo estudantes de graduação e pós-graduação em turmas diferentes. Explanaram-se conteúdos clássicos da Mecânica Quântica e o uso de programas de Química Computacional. Os alunos efetuaram, então, cálculos de propriedades eletrônicas e estruturais e responderam atividades. A seguir, os estudantes foram incentivados a procurar na literatura alguns fármacos, suas aplicações e, o possível receptor biológico. A possibilidade de estudo de cada sistema foi avaliada em conjunto com o professor, permitindo uma maior discussão das possibilidades computacionais de cálculo e da busca de relações entre as propriedades físico-químicas, estruturais e eletrônicas dos compostos estudados e suas atividades biológicas. Embora com enfoque em aulas de Química Quântica, o estudo de caso apresentado destacou, em todas as etapas, a importância da análise conformacional quando não se dispõe de dados experimentais (cristalográficos) das moléculas estudadas. Todos os participantes tiveram a oportunidade de ver como essas ferramentas são utilizadas na pesquisa científica e na resolução de problemas da indústria farmacêutica. Os alunos de pós-graduação, além disso, foram motivados a aplicarem os conhecimentos adquiridos no desenvolvimento de suas teses, integrando seus resultados experimentais com os teóricos.

AI-3

O ensino é um processo dinâmico que exige envolvimento e constante reflexão sobre as várias etapas do processo, algumas vezes se fazem necessárias mudanças de paradigmas para que se possam conduzir práticas docentes que promovam uma aprendizagem mais eficiente pelos alunos. Este processo de construção pode ser feito por uma via dupla, aliando teorias a ferramentas computacionais. Desta forma, há uma fundamentação capaz de permitir a compreensão de um fenômeno (teoria) e um instrumento (computador) facilitando esta compreensão, sem desprezar a

relevância do professor como mediador do processo. O desafio deste trabalho constituiu em mostrar que é possível utilizar um método de estrutura eletrônica simples (Hartree-Fock) com uma base mínima (STO-3G), na construção de um modelo que sirva como ferramenta para auxiliar no entendimento de alguns conceitos fundamentais relacionados aos mecanismos de reações. Por se tratar de um modelo matemático, ou seja, de uma representação simplificada da realidade, tudo o que se espera é descrever corretamente, ao menos qualitativamente, algum aspecto de interesse particular do problema sob estudo, de modo semelhante ao que é feito em outros trabalhos na área de educação. A atividade foi desenvolvida com alunos de graduação e pós-graduação com a proposta de revisitar qualitativamente conceitos fundamentais que controlam uma reação química, tendo como ferramentas um computador, algumas implementações recentes em química quântica e uma interface gráfica. O principal desafio do trabalho foi sistematizar um procedimento que auxiliasse o professor no ensino dos mecanismos de reação. Esse procedimento, embora simplificado, ao considerar que a reação ocorre em fase gasosa e via um mecanismo bimolecular (concertado), foi suficiente para obter algumas informações importantes descritas nos livros-texto de Química Orgânica e que algumas vezes são bastante abstratas para o estudante de química. Por exemplo, considerando a reação de adição a alquenos não-conjugados foi possível verificar a observância à regra de Markovnikov e fundamentá-la em termos do controle reacional e aspectos regioseletivos.

AI-4

Aqui, um conjunto de exercícios computacionais foi projetado para dar aos alunos de graduação uma introdução prática a pacotes de software de pesquisa para simulações de dinâmica molecular e modelagem por homologia. Se tratando um estudo mais voltado para a Biologia Computacional/Bioquímica, é evidente que muitos conteúdos da Química Orgânica foram trabalhados (veja Quadro 1) durante o desenvolvimento do presente trabalho. As atividades podem ser reproduzidas como parte de um curso maior sobre modelagem molecular ou outros tópicos bioquímicos, inclusive em cursos de Química Orgânica e são pedagogicamente úteis. O uso de um software disponível gratuitamente e computadores comuns torna viável empregar esses exercícios em ambientes com baixos recursos computacionais. As atividades também podem ser adaptadas de maneira direta a outros programas computacionais. Tudo isto torna esta série de atividades computacionais útil em uma variedade de contextos educacionais. Os alunos responderam positivamente às atividades de laboratório de informática. Ao final do curso, expressaram que, embora tivessem muito pouca familiaridade com o uso de programas de modelagem computacional antes do curso, eles se tornaram bastante confortáveis trabalhando com softwares de dinâmica molecular e modelagem por homologia. Além disso, eles sentiram que se tornaram mais confortáveis aprendendo novos programas de modelagem computacional por conta própria e

trabalhando com sistemas baseados em Unix/Linux. Por último, apesar dos resultados gratificantes, seria muito apropriado considerar uma avaliação mais completa das atividades de laboratório computacional que investigue como elas afetam a compreensão conceitual dos alunos sobre conceitos químicos e bioquímicos fundamentais. Esse tipo de avaliação adicional pode ser particularmente interessante, pois, até onde sabemos, há relativamente poucos dados sobre como cursos focados especificamente em modelagem molecular impactam o desenvolvimento conceitual nas ciências.

AI-5

Pouquíssimos detalhes foram dados neste trabalho. O autor trabalhou com alguns estudantes universitários utilizando modelos moleculares da cafeína e ciclopentano do *Cambridge Structural Database*. Alguns módulos de ensino associados ao tema foram discutidos. O conjunto de ensino do banco de dados *on-line* possui uma enorme número de estruturas tridimensionais interativas e facilmente acessíveis disponíveis para uso no ensino de química. O autor sugere um conjunto de exercícios (otimização de geometria, frequência vibracional usando DFT e HF, com e sem efeito do solvente) e a comparação das estruturas cristalinas das moléculas estudadas com aquelas na fase gasosa e em solução. Isto permite que os alunos explorem os efeitos das forças intermoleculares e testem uma série de modelos de estrutura molecular (Teoria de RPECV).

AI-6

Este trabalho empregou uma abordagem educacional usando um estudo de caso, no qual os alunos de graduação estudaram e praticaram o planejamento racional de fármacos. Um medicamento em potencial foi simulado por meio do uso de diversos software, a maioria deles disponíveis na *Web* e gratuitamente. A integração do *docking* molecular e a avaliação de propriedades biofarmacêuticas (aquelas voltadas principalmente para a absorção) são o foco principal deste artigo. O curso foi organizado sistematicamente e desenvolvido através de uma série de atividades teóricas e práticas. A escolha de um determinado complexo proteína-ligante pode ser feita de forma que os princípios-chave possam ser ilustrados por meio do procedimento de *design* (planejamento) e avaliação biofarmacêutica. Além disso, o uso de uma molécula específica permite que outros princípios relacionados à estrutura sejam discutidos. Ao final do curso, os fundamentos importantes do planejamento racional de fármacos tornam-se mais claros e talvez de mais interesse para o estudante, porque ele se familiarizou com a proteína e o inibidor. Claramente, essas oportunidades de ensino variam de complexo para complexo, mas uma apresentação prévia interessante deve ser possível para cada complexo. Todas as abordagens descritas neste artigo podem ser aplicadas em muitos contextos de ensino, que compreendem desde Química Medicinal, Química Farmacêutica, Bioquímica, Bioinformática, e muitas outras, inclusive, nos cursos de Química Orgânica. Nestes, porém, com ressalvas: i) o aporte metodológico completo do curso envolve muitas horas de

trabalho com pequenos grupos de graduandos assessorados por um professor/monitor; ii) é necessário que os ministrantes tenham familiaridade com biologia celular, fisiologia, formulação pré-clínica e físico-química orgânica; iii) todas as aulas teóricas e muitos exercícios práticos do curso podem ser desenvolvidos de forma remota, considerando que as práticas fazem uso de programas *on-line* e gratuitos, entretanto, isso exige maior compreensão técnica e mais tempo para a interpretação adequada dos resultados. Por fim, o planejamento de fármacos baseado em estrutura só é compreendido adequadamente quando há o uso de abordagens técnicas e pedagógicas perfeitamente integradas.

AI-7

O presente artigo não foi aplicado para estudantes, ao contrário da maioria dos trabalhos disponíveis na literatura. Contudo, o procedimento computacional de ensino usando um software *open source* foi produzido para explicar por que as reações químicas ocorrem, baseadas na função de estado $\Delta G^{\circ}_{\text{reação}}$, para um conjunto de oito reações orgânicas de substituições nucleofílicas e eletrofílicas. Este trabalho pode ser incrementado de forma contextualizada no ensino de conteúdos como reatividade química, reações de substituição e termodinâmica em disciplinas de Química Básica e Química Orgânica, numa perspectiva em que procura esclarecer com argumentos simples a diferença entre como e por que as reações químicas ocorrem. Os professores estão sempre em busca contínua de estratégias que motivem os alunos a se interessarem por estudar e aprender química, e os computadores oferecem a oportunidade de ter um laboratório virtual para desenvolver a criatividade e novas ideias no complexo processo de ensino e aprendizagem de ciências (Aksela, 2011; Molina; Carriazo; Farías, 2011; Tüysüz, 2010).

AI-8

Este artigo apresentou o percurso metodológico e os resultados de um experimento computacional para o ensino da Teoria de Pearson nas disciplinas de Química Orgânica avançadas, cujos conceitos de ácidos e bases moles e duros foram desenvolvidos. O trabalho teve a participação de pós-graduandos e pode ser feito estimulando os alunos ao cálculo computacional dos orbitais de fronteira HOMO e LUMO e, conseqüentemente, dos valores de dureza e moleza. Métodos semi-empíricos se mostram rápidos e acessíveis para fornecer dados numéricos suficientemente adequados para aulas de curta duração. Todos os aspectos foram aplicados em sala mediante a aplicação de exercício. Percebeu-se a fascinação dos estudantes por conseguirem se inserir ativamente na construção do conhecimento sobre o tema, concluindo lentamente aspectos do tema em pauta e fortalecendo seus conceitos, bem diferente da abordagem clássica atual, que é somente expositiva.

AI-9

Os autores criaram e aplicaram atividades práticas, partindo de aulas introdutórias sobre modelagem e edição estruturais e minimização de energia, para o estudo de reações de epoxidação de alcenos. Porém, elas são apropriadas para estudantes de nível avançado, normalmente em seus últimos de graduação e já tendo alguma experiência em modelagem de nível introdutório e no uso de programas de esboço molecular. Ao contrário de um laboratório experimental, o qual a segurança é imprescindível, uma versão *in silico* não apresenta essa preocupação e pode ter um efeito libertador nos alunos, uma vez que com as mensagens de erro fornecidas pelo computador eles passam a "apreciar as habilidades que se tem que aprender para rastreá-los". Também pode ser uma grande revelação para os estudantes descobrirem a disparidade nos valores relatados na literatura de propriedades como a rotação óptica de um dado composto e a tentação de aceitar o primeiro valor obtido ou mesmo citar seletivamente aquele resultado que melhor concorda com seus cálculos.

AI-10

Este trabalho relata dificuldades no ensino de Química Orgânica e nele os compostos são o foco das reações orgânicas. O mecanismo reacional de moléculas muito grandes são complexos, abstratos e difíceis para os alunos compreenderem. O entendimento, mesmo aquele abstrato, da geometria tridimensional é outro fator limitante e constitui a natureza física e química de toda a reação. Com o fim de reduzir essa profundidade de compreensão, é necessário ajudar os alunos a compreender o futuro processo de síntese e a escolha de um método razoável para melhorar a capacidade de pesquisa científica. Os softwares não apenas aprimoraram a compreensão dos estudantes sobre a estrutura molecular, mas também melhoram a capacidade de pensamento espacial e a imaginação dos alunos. Há muitos programas disponíveis que podem delinear a estrutura tridimensional de moléculas para a demonstração de uma simulação. Os professores podem usá-los também no ensino médio, para que os alunos possam reconhecer claramente o modelo estrutural de moléculas intuitivamente.

AI-11

Neste estudo, demonstrou-se que recursos computacionais como o WebMO podem ser introduzidos em aulas de nível de graduação e facilitar a melhor compreensão dos alunos sobre as reações de Diels-Alder. Combinações de vários conceitos em química geralmente exigem um planejamento bastante complicado de aulas com várias seções separadas. A reação de Diels-Alder é um exemplo bem estabelecido nas aulas de graduação de Química Orgânica. Ao incorporar recursos computacionais, nesta aula de laboratório em particular, os alunos podem ser expostos a vários conceitos importantes, incluindo aqueles da Termodinâmica, Orbitais de Fronteira, Estereoquímica. Também observou-se que essa visualização aumentou o envolvimento dos alunos no curso, o que

provavelmente ocorre porque eles estão mais familiarizados com a tecnologia de hoje. É muito importante a harmonização dos cursos de Química Orgânica experimental com o estudo computacional para demonstrar como a físico-química pode fornecer uma compreensão "visível". No entanto, é igualmente importante que os estudantes percebam que os resultados computacionais não podem ser usados apenas para responder às perguntas.

AI-12

Um conjunto de exercícios que utilizam os *jobs* pré-calculados, destinados a melhorar a compreensão do aluno sobre a estrutura, ligação e reatividade de moléculas orgânicas simples, incorporado no WebMO, serviu de base para o desenvolvimento deste trabalho. Os exercícios foram inicialmente direcionados às necessidades de aprendizagem de graduandos matriculados em cursos introdutórios de Química Orgânica. A disponibilidade de dados computacionais autênticos para moléculas orgânicas simples por meio de um navegador da *web* (WebMO) elimina a necessidade de recursos especializados (por exemplo, licenças de software, um *cluster* de computadores ou vários computadores dedicados à Química Computacional) ou a experiência do instrutor na área e evita a potencial restrição de tempo inerente ao treinamento de alunos para usar um software de modelagem molecular. A desvantagem óbvia dessa abordagem "empacotada" é que os estudantes não ganham experiência no uso de programa para construir moléculas e enviar seus próprios trabalhos e, portanto, tornam-se usuários um tanto passivos do software ao interpretar os dados resultantes. Por outro lado, as concepções dos alunos sobre estrutura e ligação são aprimoradas pela capacidade de visualizar e manipular moléculas e orbitais. Isto é comprovado, pois, no presente trabalho, vários alunos verbalizaram que a capacidade de visualizar orbitais era particularmente agradável e útil para o aprendizado durante o laboratório, e um deles escreveu esse sentimento em uma das avaliações do curso. Eles ficaram mais surpresos ao saber que as hibridizações não se limitam a sp , sp^2 ou sp^3 . Muitos mencionaram que seria interessante ver como os cálculos são realizados, mas a maioria ficou satisfeita em examinar os arquivos de saída exportados pelo WebMO. Ambos os professores das faculdades ficaram entusiasmados com o aprendizado dos alunos mencionado e a inclusão dos exercícios em seus currículos. O *site* e os exercícios descritos no artigo, juntamente com os outros exercícios no site, fornecem aos instrutores/professores um recurso simples e gratuito para incorporar modelagem molecular computacional em seus cursos de Química Orgânica.

AI-13

Este é um trabalho que capitalizou uma tendência pedagógica, o ensino centrado no aluno. Por meio de atividades habilitadas pelo iSpartan, os autores desenvolveram a metodologia para complementar a instrução centrada no aluno no primeiro semestre de um curso introdutório de Química Orgânica. Os conteúdos trabalhados foram as conformações de alcanos e interações dos

substituintes. Ao permitir que os alunos utilizassem o aplicativo para identificar conformações anti e estreladas, os alunos puderam visualizar informações estruturais e conectá-las à terminologia apropriada. O exercício também permitiu que os estudantes observassem a mudança nas propriedades físicas à medida que manipulavam estruturas tridimensionais. Dessa forma, eles puderam gerar dados e utilizar as informações para definir conceitos tradicionais relacionados à natureza dinâmica da análise conformacional. As respostas dos alunos à pesquisa sugeriram que os exercícios foram fundamentais para melhoria da suas capacidades de compreensão das propriedades estruturais relacionadas. Esse benefício também foi relatado pelos professores. Os estudantes também demonstraram melhora significativa em sua capacidade de responder a perguntas relacionadas às conformações de alcanos, sugerindo domínio do conceito.

AI-14

Uma série de experimentos computacionais de laboratório com o objetivo de ensinar aos alunos princípios de *design* racional de fármacos são descritos e avaliados neste artigo. Esses experimentos variam de uma introdução à visualização de complexos de proteína-ligante à otimização de geometrias de fármacos potenciais com o uso da química quântica e *docking* molecular. Como resultado geral dos questionários avaliativos, os alunos indicam que tal curso aumentou sua apreciação pelos papéis dos químicos no processo de descoberta-desenvolvimento de fármacos, visto que os experimentos foram desenvolvidos em turmas de Química Farmacêutica. Houve também maior reconhecimento da importância estrutural de moléculas pequenas e de moléculas receptoras no *design* de medicamentos. O projeto deste trabalho pode ser adaptado para cursos e minicursos de Química Orgânica avançada ou Química Medicinal.

AI-15

O objetivo deste estudo foi preparar professores sobre o paradigma da pedagogia reflexiva (RPP). Neste, todo o processo de aprendizagem consiste em vários estágios de contexto, experiência, reflexão, ação e avaliação. O RPP foi escolhido porque foi comprovado que melhora o desempenho dos professores no ensino e torna os alunos mais capazes de refletir sobre os processos de aprendizagem, tornando-os mais ativos (Wijoyo; Rahayu; Dwiprahasto, 2016). Os esforços de implementação do RPP foram focados em melhorar a qualidade do aprendizado e a capacidade dos alunos de usar um software de Química Computacional como suporte no curso de Química Orgânica. Apesar de não enfatizar a Química Computacional, este trabalho fortaleceu o todo o processo de ensino-aprendizagem por meio de um paradigma educacional, a RPP. Esta é baseada na teoria da aprendizagem experiencial, a qual sustenta a ideia de que a aprendizagem depende da integração da experiência com a reflexão e coloca a reflexão no centro do processo de aprendizagem. Com base nessa teoria, pode-se argumentar que ao refletir sobre sua própria experiência, os professores, enquanto educandos, podem construir suas próprias perspectivas

educacionais e obter novas percepções dessa experiência e desenvolver novas estratégias para usar no ensino subsequente (Avila-Bront, 2020; Deveau; Wang; Small, 2020; Morris, 2020).

AI-16

O ensino à distância tornou-se uma necessidade para manutenção dos estudos e atividades escolares durante a pandemia da COVID-19 em todo o mundo. A visualização tridimensional de proteínas no ensino de cursos de graduação em química medicinal é altamente eficaz em aumentar a compreensão e o interesse dos alunos nesse componente curricular. No presente artigo, um curso foi projetado para usar as ferramentas de visualização em sala de aula, e os alunos as usaram para estudar as interações entre medicamentos e moléculas alvos e apresentar seus trabalhos como parte da avaliação do curso. Com o isolamento social essencial durante a pandemia, o corpo docente enfrentou muitos desafios para manter o uso de ferramentas como parte do curso. A falta de contato direto, as diferenças no conhecimento de informática dos estudantes e a disponibilidade de conexões com a *internet*, além da necessidade de meios apropriados para apresentações de tarefas e avaliações, foram as principais preocupações. A autora, então, desenvolveu um estudo de caso, para superar os desafios enfrentados naquele momento. Ao utilizar o trabalho em grupo, foi garantido que cada equipe tivesse uma diversidade de habilidades em informática, e a disponibilidade de conexão rápida à Internet, pois muitos dos estudantes declararam ter essas limitações, somada a isso, houve estímulo ao trabalho colaborativo. A descrição metodológica e dos resultados do artigo foram insuficientes em vários aspectos, não houve detalhamento do conteúdo abordado, dos programas manipulados e os resultados foram dispostos de forma muito generalizada.

AI-17

Neste estudo, foi usado o método de ABP combinado com cálculos DFT para o estudo de reações de alquilação de Friedel-Crafts. Os principais objetivos foram orientar os alunos a explorar profundamente o diagrama da coordenada de reação, o efeito do solvente, a influência da temperatura e o princípio de Curtin-Hammett. Com base em nos exemplos e exercícios, a maioria dos alunos conseguiu explicar os conceitos químicos mencionados para analisar a seletividade da reação. A combinação da ABP com a Química Computacional permite que os estudantes, investigassem minuciosamente as reações por conta própria e/ou em grupos. Com as explorações e discussões do mecanismo das reações, os alunos conseguiram prever a seletividade da reação a partir da perspectiva de estudos de química teórica, uso da literatura experimental e da pesquisa de Química Computacional. Baseado no excelente desempenho dos alunos, pode-se sugerir que a Química Computacional possa desempenhar maiores funções nos currículos de graduação, a fim de que os alunos possam se tornar totalmente ativos na ABP da química moderna.

AI-18

A discussão da ferramenta WebMO e suas aplicações na pesquisa e no ensino é o objetivo deste trabalho. Qualquer usuário pode acessá-lo através de um *laptop* ou dispositivo móvel sem instalar um software adicional. O WebMO também é uma excelente plataforma para implementação da Química Computacional em ambientes educacionais. A interface uniforme simplifica a necessidade de treinamento do usuário, isto permite que a Química Computacional seja uma ferramenta versátil usada em todos os currículos para modelar propriedades químicas e reatividade. Além de fornecer uma plataforma conveniente e acessível para os alunos executarem cálculos de Química Computacional, o WebMO tem a capacidade de produzir imagens de alta qualidade, as quais podem ser usadas para produção de materiais didáticos, dinâmicos e interativos instrucional. Os arquivos HTML exportados podem ser colocados em qualquer servidor web, tornando simples para os alunos investigarem resultados pré-computados sem terem que executar os cálculos eles mesmos. A própria ferramenta já possui várias coleções de exercícios de Química Computacional adequados para o ensino superior. Algumas aplicações específicas para a Química Orgânica:

- ✓ Energias conformacionais;
- ✓ Interações estéricas (energia de deformação da mecânica molecular);
- ✓ Sobreposição de orbitais atômicos e ligação de valência;
- ✓ Reatividade molecular;
- ✓ Vias de reação nucleofílica;
- ✓ Cicloadição endo versus exo;
- ✓ Efeito de grupos doadores e retiradores de elétrons;
- ✓ Hibridização e basicidade de elétrons não-ligantes;
- ✓ Frequências vibracionais características (espectro de IV interativo);
- ✓ Simulação de espectros de RMN ;
- ✓ Visualização da quiralidade;
- ✓ Sítios de ataque nucleofílico/eletrofilico (mapas de densidade eletrônica).

Todos os recursos fornecidos pelo WebMO fornecem a oportunidade para os alunos se familiarizarem com procedimentos experimentais desconhecidos, e por sua vez, para que possam se envolver com o trabalho prático de forma mais eficaz e pensar mais sobre os conceitos de química envolvidos. Eles também permitem oportunidades para reforçar a compreensão e aplicar o aprendizado a novos contextos de uma forma que normalmente não seria possível.

AI-19

Dois objetivos principais foram alcançados neste trabalho: Primeiro, os professores foram apresentados aos conhecimentos contemporâneos (princípios teóricos, conceitos básicos da Química Computacional e modelagem molecular) e às ferramentas da Química Computacional,

por meio de palestras do curso. Os principais critérios para a escolha do conteúdos foram a relevância e sua correspondência com o currículo de química do ensino médio. O segundo foi aplicar o conhecimento do conteúdo e as ferramentas da Química Computacional. Esse objetivo foi alcançado por meio das atividades práticas. Ambos os objetivos foram atingidos, segundo os resultados das avaliações do curso. Graças a isso, uma rica exploração de conteúdos químicos puderam ser trabalhados, os quais, no leque da Química Orgânica pode-se citar: isomeria cis-trans, análise conformacional, propriedades físicas, interações intermoleculares e visualização de compostos orgânicos. Embora frutos positivos tenham sido colhidos, uma parcela dos professores declararam que não se sentiram seguros com o uso da ferramenta computacional em sala de aula. Isto reitera e conclui a necessidade de reforçar e evoluir modelos para o desenvolvimento profissional dos professores e de mais pesquisas para melhor apoiar e transformar professores que irão integrar a Química Computacional nas aulas do ensino médio.

AI-20

Como núcleo deste trabalho, um curso *on-line* de *design* de fármacos auxiliado por computador cuja abrangência circunda a Bioquímica, Química Computacional, Química Medicinal e outras ciências de ponta, teve a participação de muitos graduandos em Farmácia. Ele compreende como os medicamentos se ligam aos alvos proteicos e exercem suas atividades biológicas usando ferramentas de computador e abrange os princípios básicos de desenvolvimento e otimização de medicamentos. Por meio de questionário e avaliação, descobriu-se que o ensino combinado pode oferecer uma oportunidade de estimular maior motivação e interesse pelo tema e uso das ferramentas computacionais. Tudo isto estimula a eficácia do ensino e dos resultados de aprendizagem do curso. Este estudo descreve como foi administrado o curso durante o período da pandemia de COVID-19 com a intenção de fornecer uma referência para outros professores conduzirem cursos semelhantes. De modo geral, os autores obtiveram resultados satisfatórios. Como crítica global, o curso ainda precisa evoluir, por exemplo, aprimorando o método de avaliação e ajustando o conteúdo do curso para se adaptar melhor ao ensino *on-line*.

AI-21

A fim de formular uma atividade teórico-prática na disciplina de Química Farmacêutica, o presente estudo visou a aplicação dos conhecimentos dos alunos sobre modelagem estrutural e *docking* molecular. A proposta foi analisar compostos bioativos, preferencialmente, produtos naturais amazônicos, contra alvos moleculares do vírus SARS-CoV-2, valorizando a cultura e a biodiversidade regional. Dado o cenário de pandemia, a disciplina foi ministrada de modo remoto e os estudantes deveriam argumentar a escolha da molécula com base em revisão bibliográfica e os resultados do *docking* molecular, aplicando os conceitos aprendidos ao longo da disciplina Química Farmacêutica de forma ativa e integrada. O processo educacional, auxiliou na fixação dos

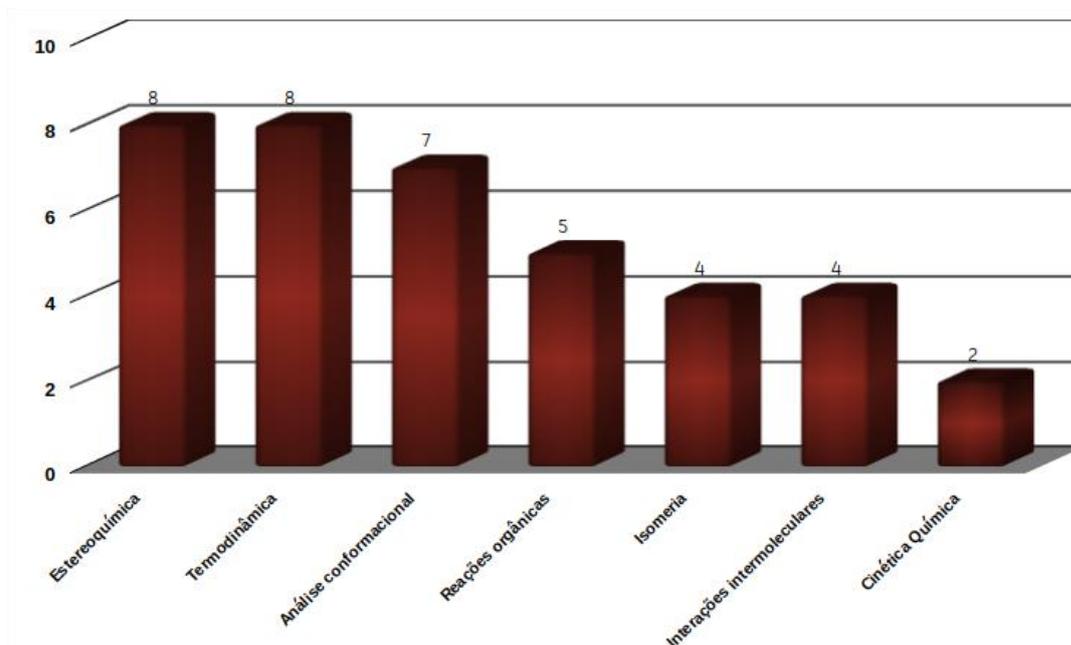
conteúdos transmitidos em sala de aula por simular situações que por vezes são de difícil compreensão pelo aluno. O desafio de usar os conhecimentos aprendidos em sala de aula para tentar solucionar um problema real da sociedade em que estão inseridos, dentro da perspectiva de sua futura profissão, mostrou-se muito agregador. Neste caso em específico, ainda conseguiu-se relacionar a importância do desenvolvimento de fármacos com a necessidade de agregar valor à flora brasileira, especialmente a amazônica, de modo a mostrar que o Brasil tem potencial para não ser tão dependente de tecnologia estrangeira no seu sistema de saúde.

AI-22

Aqui, um material de ensino baseado em Química Computacional foi desenvolvido para preencher a lacuna entre o aprendizado em sala de aula e os diversos tipos de pesquisa em sistemas químicos, os quais alunos enfrentam imediatamente após serem designados para um laboratório. O material foi implantado em um curso de laboratório de físico-química para alunos de graduação do segundo ou terceiro anos. A cobertura abrangente deste material de laboratório, de interações moleculares fracas a reações químicas, envolvendo exercícios computacionais, facilita o desenvolvimento de conhecimentos básicos relacionados à Química Orgânica, como propriedades físicas e ácido-base, mecanismos de reação, espectroscopia na região UV-Vis etc.

Na Figura 7 encontram-se os principais conteúdos de Química Orgânica estudados nos trabalhos revisados e a quantidade de artigos em que eles aparecem. Nota-se que há uma predominância da Estereoquímica e da Termodinâmica, uma vez que são temas essenciais para a consideração dos aspectos espaciais da estrutura molecular e avaliação da reatividade energética. Conteúdos como Análise Conformacional (7 artigos) e mecanismos de reações orgânicas (5 artigos) também são os alvos principais dos trabalhos investigados. Por outro lado, os aspectos e parâmetros cinéticos foram estudados com menos frequência (2 artigos), apesar de serem tão importantes como a Termodinâmica no estudo e no controle experimental das reações químicas.

Figura 7 – Principais conteúdos de Química Orgânica abordados nos trabalhos revisados.



Fonte: Autoria própria.

5.3 Abordagens de ensino e Considerações gerais sobre a revisão

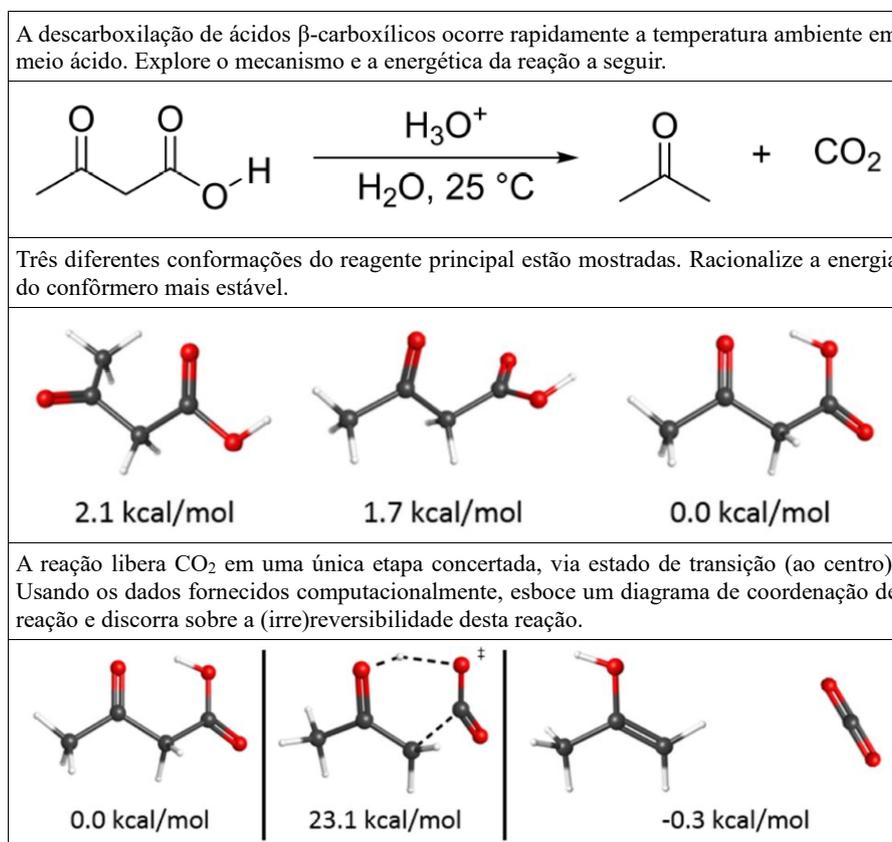
Estudantes de Química Orgânica são rotineiramente bombardeados com uma série de representações especializadas (por exemplo, setas para demonstrar o movimento eletrônico, projeções de Newman, conformações em cadeira, diagramas de coordenada de reação etc.). Para os químicos, o propósito de representar aspectos de um sistema é permitir a previsão ou explicação de fenômenos. Para os estudantes, o propósito de desenhar e traduzir entre representações é, frequentemente, muito menos claro. Comumente, "desenhar aquela coisa" é tratado como o objetivo final da instrução e da avaliação. Há uma concordância com especialistas e acadêmicos de educação científica que aprender ciências não deve ser materialmente diferente de fazer ciência (Stowe; Esselman, 2023). Com relação às representações, isso significa que os estudantes devem usar representações com o propósito de atender e visualizar os componentes de um sistema para uma explicação ou previsão produtiva.

Se quisermos que os alunos interpretem, gerem, traduzam e usem essas representações, faz sentido praticar o desenho e a manipulação delas. Vários acadêmicos ditam como fundamental para o aprendizado de química, cultivar um “conjunto de habilidades e práticas que permitam que uma pessoa use reflexivamente uma variedade de representações ou visualizações, individualmente ou em conjunto, para pensar, comunicar e agir sobre fenômenos químicos” (Gurung *et al.*, 2022; Jones *et al.*, 2022; Stieff; DeSutter, 2021).

Como podemos usar as representações para permitir a explicação de fenômenos? Se minimizarmos a ênfase em habilidades representativas que raramente são úteis (por exemplo, “—

Desenhe projeções de Fischer para todas as aldohexoses, disse o professor”), há potencial para nossos cursos abrirem espaço para os alunos construírem explicações e modelos para fenômenos mais complexos e potencialmente consequentes. Observe a situação-problema apresentada na Figura 8.

Figura 8 – Um exercício no qual os alunos são induzidos a fazerem uso das representações estruturais e das energias calculadas para dar sentido a uma descarboxilação observada.



Fonte: Adaptada de Stowe e Esselman (2023).

Para responder o problema da Figura 8, após a justificativa das energias relativas de diferentes conformações, os graduandos são solicitados a fazer uso de representações do reagente, estado de transição e produtos, juntamente com suas energias relativas, para construir uma curva de energia potencial. Esta permite a alegação de que, como os reagentes e produtos são muito próximos em energia, é muito provável o processo ser reversível. O restante do problema é dedicado a descobrir por que a reação prossegue. Em diversos trabalhos analisados (AI1-4, AI-6, AI-8, AI-12, AI-13, AI-17, AI-20, AI-21) nesta revisão bibliográfica, os alunos provaram ser capazes de construir algumas explicações muito sofisticadas com o suporte mais adequado, isto é, a Química Computacional!

Há muito trabalho a ser feito para entender e implementar ambientes de aprendizagem de química que envolvam todos os alunos na integração de conhecimento e atividades científicas para entender o mundo ao nosso redor. À medida que a tecnologia torna as representações tridimensionais mais acessíveis, quão importantes são as representações antigas? A Química Computacional e as

imagens estruturais de moléculas e orbitais podem substituir algumas das representações comuns de estruturas? A resposta é não. Viu-se que, segundo a literatura avaliada, os resultados enraizados pela Química Computacional fornecem apenas alguns dos vários tipos de representação presentes numa gama de aulas de Química, principalmente as de Química Orgânica.

A ênfase no uso de representações como ferramentas serve para prever e explicar fenômenos complexos. Por exemplo, Schwarz e seus colegas (2022) escreveram:

“O trabalho central da modelagem é incorporar, usar e refinar ideias por meio do desenvolvimento iterativo de representações para descrever, conectar, explicar e prever fenômenos e sistemas. Qualquer objeto ou representação que seja usado para pensar sobre um processo ou sistema pode ser considerado um modelo”.

No contexto da Química Orgânica, isso significa que representações especializadas podem ou não ser usadas como modelos, dependendo dos objetivos que motivam seu uso pelo professor. É aqui que entram as principais premissas acerca do momento correto para o uso das representações por professores (Stowe; Esselman, 2023):

- ✓ As representações devem ser usadas para simplificar sistemas com o propósito de prever ou explicar um evento observável na natureza;
- ✓ Para potencialmente obter evidências convincentes de que os estudantes estão, de fato, usando representações como ferramentas para prever ou explicar fenômenos, os critérios de avaliação utilizados pelos professores devem solicitar conexões entre representações e por que os fenômenos se desenrolaram como se desenrolaram.

Muitas das representações do cotidiano de aulas de Química Orgânica devem ser postas em momentos pedagógicos adequados e em consonância com as necessidades/limitações da turma. Sob outro ponto de vista, as representações fornecidas pela Química Computacional estão atreladas, muitas vezes à visualização. Esta, quando assistida por tecnologia é considerada um instrumento eficaz para dar suporte à compreensão dos alunos sobre estruturas submicroscópicas, ao mesmo tempo em que aumenta seu interesse em ciências e aprimora seu aprendizado. A abundância de ferramentas digitais, computadores e *smartphones* permite que os professores integrem a tecnologia mais facilmente em sala de aula e melhorem sua pedagogia.

Não obstante, é importante alertar os professores sobre a ideia de que muitos dos nossos alunos estão passando por cursos de Química Orgânica sem aprender algumas das ferramentas importantes ensinadas do curso. Grande parte dos estudantes acredita que a Química Orgânica é toda “decoreba”, e para muitos isso é verdade; no entanto, estudos mostram que os alunos que usam os mecanismos têm mais probabilidade de ter sucesso em tarefas mais difíceis. Portanto, recomendo que os professores se concentrem no desenvolvimento de metodologias que levam ao pensamento não

mecanicista e as reforcem durante o curso. Se um aluno não aprender logo cedo, por exemplo, o que as setas curvas significam, é improvável que ele consiga aprender futuramente ou entender os mecanismos reacionais. Acredito que o tempo extra investido em princípios básicos no início do curso ajudará os estudantes a aprender a navegar em uma linguagem que é estranha para eles, com uma gramática que não é natural e contraintuitiva. Nestes casos, a presença de atividades computacionais pode não ser viável enquanto representações importantes de Química Orgânica não forem compreendidas pelos discentes.

O conhecimento da natureza tridimensional dos compostos químicos, fornecido facilmente por modelagem computacional, é fundamental para estudantes de Química, bem como aqueles que a estudam de forma suplementar, por exemplo, físicos, biólogos, farmacêuticos, cientistas de materiais e engenheiros. Sem esse conhecimento, conceitos como conformação, estereoquímica, quiralidade e geometria de compostos de coordenação, essenciais em Química Orgânica e em Química de Coordenação, não podem ser adequadamente assimilados ou compreendidos.

As ferramentas e animações tridimensionais melhoram a compreensão conceitual e as habilidades espaciais dos discentes. O desenvolvimento de representações visuais apoia a comunicação relacionada à Química, beneficiando significativamente o aprendizado e o ensino dessa ciência. Nesse sentido, a visualização molecular em 3D melhora a compreensão de alguns fenômenos químicos de alta abstração e, ao mesmo tempo, promove a aquisição de imagens mentais dinâmicas de processos moleculares, ajudando a entender melhor a estrutura molecular e a reatividade química (Mahaffy, 2004; Rodríguez-Becerra *et al.*, 2020). Além disso, Venkataraman (2009) conclui que a visualização molecular tridimensional é útil tanto nos conceitos de aprendizagem subjacentes quanto na compreensão do papel das moléculas nos fenômenos observados.

Esta revisão mostrou que o público-alvo dos estudos investigados apreciou e valorizou a natureza interativa da visualização molecular 3D, tendo em vista a promoção do desenvolvimento de modelos mentais de sistemas e processos químicos em nível molecular (AP-1, AP-2, AI1-17, AI19-22).

Já os experimentos de laboratório, que normalmente aparecem em manuais de Química Orgânica de graduação, são projetados para demonstrar tipos tradicionais de reatividade e para dar um único produto, um exemplo clássico é a síntese de aspirina a partir do ácido salicílico. Em compensação, exercícios computacionais simples fornecem uma introdução suave à síntese orgânica e à química de grupos funcionais, apesar de corresponderem, frequentemente, a uma imagem distante do que é vivenciado em um laboratório de pesquisa, onde as reações muitas vezes envolvem uma mistura de produtos. Além disso, esses exercícios podem oferecer pouco em termos de valor instrucional, meramente demonstrando uma transformação com a qual os alunos já estão familiarizados com as aulas teóricas.

As teorias de aprendizagem significativa abordam os desafios com a aprendizagem de química ao reconhecer a interação entre componentes afetivos, cognitivos e psicomotores da aprendizagem. Essas teorias postulam que ambos esses componentes devem ser abordados para que a aprendizagem significativa ocorra (Gupte *et al.*, 2021; Grove; Bretz, 2012). Para dar mais suporte à aprendizagem dos alunos em Química Orgânica, é necessário desenvolver e pesquisar abordagens pedagógicas específicas para dar suporte à aprendizagem significativa dos alunos.

Como a relevância percebida desempenha um papel importante no processo de aprendizagem significativa, é essencial que os docentes façam todos os esforços para destacar o papel vital que a Química Orgânica desempenha na conexão das ciências, fornecendo aos alunos não apenas exemplos de muitos contextos diferentes — como medicina, biologia, indústria e bioquímica — mas também exemplos pertinentes que podem ajudá-los a definir melhor os limites conceituais. Embora muitos livros didáticos forneçam aos alunos exemplos dos usos da Química Orgânica em outras disciplinas, esses materiais são frequentemente apresentados como uma tangente que muitos alunos ignoram. Dada a população típica de discentes de Química Orgânica, também seria útil para os docentes entenderem melhor por que os alunos (futuros profissionais) são obrigados a cursar Química Orgânica. Embora muitos possam oferecer hipóteses, apenas aqueles que estão realmente envolvidos no treinamento de futuros licenciados e bacharéis podem responder com algum grau de certeza. Portanto, é essencial que um diálogo seja iniciado entre aqueles com interesse na educação dos estudantes e que aquilo trabalhado/desenvolvido nas turmas de Química Orgânica seja melhor alinhado com o que as escolas profissionais/universidades esperam que os alunos aprendam com o curso.

Os computadores se tornaram tão úteis para os químicos quanto os tubos de ensaio. O aumento considerável no poder de computação durante esse tempo significaram que o campo da Química Computacional, a qual usa simulações de computador poderosas para resolver problemas químicos, explodiu. Viu-se que nos últimos anos, muitas investigações pedagógicas tiveram como protagonista o planejamento racional de fármacos (AI-2, AI-4, AI-6, AI-14, AI-20, AI-21). Pesquisadores ao redor do mundo realizam simulações de computador para acelerar suas pesquisas; na verdade, a Química Computacional foi usada para desenvolver/solucionar diversas atividades do Remdesivir®, um antiviral aprovado pela *Food and Drug Administration* (FDA) para a COVID-19 (Deb; Reeves, 2021; Kather; Nassar, 2023; Salahshoori *et al.*, 2023). A Química Computacional também impactou a sala de aula, ajudando a mantê-la vibrante durante o ensino e a aprendizagem *on-line*.

A partir das aulas experimentais propostas e dos resultados que podem ser obtidos ao executá-las, acredita-se que as atividades práticas computacionais podem auxiliar os discentes a entender um pouco mais sobre o planejamento e desenvolvimento racional de novos compostos bioativos. Outro ponto positivo que cabe ser enfatizado é o uso da estratégia de aprendizagem interdisciplinar, que

integra de forma prática alguns saberes da Química Orgânica e Química Medicinal, e possibilita aos estudantes o desenvolvimento de habilidades e competências importantes e relacionadas com essas disciplinas (AI-2, AI-4, AI-6, AI-14, AI-20, AI-21).

A modelagem computacional tem grande potencial para permitir que os educandos compreendam os princípios teóricos das ciências naturais e da matemática. Ela auxilia na percepção do aluno para a construção do conhecimento, pois pode incorporar em um único momento muitas formas de representação do sistema em estudo, sejam elas escritas e/ou visuais. Utilizando apenas a exposição da aula, é quase impossível descrever a dinâmica de um fenômeno e é necessário que os alunos desenvolvam um certo grau de abstração para a compreensão do conteúdo. Dessa forma, a modelagem computacional em Química contribui para o desenvolvimento cognitivo de forma geral; facilita a construção de relações e significados, potencializando as possibilidades pedagógicas de interação entre professor e aluno.

As ferramentas poderosas, filhas da Química Computacional, são frutos de décadas de pesquisa e experiência e são fornecidas com interfaces gráficas amigáveis as quais permitem que até mesmo o usuário mais inexperiente execute cálculos moleculares complexos em tempos muito curtos: sem dúvida, elas são um recurso inestimável para uma educação atualizada de químicos e outros especialistas. No entanto, uma estratégia de ensino baseada exclusivamente em treinamento de software é bastante arriscada. Há um perigo significativo, de fato, de que os alunos assumam um papel passivo na frente do computador e se restrinjam a fornecer arquivos de entrada mecanicamente e receber arquivos de saída sem qualquer conhecimento crítico dos fundamentos, com pouca ou nenhuma consciência do que o software realmente faz. Portanto, a introdução de uma dimensão alternativa, mais pedagogicamente ativa, seria um suporte muito útil para a didática orientada a programas comuns (Orsini, 2015).

6. CONCLUSÕES

A Química Computacional usa algoritmos matemáticos, estatísticas e grandes bancos de dados para integrar teorias químicas e modelagem com observações experimentais. As metodologias aplicadas no ensino de Química Orgânica, quando permeadas pela Química Computacional, visam ajudar os alunos a explorar e entender melhor os princípios e propriedades químicas e são direcionados principalmente a alunos de graduação. Uma das grandes vantagens da Química Computacional é que os resultados dos cálculos podem ser facilmente visualizados e os estudantes podem obter percepções a partir deles. Seu uso pode fornecer aos docentes uma oportunidade de apresentar aos seus alunos a justificativa para uma variedade de problemas e fenômenos, por exemplo, interações entre moléculas e o princípio termodinâmico da estabilidade, do mínimo de energia.

Além disso, treinar professores para usar e implementar softwares de Química Computacional contribuiu significativamente para a construção de conhecimentos clássicos e contemporâneos de Química Orgânica, o que se refletiu em sua motivação para integrar essas ferramentas em sala de aula. Em relação aos benefícios do uso de métodos de Química Computacional (*ab-initio*, DFT, semi-empíricos e entre outros), não há muitas evidências, não são estritamente fundamentais para cursos de Química Orgânica e aqueles disponíveis referem-se principalmente ao ensino superior. Dentre as dificuldades de implementação da Química Computacional, enquanto ferramenta pedagógica, observaram-se problemas de infraestrutura (por exemplo, preços de software, manutenção e suporte técnico), a necessidade de treinamento técnico, a formação teórica limitada dos estudantes em relação aos cálculos, os CTPC dos professores que não estão totalmente desenvolvidos e sua autoeficácia, especialmente quando a Química Computacional não é sua área de especialização.

Os alunos devem ser expostos logo cedo (nos cursos introdutórios) a computadores e celulares como objetos de trabalho poderosos e não apenas para uso lúdico. Entretanto, para esse objetivo é preciso usar metodologias novas e simplificadas centradas em ideias conceituais e abordagens práticas. Isso não é apenas necessário, mas também é a maneira adequada, pois não é mais necessário fazer implementações difíceis em linguagens de computador e realizar cálculos tediosos. A Química Computacional pode ajudar a deduzir, simplificar, programar e tomar decisões, enquanto realiza cálculos repetitivos. A ênfase em sala de aula não deve estar nos cálculos, deduções e simplificações desgastantes da Química Computacional, e sim em ideias simples e claras sobre como os conteúdos de Química Orgânica são importantes e como colocar os computadores para a produção de resultados, e principalmente, de conhecimentos. No entanto, não se deve simplificar demais, esconder detalhes fundamentais, nem colocar os alunos na posição de meros usuários acríticos! Deve-se apresentar a eles os princípios, as capacidades, limitações e fornecer os instrumentos para o desenvolvimento e melhoria das ferramentas educacionais existentes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABREU, P. A.; CARVALHO, K. L.; RABELO, V. W.-H.; CASTRO, H. C. Computational strategy for visualizing structures and teaching biochemistry. **Biochemistry and Molecular Biology Education**, v. 47, n. 1, p. 76–84, jan. 2019.
- AKSELA, M. K. Engaging students for meaningful chemistry learning through Microcomputer-based Laboratory (MBL) inquiry. **Educación Química : EduQ**, n. 9, p. 30–37, 2011.
- ALBRECHT, B. Computational Chemistry in the Undergraduate Laboratory: A Mechanistic Study of the Wittig Reaction. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 12, p. 2182–2185, 9 dez. 2014.
- ALMEIDA, G. B. D.; BORGES, R. D. S.; SÁ, É. R. A. D. Simulações Computacionais: Uma Proposta de Transposição Didática no Ensino de Química. **RCT - Revista de Ciência e Tecnologia**, v. 7, 6 abr. 2021.
- ASMUSSEN, G.; RODEMER, M.; BERNHOLT, S. Blooming student difficulties in dealing with organic reaction mechanisms – an attempt at systemization. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 24, n. 3, p. 1035–1054, 2023.
- AVILA-BRONT, L. G. An Experiential Learning Chemistry Course for Nonmajors Taught through the Lens of Science Fiction. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 10, p. 3588–3594, 13 out. 2020.
- AZARIAN, M.; YU, H.; SHIFERAW, A. T.; STEVIKET, T. K. Do We Perform Systematic Literature Review Right? A Scientific Mapping and Methodological Assessment. **Logistics**, v. 7, n. 4, p. 89, 27 nov. 2023.
- BARDIN, L. **Análise de conteúdo**. 6 ed. São Paulo: Edições 70, 2015.
- BERNHOLT, S.; BROMAN, K.; SIEBERT, S.; PARCHMANN, I. Digitising Teaching and Learning – Additional Perspectives for Chemistry Education. **Israel Journal of Chemistry**, v. 59, n. 6–7, p. 554–564, jun. 2019.
- BLACK, P. N. A revolution in biochemistry and molecular biology education informed by basic research to meet the demands of 21st century career paths. **Journal of Biological Chemistry**, v. 295, n. 31, p. 10653–10661, jul. 2020.
- BRIZOLA, J.; FANTIN, N. Revisão da Literatura. Revisão Sistemática da Literatura. **Revista de Educação do Vale de Arino**, v. 3, n. 2, p. 23-39, 2016.
- BOSCOV, C. O impacto do ensino centrado no aluno no processo de aprendizado. **Revista de Auditoria Governança e Contabilidade**, v. 8, n. 36, p. 79–93, 2020.
- CARTRETTE, D. P.; MAYO, P. M. Students' understanding of acids/bases in organic chemistry contexts. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 12, n. 1, p. 29–39, 2011.
- CENCER, M. M.; SUSLICK, B. A.; MOORE, J. S. From skeptic to believer: The power of models. **Tetrahedron**, v. 123, p. 132984, set. 2022.

- CERVO, A. L.; BERVIAN, P. A.; DA SILVA, R. **Metodologia científica**. [s.l.]: Person, 176 p., 2006.
- CHAI, C. S.; KOH, J. H. L.; TSAI, C.-C. A Review of Technological Pedagogical Content Knowledge. **Educational Technology & Society**, v. 16, p. 31–51, 2013.
- CHEN, C. The Structure and Dynamics of Scientific Knowledge. In.: **Mapping Scientific Frontiers: The quest for Knowledge Visualization**, 2 ed. London: Springer, 2003, p. 163–199.
- CLAUSS, A. D.; NELSEN, S. F. Integrating Computational Molecular Modeling into the Undergraduate Organic Chemistry Curriculum. **Journal of Chemical Education**, v. 86, n. 8, p. 955, ago. 2009.
- COOPER, M. M.; GROVE, N.; UNDERWOOD, S. M.; KLYMKOWSKY, M. W. Lost in Lewis Structures: An Investigation of Student Difficulties in Developing Representational Competence. **Journal of Chemical Education**, v. 87, n. 8, p. 869–874, 1 ago. 2010.
- CSIZMAR, C. M. R.; DANIELS, J. P.; DAVIS, L. E.; HOOVIS, T. P.; HAMMOND, K. A.; MCDOUGAL, O. M.; WARNER, D. L. Modeling Sn₂ and E₂ Reaction Pathways and Other Computational Exercises in the Undergraduate Organic Chemistry Laboratory. **Journal of Chemical Education**, v. 90, p. 1235–1238, 2013.
- DA SILVA, C. S.; JÚNIOR, E. V. S.; PIRES, D. A. T. O uso de software de representação molecular em 3d como material didático interdisciplinar para o ensino de química. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 12, n. 2, p. 66-79, 2017.
- DA SILVA JUNIOR, J. N.; LIMA, M. A. S.; SOUSA, E. H. S.; ALEXANDRE, F. S. O.; JUNIOR, A. J. L. KinChem: A Computational Resource for Teaching and Learning Chemical Kinetics. **Journal of Chemical Education**, v. 91, p. 2203–2205, 2014.
- DE ALMEIDA, G. B.; BORGES, R. S.; DE SÁ, E. R. A. Simulações Computacionais: Uma Proposta de Transposição Didática no Ensino de Química. **Revista de Ciência e Tecnologia**, v. 7, p. 1–21, 2021.
- DEB, S.; REEVES, A. A. Simulation of Remdesivir Disposition and Its Drug Interactions. **J Pharm Pharm Sci**, 2021.
- DE OLIVEIRA, F. V.; CANDITO, V.; GUERRA, L.; CHITOLINA, M. A. Aprendizagem baseada em problemas por meio da temática coronavírus: Uma proposta para o ensino de química. **Interfaces Científicas**, v. 10, n. 1, p. 110–123, 2020.
- DE VASCONCELOS, F. C. G. C. Simulações no Ensino de Química: exemplos de softwares e o entendimento de professores sobre este recurso. In: ENCONTRO NACIONAL DE PESQUISA EM EDUCAÇÃO EM CIÊNCIAS, 13., 2021. **Anais eletrônicos** [...], p. 1-8.
- DEVEAU, A. M.; WANG, Y.; SMALL, D. J. Reflections on Course-Based Undergraduate Research in Organic and Biochemistry during COVID-19. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 9, p. 3463–3469, 8 set. 2020.
- DONG, L.-K.; LI, Z.-H.; ZHANG, S.-Y. Using Computational Chemistry to Improve Students' Multidimensional Understanding of Complex Electrophilic Aromatic Substitution Reactions: Further Analysis of the Solvent Effect, Temperature Influence, and Kinetic Behaviors. **Journal of**

Chemical Education, v. 98, n. 10, p. 3226–3236, 12 out. 2021.

DOOD, A. J. *et al.* Development and evaluation of a Lewis acid–base tutorial for use in postsecondary organic chemistry courses. **Canadian Journal of Chemistry**, v. 97, n. 10, p. 711–721, out. 2019.

DORFMAN, B.-S.; TERRILL, B.; PATTERSON, K.; YARDEN, A.; BLONDER, R. Teachers personalize videos and animations of biochemical processes: results from a professional development workshop. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 20, n. 4, p. 772–786, 2019.

DORI, Y. J.; HAMEIRI, M. Multidimensional analysis system for quantitative chemistry problems: Symbol, macro, micro, and process aspects. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 40, n. 3, p. 278–302, mar. 2003.

DUFF-MATZNER, J. L.; PACHECO, K. A. O. **Advances in Teaching Organic Chemistry**. Washington, DC: American Chemical Society, 2012.

ELLISON, M.; SCHOOLCRAFT, T. A. Advances in Teaching Physical Chemistry: Overview. In: **Advances in Teaching Physical Chemistry**. ELLISON, M.; SCHOOLCRAFT, T. A. Washington, DC: American Chemical Society.

ELKIN, M.; NEWHOUSE, T. R. Computational chemistry strategies in natural product synthesis. **Chemical Society Reviews**, v. 47, n. 21, p. 7830–7844, 2018.

ESSELMAN, B. J.; HOFSTETTER, H.; ELLISON, A. J.; FRY, C. G.; HILL, N. J. S_N1, E1, and E2 Reactions of *tert*-Amyl Compounds: Improved Analysis Using Computational Chemistry and ASAP-HSQC NMR Spectroscopy. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 8, p. 2280–2285, 11 ago. 2020.

ESSELMAN, B. J.; HILL, N. J. Integration of Computational Chemistry into the Undergraduate Organic Chemistry Laboratory Curriculum. **Journal of Chemical Education**, v. 93, n. 5, p. 932–936, 10 maio 2016.

FERRELL, B.; BARBERA, J. Analysis of students' self-efficacy, interest, and effort beliefs in general chemistry. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 16, n. 2, p. 318–337, 2015.

FERRELL, J. B.; CAMPBELL, J. P.; MCCARTHY, D. R.; MCKAY, K. T.; HENSINGER, M.; SRINIVASAN, R.; ZHAO, X.; WURTHMANN, A.; LI, J.; SCHNEEBELI, S. T. Chemical Exploration with Virtual Reality in Organic Teaching Laboratories. **Journal of Chemical Education**, v. 96, n. 9, p. 1961–1966, 10 set. 2019.

GROVE, N. P.; COOPER, M. M.; COX, E. L. Does Mechanistic Thinking Improve Student Success in Organic Chemistry? **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 7, p. 850–853, 12 jun. 2012.

GROVE, N. P.; COOPER, M. M.; RUSH, K. M. Decorating with Arrows: Toward the Development of Representational Competence in Organic Chemistry. **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 7, p. 844–849, 12 jun. 2012.

GROVE, N. P.; LOWERY BRETZ, S. A continuum of learning: from rote memorization to

- meaningful learning in organic chemistry. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 13, n. 3, p. 201–208, 2012.
- GUPTA, T.; WATTS, F. M.; SCHMIDT-MCCORMACK, J. A.; ZAIMI, I.; GEREC, A. R.; SHULTZ, G. V. Students' meaningful learning experiences from participating in organic chemistry writing-to-learn activities. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 22, n. 2, p. 396–414, 2021.
- GURUNG, E.; JACOB, R.; BUNCH, Z.; THOMPSON, B.; POPOVA, M. Evaluating the Effectiveness of Organic Chemistry Textbooks for Promoting Representational Competence. **Journal of Chemical Education**, v. 99, n. 5, p. 2044–2054, 10 maio 2022.
- HATI, S.; BHATTACHARYYA, S. Incorporating modeling and simulations in undergraduate biophysical chemistry course to promote understanding of structure-dynamics-function relationships in proteins. **Biochemistry and Molecular Biology Education**, v. 44, n. 2, p. 140–159, 4 mar. 2016.
- JOHNSTONE, A. H. Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. **Journal of Computer Assisted Learning**, v. 7, n. 2, p. 75–83, jun. 1991.
- JONES, T.; ROMANOV, A.; PRATT, J. M.; POPOVA, M. Multi-framework case study characterizing organic chemistry instructors' approaches toward teaching about representations. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 23, n. 4, p. 930–947, 2022.
- JURSIC, B. S. Finding, optimization, and verification of transition state structures with semi-empirical and ab-initio computational methods. **Journal of Molecular Structure: THEOCHEM**, v. 465, n. 2–3, p. 173–182, jun. 1999.
- JUSTINO, G. C.; NASCIMENTO, C. P.; JUSTINO, M. C. Molecular dynamics simulations and analysis for bioinformatics undergraduate students. **Biochemistry and Molecular Biology Education**, v. 49, n. 4, p. 570–582, jul. 2021.
- KEITH, B.; VITASEK, K.; MANRODT, K.; KLING, J. **Strategic Sourcing in The New Economy: Harnessing the Potential of Sourcing Business Models for Modern Procurement**. 1 ed. New York: Springer, 2016.
- KHATER, I.; NASSAR, A. In silico molecular docking analysis for repurposing approved antiviral drugs against SARS-CoV-2 main protease. **Biochemistry and Biophysics Reports**, v. 27, p. 101032, set. 2021.
- KOBAYASHI, R.; GOUMANS, T. P. M.; CARSTENSEN, N. O.; SOINI, T. M.; MARZARI, N.; TIMROV, I.; PONCÉ, S.; LINSOTT, E. B.; SEWELL, C. J.; PIZZI, G.; RAMIREZ, F.; BERCX, M.; HUBER, S. P.; ADORF, C. S.; TALIRZ, L. Virtual Computational Chemistry Teaching Laboratories—Hands-On at a Distance. **Journal of Chemical Education**, v. 98, n. 10, p. 3163–3171, 12 out. 2021.
- LAFARGE, D. L.; MORGE, L. M.; MÉHEUT, M. M. A New Higher Education Curriculum in Organic Chemistry: What Questions Should Be Asked? **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 2, p. 173–178, 11 fev. 2014.
- LIN, X.; LI, X.; LIN, X. A Review on Applications of Computational Methods in Drug Screening and Design. **Molecules**, v. 25, n. 6, p. 1375, 18 mar. 2020.

- MAHAFFY, P. THE FUTURE SHAPE OF CHEMISTRY EDUCATION. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 5, n. 3, p. 229–245, 2004.
- MATAKA, L. M.; KOWALSKE, M. G. The influence of PBL on students' self-efficacy beliefs in chemistry. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 16, n. 4, p. 929–938, 2015.
- MOLINA, M. F.; CARRIAZO, J. G.; FARIÁS, D. M. Actitudes hacia la química de estudiantes de diferentes carreras universitarias en Colombia. **Química Nova**, v. 34, n. 9, p. 1672–1677, set. 2011.
- MORRIS, T. H. Experiential learning – a systematic review and revision of Kolb's model. **Interactive Learning Environments**, v. 28, n. 8, p. 1064–1077, 16 nov. 2020.
- NOGUEIRA, J. J. New challenges for photopharmacology and computational modeling. **Trends in Biochemical Sciences**, v. 47, n. 10, p. 822–823, out. 2022.
- O' DWYER, A.; CHILDS, P. E. Who says Organic Chemistry is Difficult? Exploring Perspectives and Perceptions. **EURASIA Journal of Mathematics, Science and Technology Education**, v. 13, n. 7, 15 jun. 2017.
- ORSINI, G. Exploring Do-It-Yourself Approaches in Computational Quantum Chemistry: The Pedagogical Benefits of the Classical Boys Algorithm. **Journal of Chemical Education**, v. 92, n. 11, p. 1853–1859, 10 nov. 2015.
- PARÉ, G.; TRUDEL, M-C.; JAANA, M.; KITSIOU, S. Synthesizing Information Systems Knowledge: A Typology of Literature Reviews. **Information & Management**, v. 52, p. 183–199, 2015.
- PELTER, M. W.; HOWELL, M. T.; ANDERSON, C.; SAYEED, A. Computational Activity to Visualize Stereoisomers in Molecules with an Axis of Chirality. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 3, p. 754–759, 10 mar. 2020.
- PEMBERTON, A. T.; MAGERS, D. B.; KING, D. A. Integrated TGA, FTIR, and Computational Laboratory Experiment. **Journal of Chemical Education**, v. 96, n. 1, p. 132–136, 8 jan. 2019.
- PROVENCHER, B. A.; FRANCO, J.; FERNANDEZ, A. L.; THEBERGE, S.; ZWICKAU, B. Implementation of a 1–2–1 Curriculum and Its Effect on Organic Chemistry I. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 5, p. 1303–1309, 12 maio 2020.
- REIS, R. M. DA S.; LEITE, B. S.; LEÃO, M. B. C. Estratégias Didáticas envolvidas no uso das TIC: o que os professores dizem sobre seu uso em sala de aula? **Educação Temática Digital**, v. 23, n. 2, p. 551–571, 2021.
- RODRÍGUEZ-BECERRA, J. *et al.* Developing technological pedagogical science knowledge through educational computational chemistry: a case study of pre-service chemistry teachers' perceptions. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 21, n. 2, p. 638–654, 2020.
- ROWLEY, C. N.; WOO, T. K.; MOSEY, N. J. A Computational Experiment of the Endo versus Exo Preference in a Diels–Alder Reaction. **Journal of Chemical Education**, v. 86, n. 2, p. 199, fev. 2009.

SANTOS JUNIOR, J. B. DOS; DE OLIVEIRA, L. C. DE; BOTERO, W.; SIMONYI, B. V.; LEITE JUNIOR, L. C. Uma investigação sobre a efetividade da experimentação e da simulação para a aprendizagem significativa em Química Orgânica. **Revista Thema**, v19, n.3, p. 499-516, 2021.

SALAHSHOORI, I.; MONTAZERI, N.; YAZDANBAKHS, A.; GOLRIZ, M.; FARHADNIYA, R.; KHONAKDAR, H. A. Insights into the Adsorption Properties of Mixed Matrix Membranes (Pebax 1657- g -Chitosan-PVDF-Bovine Serum Albumin@ZIF-CO₃-1) for the Antiviral COVID-19 Treatment Drugs Remdesivir and Nirmatrelvir: An In Silico Study. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 15, n. 26, p. 31185–31205, 5 jul. 2023.

SCHLEDER, G. R.; PADILHA, A. C. M.; ACOSTA, C. M.; COSTA, M.; FAZZIO, A. From DFT to machine learning: recent approaches to materials science—a review. **Journal of Physics: Materials**, v. 2, n. 3, p. 032001, 1 jul. 2019.

SCHWARZ, C. V.; KE, LI; SALGADO, M.; MANZ, E. Beyond assessing knowledge about models and modeling: Moving toward expansive, meaningful, and equitable modeling practice. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 59, n. 6, p. 1086–1096, ago. 2022.

SOUZA, HEMILLY OLIVEIRA. **Química Quântica e Química Quântica Computacional no Currículo dos cursos de Licenciatura em Química do Brasil**. 2021. 45 f. Trabalho de conclusão de curso (Licenciatura em Química) – Departamento de Química, Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, 2021.

SPRINGER, M. T. Improving Students' Understanding of Molecular Structure through Broad-Based Use of Computer Models in the Undergraduate Organic Chemistry Lecture. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 8, p. 1162–1168, 12 ago. 2014.

STIEFF, M.; DESUTTER, D. Sketching, not representational competence, predicts improved science learning. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 58, n. 1, p. 128–156, jan. 2021.
STOWE, R. L.; ESSELMAN, B. J. The Picture Is Not the Point: Toward Using Representations as Models for Making Sense of Phenomena. **Journal of Chemical Education**, v. 100, n. 1, p. 15–21, 10 jan. 2023.

SYARIF, N.; SUPRIATINI, S. Database and Molecular Visualisation for Learning Media of Teaching Computational Chemistry/Pharmacy in Undergraduate Level. **AL-ISHLAH: Jurnal Pendidikan**, v. 15, n. 3, p. 3094–3108, 19 set. 2023.

TANTILLO, D. J. **Applied Theoretical Organic Chemistry**. 1 ed., New Jersey: World Scientific, 2018.

TRAN, J. B.; MCCOY, J. C.; BAILEY, L. M.; MCDANIEL, B. P.; SIMON, R. L.; MARCHETTI, B.; KARSILI, T. N. V. Affordable Setup for Studying Photochemistry in Action in Undergraduate Teaching Laboratories: Principles and Applications. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 8, p. 2203–2211, 11 ago. 2020.

TRUHLAR, D. G.; LEWIS, A.; BUMPUS, J. A.; CRAMER, C. J. Molecular Modeling of Environmentally Important Processes: Reduction Potentials. **Journal of Chemical Education**, v. 81, n. 4, p. 596, abr. 2004.

TUVI-ARAD, I. Computational Chemistry in the Undergraduate Classroom – Pedagogical Considerations and Teaching Challenges. **Israel Journal of Chemistry**, v. 61, p. 1–10, 2021.

TÜYSÜZ, C. The Effect of the Virtual Laboratory on Students' Achievement and Attitude in Chemistry. [s.d.].

VACHLIOTIS, T.; SALTA, K.; TZOUGRAKI, C. Meaningful Understanding and Systems Thinking in Organic Chemistry: Validating Measurement and Exploring Relationships. **Research in Science Education**, v. 44, n. 2, p. 239–266, abr. 2014.

VENKATARAMAN, B. Visualization and interactivity in the teaching of chemistry to science and non-science students. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 10, n. 1, p. 62–69, 2009.

WIJOYO, Y.; RAHAYU, G. R.; DWIPRAHASTO, I. Evaluation on Teaching Mentoring Program Based on. **Indian Journal of Pharmaceutical Education and Research**, v. 50, n. 2, 2016.

WOLF, M. E.; NORRIS, J. W.; FYNEWEVER, H.; TURNEY, J. M.; SCHAEFER III, N. F. An Undergraduate Chemistry Lab Exploring Computational Cost and Accuracy: Methane Combustion Energy. **Journal of Chemical Education**, v. 99, n. 3, p. 1479–1487, 8 mar. 2022.