

## **Estudo das qualidades pedagógicas dos programas ConQuest e Mercury no Ensino Superior de Química**

**Fábio Batista do Nascimento<sup>1</sup>, Mario Roberto Barro<sup>1</sup>, Javier Ellena<sup>2</sup> e Salete Linhares Queiroz<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos. Universidade de São Paulo. Brasil. E-mails: [fbnascimento@dq.ufscar.br](mailto:fbnascimento@dq.ufscar.br); [mrbarro@iqsc.usp.br](mailto:mrbarro@iqsc.usp.br); [salete@iqsc.usp.br](mailto:salete@iqsc.usp.br)

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos. Universidade de São Paulo. Brasil. E-mail: [javiere@if.sc.usp.br](mailto:javiere@if.sc.usp.br)

**Resumo:** Nas últimas décadas os computadores têm desempenhado importante papel no ensino. Neste trabalho apresentamos resultados obtidos a partir de uma atividade que serviu para avaliar dois programas computacionais que integram uma importante fonte de pesquisas em química, o Banco de Dados Cambridge Structural Database (CSD): ConQuest, utilizado para realização de buscas no CSD e Mercury, utilizado para a visualização de estruturas cristalográficas. O CSD apresenta informações sobre aproximadamente 423.000 estruturas cristalográficas de compostos orgânicos e organometálicos. O Classroom ConQuest, que é uma versão do ConQuest construída para emprego em ambientes de ensino e que foi usada neste trabalho, possui um banco de dados reduzido. Os programas foram avaliados quantitativa e qualitativamente por alunos de graduação matriculados em um curso de química inorgânica, no qual tiveram que solucionar alguns exercícios utilizando a base de dados e os programas ConQuest e Mercury. Os exercícios envolveram a extração e a manipulação de dados disponíveis no CSD. Os questionários de avaliação foram respondidos pelos alunos e mostraram que os programas podem auxiliar no entendimento dos conteúdos da disciplina. Além disso, muitos estudantes consideraram que a atividade os preparou para a utilização de outros bancos de dados e sugeriram que propostas similares poderiam ser aplicadas em disciplinas como cristalografia e química orgânica.

**Palavras-chave:** computadores, ensino superior, química.

**Title:** Study of Pedagogic Qualities of ConQuest and Mercury Programs in Undergraduate Chemistry Teaching

**Abstract:** For a few decades now, computers have played an increasing role in education. In this work we present the main results from an activity carried out to evaluate two programs that compose an important source of research in chemistry, Cambridge Structural Database (CSD): ConQuest, for searching CSD, and Mercury, for visualizing crystal structures. CSD contains details of approximately 423,000 published organic and organometallic crystal structures. Classroom ConQuest is a version of ConQuest, which has been designed for teaching activities and used in this work, comes with a reduced database. The programs were quantitatively and qualitatively evaluated by

undergraduate students who took an inorganic chemistry course in which they had to solve some inorganic exercises utilizing the database and the programs ConQuest and Mercury. The exercises involved extraction and manipulation of data from CSD. Evaluation questionnaires answered by the students showed that the programs are a valuable aid for content comprehension. Furthermore, many students were optimistic that the activity had prepared them for later use of databases in their chemistry courses and several said that similar activities may be used in courses such as crystallography and organic chemistry.

**Keywords:** computer-based learning, undergraduate education, chemistry.

### Introdução

Registros sobre o uso de recursos computacionais no ensino superior de química não são recentes, encontrando-se menções a respeito já na década de sessenta (Casanova e Weaver, 1965). Tais registros vêm crescendo substancialmente nos últimos anos, de tal forma que algumas revistas da área de educação em química dedicam seções exclusivamente ao assunto, como se verifica no *Journal of Chemical Education*, com as seções *JCE Software* e *WebWare*. A partir da análise de artigos publicados em tais revistas fica patente a utilização desses recursos em várias etapas do processo educacional, nas diversas áreas da química, visando o aprimoramento de habilidades importantes para a formação do graduando. Neste trabalho temos como objetivo o desenvolvimento de estudos sobre a efetividade de um recurso computacional que tem sido pouco explorado para o aprimoramento do ensino superior de química: o Banco de Dados Cambridge Structural Database – CSD (Davis et al., 2002). Nesta introdução apresentamos uma visão geral do uso de recursos computacionais no ensino de química e fazemos referência a aspectos relevantes do Banco de Dados.

Dentre as etapas do processo educacional em que os recursos computacionais podem ser utilizados, destaca-se na literatura o uso de computadores durante a ministração de aulas teóricas. Whitnell et al. (1994) apontam como principais vantagens que podem vir a resultar de tal emprego, a apresentação de conceitos, figuras, gráficos e esquemas de formas não acessíveis em aulas limitadas apenas à utilização do quadro-negro e o provável maior interesse dos estudantes no assunto, devido à natureza estimulante da própria aula. Com relação às aulas práticas de química, estas podem ser também beneficiadas através da utilização de recursos computacionais que venham a permitir, por exemplo, a realização de simulações de experimentos pelos alunos (Woodfield et al., 2004; Belletti et al., 2006). Em particular, quando a realização do trabalho prático oferece perigo ou necessita de um tempo considerável para execução, a simulação é extremamente útil. De forma semelhante, a utilização de programas de simulação para estudo de técnicas experimentais avançadas é valiosa, pois evita a necessidade de uso de equipamentos caros e por vezes inacessíveis ao aluno. Muitos exemplos desse tipo são mencionados na literatura, podendo-se aqui destacar os trabalhos

desenvolvidos por Masson (1996) e por Boodts et al. (1988), com relação às técnicas de raios-X de difração de pó e voltametria cíclica, respectivamente.

O processo que costuma suceder à aula, que é a etapa de estudos da matéria ministrada e realização de exercícios, também pode vir a ser aprimorada através do uso de computadores. Uma enorme gama de informações sobre diversos tópicos da química encontra-se à disposição dos estudantes via Internet e pode vir a ser explorada. Ademais, o oferecimento, também via Internet, de listas de exercícios e de outras informações relevantes para os estudantes pelos professores são também correntes. Nessa perspectiva, os objetivos buscados por meio do emprego de recursos computacionais nas disciplinas estão relacionados ao melhor entendimento dos assuntos ministrados, através da introdução, em aulas teóricas e práticas, de recursos de multimídia que proporcionem maior interatividade, estímulo e compreensão dos conceitos e que possibilitem a simulação de experimentos, a visualização de moléculas em três dimensões, a representação gráfica de funções X(Y) e as relações entre modelos matemáticos e os conceitos químicos a eles associados.

#### *O Banco de Dados Cristalográfico CSD*

O Banco de Dados Cristalográfico CSD é mantido pela Universidade de Cambridge e contém o resultado de aproximadamente 423.000 estruturas cristalográficas de compostos orgânicos e organometálicos analisadas ([http://www.ccdc.cam.ac.uk/support/documentation/csd/release/csds\\_release\\_portable-3-02.html](http://www.ccdc.cam.ac.uk/support/documentation/csd/release/csds_release_portable-3-02.html)). A sua modalidade construída para o uso pedagógico, utilizada nesta pesquisa, apresenta 11.300 estruturas solucionadas e pode ser instalada em tantos computadores do tipo PC (destinados ao ensino) quantos sejam necessários, desde que a instituição possua pelo menos uma licença oficial para utilização do CSD. A licença para utilização do Banco pode ser adquirida, gratuitamente, para instituições acadêmicas da América Latina junto ao *Consejo Superior de Investigaciones Científicas*, com sede na Espanha ([http://www.xtal.iqfr.csic.es/licencia\\_america.pdf](http://www.xtal.iqfr.csic.es/licencia_america.pdf)). Cabe destacar ainda que 17 instituições de ensino superior brasileiras, espalhadas por diversos pontos do país, já possuem a referida licença ([http://www.xtal.iqfr.csic.es/csd\\_iberamerica.html](http://www.xtal.iqfr.csic.es/csd_iberamerica.html)), o que torna possível a utilização dos resultados adquiridos na pesquisa aqui apresentada por tais instituições.

As informações contidas no CSD mostram-se úteis para o ensino nas várias áreas da química. No caso específico deste trabalho desenvolvemos estudos com relação à aplicação do Banco de Dados para o ensino da química de coordenação, que podem vir a ser aplicados no futuro em outras áreas. A química de coordenação, pela sua própria natureza, privilegia as questões estruturais nas discussões dos seus diversos tópicos. Abordagens de questões concernentes ao estudo de isomeria, retrodoação, efeito trans, efeito Jahn-Teller, por exemplo, podem ser substancialmente enriquecidas se é oferecida ao aluno a possibilidade de acessar dados estruturais de diversos compostos através da utilização do CSD.

A base de dados CSD é formada por um grupo de programas usados para o estudo de estruturas cristalográficas que trabalham em conjunto com um programa de busca chamado ConQuest e desempenham várias funções. A utilização do CSD pelos alunos pode ser resumidamente aqui definida como se constituindo em dois passos básicos capazes de auxiliá-los na resolução de diversos tipos de problemas propostos pelo professor: 1) O primeiro deles seria a utilização do programa de busca ConQuest, que os habilitaria a localizar dentro do banco de dados estruturas cristalográficas de moléculas do seu interesse ou segundo a orientação do professor (a busca pode ser feita tomando por base o nome do composto, a sua fórmula química, informações cristalográficas, informações bibliográficas, entre outras opções); 2) O segundo passo seria a utilização pelos alunos do programa Mercury, que permite a visualização detalhada da estrutura molecular localizada no programa de busca ConQuest e a sua exploração e manipulação na busca da resolução de problemas propostos pelo professor. A visualização tridimensional das moléculas em estudo e também a capacidade de desenvolvimento da análise das ligações químicas nelas presentes são extremamente valiosas para a compreensão de vários aspectos relevantes da química. A apresentação mais detalhada dos programas acima mencionados encontra-se a seguir.

### ConQuest

O programa ConQuest é responsável pela procura e obtenção das informações contidas na base de dados CSD (Bruno et al., 2002). Essas pesquisas podem ser feitas através de informações gerais (numéricas/texto). O ConQuest apresenta a seguinte interface ao usuário:

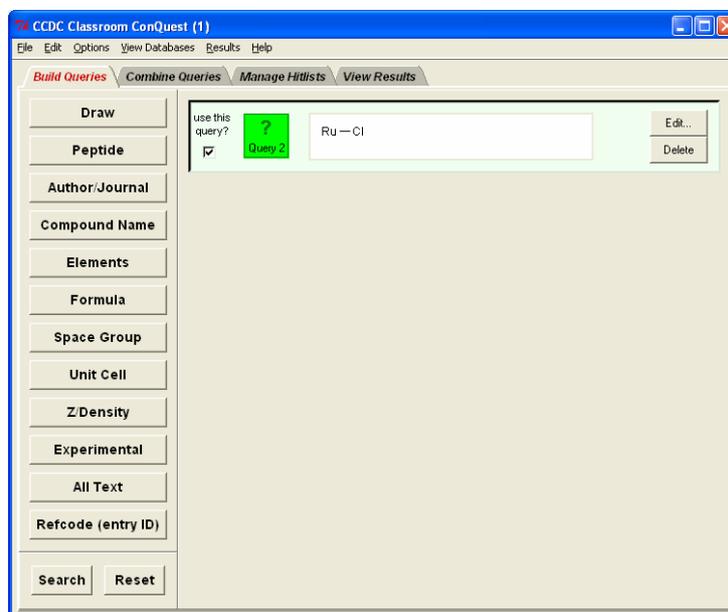


Figura 1.- A ilustração mostra como é a interface do programa ConQuest ao usuário do CSD. É mostrado, ao lado esquerdo da figura, o menu, com as caixas de diálogo com as quais são criadas as entradas para as buscas.

As caixas de diálogo da figura 1 permitem os seguintes caminhos de busca a partir: do nome do composto; da fórmula química do composto; dos elementos químicos que constituem o composto; das referências bibliográficas que mencionam o composto; do grupo espacial do composto; dos parâmetros da cela unitária do composto; da densidade do composto; do desenho de um fragmento molecular presente na estrutura do composto. Para cada uma dessas entradas, é montado um "Query" (pesquisa) onde ficam armazenados os dados que serão lidos pelo programa.

Um recurso muito utilizado para a procura por estruturas é o desenho do fragmento molecular. A caixa de diálogo dessa opção é a chamada "Draw" (desenho), mostrada na figura 2. A figura 2 mostra também quais são os principais recursos do Draw.

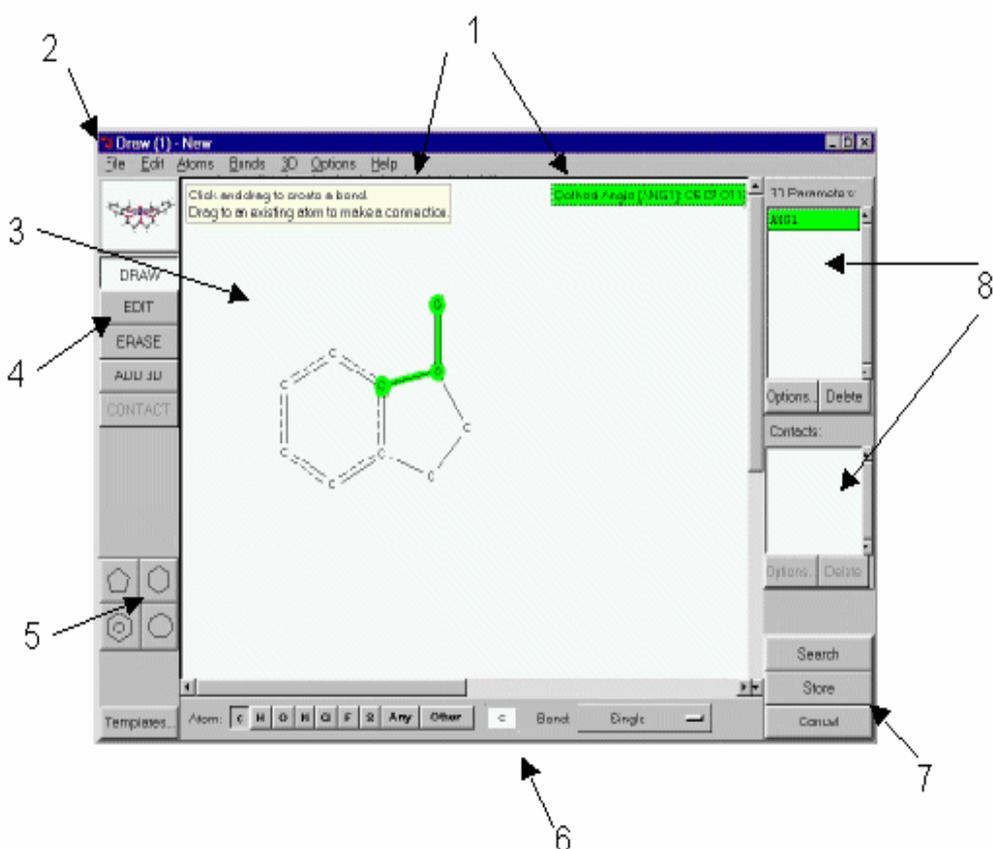
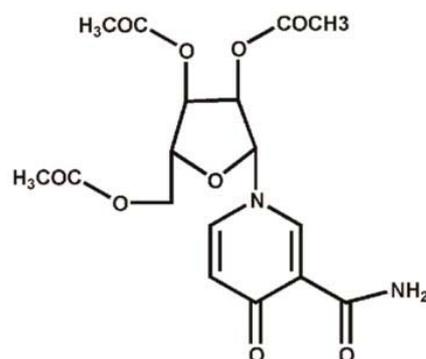


Figura 2.- Interface da janela Draw para procura no CSD. Em: 1- mensagens de ajuda; 2 - menu principal; 3 - área de desenho; 4 - botões de modo; 5 - auxílio para desenho com modelos prontos; 6 - área para mudança de elemento químico e tipo de ligação; 7 - botões que comandam a pesquisa; 8 - área reservada para mostrar os parâmetros que estão sendo calculados pelo programa, como distâncias e/ou ângulos.

O esquema apresentado na figura 3, extraído do trabalho de Allen (2002), ilustra as informações que a base de dados, através do programa ConQuest, pode fornecer.

BASYOJ  
4-Oxonicotinamide-1-(1'-beta-D-2',3',5'-tri-O-acetyl-ribofuranoside)  
Source: Rothmannia longiflora  
C17 H20 N2 O9  
G.Bringmann,M.Ochse,K.Wolf,J.Kraus,  
K.Peters,E.-M.Peters,M.Herderich,  
L.Ake Assi, F.S.K.Tayman  
*Phytochemistry* (1999) **51**, 271.  
Melting Point: 198-201 deg.C.  
P212121  
a 8.218 b 13.783 c 16.303  
alpha 90.0 beta 90.0 gamma 90.0  
R = 5.6%

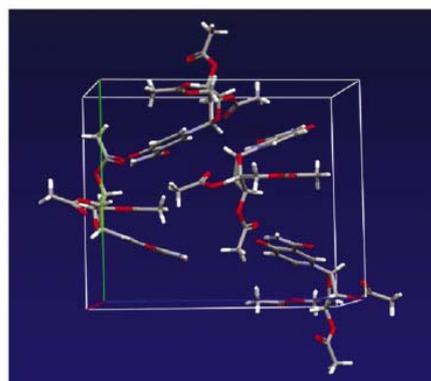
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3.- A base de dados fornece ao usuário as informações mostradas no esquema acima. (a) informação bibliográfica; (b) estrutura química plana; (c) estrutura tridimensional da molécula, com todos os seus parâmetros geométricos; (d) estrutura cristalina em três dimensões, que contém todas as informações cristalográficas sobre o composto, inclusive condições experimentais de coleta de dados para sua resolução (Allen, 2002).

### Mercury

O programa Mercury possibilita o estudo e visualização da estrutura cristalina (Macrae et al., 2006). Entre as facilidades para visualização da estrutura cristalina em três dimensões estão: grande número de possibilidades de visualização de estruturas, variedade de cores e estilos; é possível constatar a existência de ligações do tipo pontes de hidrogênio, além de outros tipos de interações intermoleculares tanto fortes quanto fracas; a visão é expansível para um fragmento da rede, permitindo assim uma melhor observação das interações intermoleculares; visualiza-se o número e a posição das estruturas dentro da cela unitária; medição de parâmetros geométricos. A figura 4 mostra um exemplo de saída gerada pelo programa Mercury.

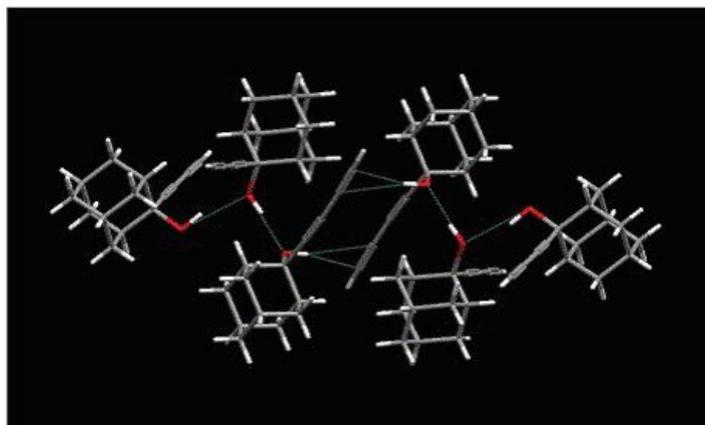


Figura 4.- Duas unidades assimétricas obtidas pela pesquisa no CSD, via programa ConQuest, visualizadas no programa Mercury.

### Metodologia de coleta e análise dos dados

Conforme mencionamos anteriormente, o presente trabalho foi realizado com o intuito de promover um estudo sobre as potencialidades pedagógicas dos programas ConQuest e Mercury. Para tanto, 41 alunos matriculados na disciplina de química inorgânica de um curso de bacharelado em química de uma universidade estadual paulista receberam um manual de instruções sobre a utilização dos programas (acessível em [http://www.iqsc.usp.br/pesquisa/ensinoquimica/?page\\_id=154](http://www.iqsc.usp.br/pesquisa/ensinoquimica/?page_id=154)), elaborado por dois dos autores deste artigo, assistiram a uma aula tutorial e resolveram problemas cujas resoluções eram alcançadas unicamente via Banco de Dados CSD. A aula tutorial foi realizada na sala de computadores da graduação da universidade e tinha como objetivo propiciar um primeiro contato dos estudantes com os programas e suas funções. Após a aula tutorial foi entregue aos alunos uma lista de exercícios contendo problemas que abordavam os seguintes assuntos: efeito Jahn-Teller, isomerismo, série espectroquímica, número de coordenação, estado de oxidação dos metais, soma e configuração eletrônica dos elétrons d, geometria dos compostos, teoria de ligação de valência, teoria do campo cristalino e retrodoação. O professor determinou o prazo de um mês para a sua devolução e, neste intervalo de tempo, o esclarecimento de dúvidas dos alunos, pertinentes à utilização dos programas, foram sanadas a partir da realização de monitorias semanais.

Alguns exemplos de problemas solucionados pelos alunos encontram-se no Anexo A. Após a resolução dos problemas os alunos responderam a dois questionários de avaliação dos programas (um para cada programa). Cada um dos questionários possuía 25 afirmações, sendo as três primeiras relacionadas mais estreitamente à natureza de cada um dos programas e as restantes, de caráter geral, aplicáveis aos dois programas.

Tanto a elaboração dos questionários quanto a análise dos resultados obtidos a partir da aplicação dos mesmos foram realizadas tomando como referencial teórico o trabalho de Behar (1993) que sugere uma metodologia

para avaliação de programas educacionais, no que diz respeito à Qualidade Pedagógica, e considera aspectos como *a motivação* e *as atitudes* do aluno durante a utilização do programa. A *atenção/dispersão* do aluno para a realização de uma tarefa, que pode ser evidenciada por suas decisões de parar (ou não) constantemente um projeto/tarefa em desenvolvimento no computador, encontra-se relacionada ao item *motivação*. Também relacionados ao item *motivação* estão a *flexibilidade* do aluno nos trabalhos com o programa e o seu *interesse* na utilização dos mesmos. A *flexibilidade* refere-se à adequação que o aluno faz do uso do computador frente a uma necessidade e o *interesse* é um estado de motivação que guia o comportamento em uma certa direção ou para satisfazer certos objetivos. Particularmente, no computador, este último aspecto é demonstrado através da necessidade que o aluno tem em conhecer os comandos, experimentar o desconhecido, buscando informações, manuseando o equipamento e o sistema. No que diz respeito ao item *atitudes*, cabe colocar que atitude é a reação afetiva, maior ou menor, em direção a uma proposição ou a um determinado objeto concreto ou abstrato. As atitudes dos sujeitos da pesquisa investigadas, com relação ao uso dos programas, foram as seguintes: *autonomia/dependência* (a autonomia é um comportamento do indivíduo no qual ele manifesta sua capacidade de auto governar-se. Obedece as leis que formulou para si mesmo ou aquelas cujo valor compreendeu e aceitou. Por outro lado, encontra-se o conceito de dependência, onde o indivíduo sente necessidade de ser governado e orientado); *iniciativa/falta de iniciativa* (a iniciativa é considerada a habilidade de tomar as próprias decisões, agir por si só. No uso do computador, o aspecto da falta de iniciativa é evidenciado por atitudes de espera em relação ao que fazer, como proceder, entre outras coisas); *satisfação/insatisfação* (a satisfação se reflete através de um estado de prazer e/ou bem-estar. No caso da programação, este aspecto pode ser evidenciado por gestos ou verbalização em relação ao trabalho realizado); *segurança/insegurança* (no uso do computador, a insegurança pode se manifestar pelo receio de experimentar, pelo medo de errar); *desinibição/retrimento* (no uso do computador, a desinibição é evidenciada pela curiosidade em experimentar, realizar, executar tarefas explorando comandos de forma independente. Por outro lado, o retrimento é um estado de bloqueio mental e/ou comportamental frente ao agir); *descontração/tensão* (a descontração evidencia-se pelo fato do indivíduo se sentir à vontade frente a qualquer situação, durante a utilização do sistema em questão. A tensão nada mais é que a condição de ansiedade e intranquilidade).

Ainda no contexto da avaliação da Qualidade Pedagógica dos programas ConQuest e Mercury, e fazendo uma adaptação da proposta de Behar (1993) para a realidade do trabalho aqui apresentado, foram analisadas respostas dos alunos relacionadas especificamente a questões que dizem respeito ao desenvolvimento de habilidades na área de química, como aprimoramento de visão espacial e compreensão de conceitos relacionados a conteúdos desta área.

Além da avaliação quantitativa, realizada com base nas respostas dadas às afirmações presentes nos questionários, os programas foram submetidos a uma avaliação qualitativa, através do registro de depoimentos espontâneos dos alunos, coletados a partir da seguinte questão aberta:

*Expresse abaixo sua opinião em relação à utilização do programa Classroom ConQuest/Mercury.*

A partir dos instrumentos apresentados foi feita a avaliação dos programas Classroom ConQuest e Mercury.

## **Resultados e discussão**

### *Avaliação quantitativa dos programas Classroom ConQuest e Mercury*

Como instrumentos de coleta de dados foram usados os dois questionários anteriormente mencionados. A partir da análise das respostas dadas aos questionários serão destacados os aspectos dos programas avaliados positiva e negativamente pelos usuários. Desta forma, são adquiridos indícios sobre a viabilidade do seu uso no meio educacional.

Os dados resultantes da aplicação dos questionários, de uma forma geral, foram distribuídos segundo a ocorrência das alternativas escolhidas nas questões. Este tipo de tratamento tem como principal meta fornecer parâmetros genéricos de análise e indicar tendências gerais apresentadas pelos alunos.

Os questionários são compostos por 25 afirmações, cabe recordar que ambos diferem apenas nas três primeiras. Assim, abaixo se encontram elencadas estas afirmações iniciais para cada um dos programas e, em seguida, as demais.

- Afirmações presentes apenas no questionário de avaliação do programa Classroom ConQuest:

- 1) O programa me ajudou a desenvolver noções que posso utilizar para fazer buscas em outras bases de dados.

- 2) O programa me permite localizar a informação que necessito rapidamente.

- 3) Através do programa aprendi como fazer buscas por referências bibliográficas.

- Afirmações presentes apenas no questionário de avaliação do programa Mercury:

- 1) A utilização do programa melhorou a minha habilidade de visualização espacial.

- 2) A possibilidade de medidas de ângulos e comprimentos de ligação oferecida pelo programa pode favorecer a minha compreensão de conceitos de química de coordenação.

3) A visualização das moléculas em três dimensões pode permitir uma melhor compreensão de conceitos de química de coordenação.

• Afirmações presentes nos questionários de avaliação dos programas Classroom ConQuest e Mercury:

4) O programa me forneceu informações que me ajudaram a melhorar o meu conhecimento sobre química de coordenação.

5) É muito estimulante utilizar o programa.

6) O programa me proporcionou a oportunidade de poder aprender e me exercitar de forma ininterrupta, até eu me sentir satisfeito com as respostas.

7) Em alguns momentos perdi a motivação de continuar trabalhando com o programa, pois não é fácil de usá-lo.

8) Achei que o uso do programa estimula o estudante na sua aprendizagem.

9) A utilização deste tipo de recurso tem vantagens sobre textos.

10) Este programa não me trouxe nada de novo e motivador.

11) O que aprendi com o programa tem pouco uso prático.

12) Não gostei do que aprendi com o programa.

13) O programa me permitiu fazer exercícios muito significativos.

14) O nível de exigência do programa é muito alto.

15) NÃO foram suficientes as minhas noções computacionais para poder explorar o programa e suas potencialidades.

16) A aprendizagem proporcionada pelo programa foi válida.

17) Utilizando o programa, aprendi conceitos e noções que ainda NÃO tinha compreendido.

18) O programa é de fácil manuseio.

19) As cores utilizadas no programa mantêm a atenção do aluno.

20) As letras utilizadas são fáceis de ler.

21) As janelas e os menus descendentes me deixavam confuso.

22) Gostei da forma como é apresentado o programa.

23) O programa apresenta muitas informações por tela.

24) Gostei de aprender a trabalhar com recursos e técnicas que anteriormente não tinha trabalhado.

25) Gostaria de participar novamente de experiências e utilizar materiais educacionais computadorizados direcionados a disciplinas de química.

A partir das respostas dadas pelos estudantes a essas questões, foi possível elaborar as tabelas 1 e 2, nas quais a descrição item se refere ao número dado anteriormente a cada uma das questões. A descrição *Polaridade* se refere ao caráter positivo ou negativo da questão. Por exemplo, a questão 7, indicada

como item 7, tem *Polaridade* negativa. A frequência com que as opções de resposta, expressas em escala Likert (5 pontos, variando entre concordo totalmente e discordo totalmente), foram verificadas nos questionários encontra-se indicada, em porcentagem, como CT (Concordo Totalmente), CP (Concordo Parcialmente), I (Indeciso), DP (Discordo Parcialmente) e DT (Discordo Totalmente).

Com relação à polaridade de cada questão, quando positiva, a concordância com a questão expressa uma opinião favorável ao programa e sua utilização e a discordância expressa uma opinião desfavorável. Quando negativa a concordância com a questão expressa uma opinião desfavorável ao programa e sua utilização e a discordância expressa uma opinião favorável.

Em uma análise geral das tabelas 1 e 2, sem considerar os Itens 24 e 25, que não dizem respeito diretamente à utilização dos programas, e excluindo-se também o item 23 de cada tabela, pode-se constatar que nos Itens restantes, mais de 60% dos estudantes registraram respostas favoráveis (somatório das respostas concordo totalmente e concordo parcialmente, ou de respostas discordo totalmente e discordo parcialmente, de acordo com a polaridade).

Os Itens 24 e 25 questionam, respectivamente, os alunos a respeito de terem gostado, ou não, de trabalhar com recursos computacionais e se gostariam de participar de outras atividades que envolvessem ferramentas computacionais. Para estas afirmações 100 e 86,84% dos estudantes apresentaram respostas favoráveis no questionário relativo ao programa ConQuest enquanto que no relativo ao programa Mercury 92,11 e 86,84% apresentaram respostas favoráveis. Isso indica que a atividade foi apreciada pelos estudantes, e que estes são receptivos à utilização de recursos computacionais. Ou seja, a solicitação de tarefas que envolvam o uso de tais recursos não parece ser de difícil aceitação entre os estudantes e podem contribuir ao longo do curso de graduação.

Na tabela 1, para os Itens 1, 2 e 3, que tratam sobre a natureza do programa ConQuest (busca por compostos e suas referências), verifica-se que mais de 81,58% dos estudantes no item 3, 97,37% e 92,11% nos Itens 1 e 2, respectivamente, registraram respostas favoráveis. Estes Itens tratam respectivamente se o programa ajudou o estudante a desenvolver noções que possam ser utilizadas para fazer buscas em outras bases de dados, se o programa permite a localização das informações desejadas rapidamente e se através do programa o estudante aprendeu como fazer buscas por referências bibliográficas. Isso indica que através da realização das buscas no programa Classroom ConQuest os estudantes desenvolveram habilidades, como a busca de referências em base de dados digitais, consideradas importantes na formação dos estudantes de química. Além disso, a alta porcentagem de respostas favoráveis registrada no item 2 aponta que o programa permite com rapidez a localização das informações desejadas.

O item 4 refere-se à contribuição do programa para a melhora dos conhecimentos em química de coordenação pelos alunos. Neste item 89,48% dos estudantes registraram respostas favoráveis. Isso indica a acentuada

possibilidade de utilização do programa para a aprendizagem, apoiando o entendimento dos conteúdos estudados e contribuindo para a resolução dos problemas propostos.

As afirmações correspondentes dos Itens 5 ao item 10 estão relacionadas com a motivação do estudante na utilização do programa. Os Itens 5 e 8 tratam do estímulo que o programa provoca no estudante na sua utilização e aprendizagem, no qual 76,32% dos estudantes consideram estimulante utilizar o programa e 86,85% afirmam que o programa os estimula a aprender. O item 6 está relacionado com a satisfação do estudante em aprender e conseguir as respostas desejadas de forma ininterrupta, 71,06% dos estudantes são favoráveis a esta afirmação. Entre eles o item 7 está relacionado com a facilidade na sua utilização, para este item observamos que 78,95% dos estudantes consideram o programa de fácil utilização. O item 9 afirma que o uso de programas computacionais tem vantagem sobre textos no processo de ensino/aprendizagem, 84,21% dos estudantes concordam com esta afirmação. O item 10 trata de uma afirmação de polaridade negativa que relata que o programa não traz nada de motivador ao estudante, 97,37% dos estudantes responderam negativamente a esta afirmação, caracterizando então sua resposta favorável à utilização do programa. Isso indica que a facilidade na utilização do programa, aliado ao estímulo que o mesmo proporcionou ao seu uso e aprendizagem, indicado pelos altos índices de respostas favoráveis a estes Itens, contribuíram na motivação do aluno para o uso do programa na disciplina.

Dos Itens 11 ao 16 observamos afirmações que se relacionam a atitude dos estudantes em relação ao uso do programa. Os Itens 11, 12 e 16 estão diretamente relacionados com a aprendizagem proporcionada pelo programa. Os Itens 11 e 12 são de polaridade negativa, e afirmam, respectivamente, que o que se aprende através do programa tem pouco uso prático e não gostei do que aprendi com este programa. No item 11, 81,58% dos estudantes discordaram da afirmação e no item 12, 94,74%. Já no item 16 observamos que 97,37% dos estudantes afirmaram que a aprendizagem proporcionada pelo programa foi válida. No item 13, que se refere à possibilidade oferecida pelo programa para a realização de exercícios significativos, 92,11% dos estudantes expressaram respostas favoráveis. No item 14, 73,69% dos estudantes não consideraram o nível de exigência do programa muito alto e no item 15, 89,48% dos estudantes consideraram que suas noções computacionais foram suficientes para explorar o programa e suas potencialidades. Isso indica que os estudantes apresentaram atitudes favoráveis à utilização do programa, principalmente por terem gostado do que aprenderam com ele. As respostas favoráveis a estes Itens indicam também que os estudantes consideraram significativos os exercícios por eles resolvidos através do programa, e que consideraram a aprendizagem através do mesmo válida e de uso prático.

O item 17, à semelhança do item 4, diz respeito ao entendimento, através do programa, de conceitos que ainda não haviam sido compreendidos. Também apresenta um índice de aprovação animador de 68,42%, que

corroborar a utilidade do programa como facilitador da aprendizagem de conceitos.

Item	Polaridade	CT	CP	I	DP	DT
1	+	52,63%	44,74%	2,63%	0,0%	0,0%
2	+	52,64%	39,47%	2,63%	5,26%	0,0%
3	+	57,89%	23,69%	2,63%	10,53%	5,26%
4	+	50,00%	39,48%	5,26%	5,26%	0,0%
5	+	28,95%	47,37%	13,16%	10,52%	0,0%
6	+	26,32%	44,74%	21,05%	7,89%	0,0%
7	-	2,63%	13,16%	5,26%	26,32%	52,63%
8	+	50,00%	36,85%	7,89%	5,26%	0,0%
9	+	47,37%	36,84%	10,53%	5,26%	0,0%
10	-	0,0%	0,0%	2,63%	15,79%	81,58%
11	-	2,63%	10,53%	5,26%	23,69%	57,89%
12	-	0,0%	0,0%	5,26%	10,53%	84,21%
13	+	50,00%	42,11%	5,26%	2,63%	0,0%
14	-	0,0%	7,89%	18,42%	28,95%	44,74%
15	-	2,63%	7,89%	0,0%	15,79%	73,69%
16	+	81,58%	15,79%	0,0%	0,0%	2,63%
17	+	18,42%	50,00%	10,53%	18,42%	2,63%
18	+	50,00%	39,48%	2,63%	7,89%	0,0%
19	+	31,58%	28,95%	28,95%	10,52%	0,0%
20	+	52,63%	31,58%	10,53%	0,0%	5,26%
21	-	2,63%	10,53%	2,63%	36,84%	47,37%
22	+	42,11%	50,00%	5,26%	2,63%	0,0%
23	-	18,42%	21,05%	15,79%	34,21%	10,53%
24	+	78,95%	21,05%	0,0%	0,0%	0,0%
25	+	65,79%	21,05%	10,53%	2,63%	0,0%

Tabela 1. - Respostas dadas ao Questionário de Avaliação do Programa Classroom ConQuest. CT = Concordo Totalmente, CP = Concordo Parcialmente, I = Indeciso, DP = Discordo Parcialmente, DT = Discordo Totalmente.

Os Itens 18 a 23 estão relacionados com o manuseio, a apresentação e linguagem do programa. No item 18 os alunos são questionados sobre a facilidade de manuseio do programa, tendo-se verificado um índice de aprovação de 89,48%. No item 19 apenas 60,53% dos estudantes consideraram que as cores utilizadas pelo programa mantêm a atenção do aluno. Cabe ressaltar que esta afirmação foi a que apresentou o maior número de alunos indecisos (28,95%). No item 20, 84,21% dos estudantes concordaram que as letras apresentadas no programa são fáceis de ler. No item 21, 84,21% dos estudantes consideraram que as janelas e menus descendentes apresentados pelo programa não os deixaram confusos. Semelhantemente, no item 22, 92,11% dos estudantes discordaram que as janelas e menus descendentes os deixavam confusos. O item 23 foi o que apresentou o maior índice de desaprovação, apenas 44,74% dos estudantes apontaram que o programa não apresenta muitas informações por tela. Este é um item relevante na avaliação do programa, pois em virtude da grande quantidade de informações apresentadas em cada tela o aluno pode se sentir confuso, cansado ou disperso enquanto estiver utilizando o programa.

Apesar das respostas desfavoráveis aos Itens 19 e 23, no item 22, 92,11% dos alunos afirmaram ter gostado da forma como o programa é apresentado. Isso indica que os alunos acharam fácil manusear o programa, gostaram das cores utilizadas e acharam que elas mantêm a atenção, consideraram as letras fáceis de ler, não se sentiram confusos durante sua utilização apesar de afirmarem que o programa apresenta muitas informações por tela e gostaram da forma com que o programa é apresentado.

Nos Itens 1, 2 e 3 da tabela 2, que tratam da natureza do programa Mercury (visualização e acesso a parâmetros geométricos), verifica-se que mais de 90% dos estudantes apresentaram respostas favoráveis. Estes três Itens estão respectivamente relacionados com a melhora da habilidade de visão espacial através do programa, o acesso a parâmetros geométricos, melhorando o entendimento de conceitos relacionados à química de coordenação, e a possibilidade de visualizar as estruturas em três dimensões permitindo também uma melhor compreensão de conceitos. Isso indica que as várias possibilidades oferecidas pelo programa contribuíram na aprendizagem de conceitos, referentes à química de coordenação, apoiando o entendimento dos conteúdos estudados e contribuindo para a resolução dos problemas propostos na disciplina, o que, ao nosso ver, é relevante, pois nos oferece indícios para concluir que seu uso torna mais efetivo o processo de ensino-aprendizagem.

O item 4 refere-se à contribuição do programa para o melhor entendimento dos conteúdos em química de coordenação. Neste item 94,74% dos estudantes registraram respostas favoráveis. A alta porcentagem de respostas favoráveis a este item reforça o que é indicado em relação aos Itens 1, 2 e 3, pois também indica o entendimento dos conteúdos estudados na disciplina e a contribuição efetiva do programa Mercury para a resolução dos problemas propostos.

As afirmações do item 5 ao 10 estão relacionados com a motivação do estudante na utilização do programa. Os Itens 5 e 8 tratam do estímulo proporcionado pelo programa, do ponto de vista da utilização e da aprendizagem. No que diz respeito à utilização, 84,21% dos estudantes apresentaram respostas favoráveis e do ponto de vista da aprendizagem, 89,48% de respostas favoráveis. O item 6 está relacionado com a satisfação do estudante em aprender e conseguir as respostas desejadas de forma ininterrupta. Para esta afirmação 84,21% dos estudantes assinalaram respostas favoráveis. O item 7 está relacionado com a facilidade de utilização do programa e foi observado um índice de aprovação de 86,84%. O item 9 afirma que o uso de programas computacionais tem vantagem sobre textos no processo de ensino-aprendizagem, 86,85% dos estudantes concordaram com esta afirmação. O item 10 trata de uma afirmação de polaridade negativa que relata que o programa não traz nada de motivador ao estudante, como observado na avaliação do programa Classroom ConQuest, 97,37% dos estudantes responderam negativamente a esta afirmação caracterizando então sua resposta favorável à utilização do programa. Isso indica que a facilidade na utilização do programa, aliado ao estímulo que o mesmo proporciona ao seu uso e a aprendizagem através dele, indicado pelos altos índices de respostas favoráveis a estes Itens, contribuíram na motivação do aluno para o uso do programa na disciplina.

Do item 11 ao 16 observamos afirmações que se relacionam a atitude dos estudantes em relação ao uso do programa. Os Itens 11, 12 e 16 estão diretamente relacionados com a aprendizagem proporcionada pelo programa. Os Itens 11 e 12 são de polaridade negativa, e afirmam, respectivamente, que o que se aprende através do programa tem pouco uso prático e não gostei do que aprendi com este programa. Para o item 11, 92,11% dos estudantes foram desfavoráveis à afirmação e para o item 12, verificamos que todos eles (100%) foram contrários à afirmação. Assim como no item 12, no item 16, 100% dos estudantes afirmaram que a aprendizagem proporcionada pelo programa foi válida. No item 13, que se refere aos exercícios realizados através do programa serem significativos, 89,47% dos estudantes expressaram respostas favoráveis. No item 14 temos que 78,95% dos estudantes não consideraram o nível de exigência do programa muito alto e no item 15, 92,11% dos estudantes consideraram que suas noções computacionais foram suficientes para explorar o programa e suas potencialidades. Isso indica que os estudantes apresentaram atitudes favoráveis à utilização do programa Mercury, e que gostaram do que aprenderam com ele. As respostas favoráveis a estes Itens indicam também que os estudantes consideraram que através dele puderam resolver exercícios significativos e que o mesmo proporcionou uma aprendizagem válida.

O item 17, à semelhança do item 4, diz respeito ao entendimento, através do programa, de conceitos que ainda não haviam sido compreendidos. Também apresenta um índice de aprovação animador, 71,06%, que corrobora a utilidade do programa como facilitador da aprendizagem de conceitos.

Item	Polaridade	CT	CP	I	DP	DT
1	+	60,53%	31,58%	2,63%	0,0%	5,26%
2	+	78,95%	18,42%	0,0%	2,63%	0,0%
3	+	71,06%	21,05%	5,26%	2,63%	0,0%
4	+	57,89%	36,85%	2,63%	2,63%	0,0%
5	+	39,47%	44,74%	10,53%	5,26%	0,0%
6	+	23,68%	60,53%	13,16%	2,63%	0,0%
7	-	0,0%	13,16%	0,0%	28,95%	57,89%
8	+	60,53%	28,95%	10,52%	0,0%	0,0%
9	+	44,74%	42,11%	5,26%	7,89%	0,0%
10	-	0,0%	0,0%	2,63%	15,79%	81,58%
11	-	0,0%	2,63%	5,26%	15,79%	76,32%
12	-	0,0%	0,0%	0,0%	5,26%	94,74%
13	+	39,47%	50,00%	10,53%	0,0%	0,0%
14	-	0,0%	5,26%	15,79%	31,58%	47,37%
15	-	2,63%	5,26%	0,0%	15,79%	76,32%
16	+	84,21%	15,79%	0,0%	0,0%	0,0%
17	+	26,32%	44,74%	13,16%	10,53%	5,25%
18	+	50,00%	39,48%	5,26%	5,26%	0,0%
19	+	28,95%	47,37%	18,42%	2,63%	2,63%
20	+	42,11%	42,11%	10,52%	2,63%	2,63%
21	-	0,0%	10,53%	7,89%	28,95%	52,63%
22	+	34,22%	57,89%	5,26%	2,63%	0,0%
23	-	10,53%	13,16%	21,05%	34,21%	21,05%
24	+	81,58%	10,53%	5,26%	0,0%	2,63%
25	+	71,05%	15,79%	10,53%	2,63%	0,0%

Tabela 2. - Respostas dadas ao Questionário de Avaliação do Programa Mercury. CT= Concordo Totalmente, CP= Concordo Parcialmente, I= Indeciso, DP= Discordo Parcialmente, DT= Discordo Totalmente.

Os Itens 18 a 23 estão relacionados com o manuseio, a apresentação e linguagem do programa. No item 18, os alunos são questionados sobre a facilidade de manuseio do programa, tendo-se verificado um índice de aprovação idêntico ao do Classroom ConQuest de 89,48%. No item 19, 76,32% dos estudantes consideraram que as cores utilizadas pelo programa mantêm a atenção do aluno. Cabe ressaltar que esta afirmação foi a que apresentou o maior número de alunos indecisos (18,42%). No item 20, 84,22% dos estudantes concordaram que as letras apresentadas no programa são fáceis de ler. No item 21, 81,58% dos estudantes consideraram que as janelas e menus descendentes apresentados pelo programa não os deixaram confusos. Semelhantemente, no item 22, 92,11% dos estudantes discordaram que as janelas e menus descendentes os deixavam confusos. Igualmente à avaliação do Classroom ConQuest, o item 23, do questionário relativo ao Mercury, foi o que apresentou o resultado mais desfavorável ao programa, apenas 55,26% dos estudantes apontaram que o programa não apresenta muitas informações por tela. Este é um item importante, pois em virtude da quantidade de informações apresentadas em cada tela o aluno pode se sentir confuso, cansado ou disperso enquanto estiver utilizando o programa. Apesar do índice de respostas favoráveis ao item 23 ter sido baixo, no item 22, 92,11% dos alunos indicaram ter apreciado a forma com que o programa é apresentado. Cabe ressaltar que o mesmo resultado foi obtido neste item para o programa Classroom ConQuest. Semelhante à avaliação das mesmas afirmações destinadas ao Classroom ConQuest, os alunos acharam fácil manusear o programa, gostaram das cores utilizadas e acharam que elas mantêm a atenção, consideraram as letras fáceis de ler e não se sentiram confusos durante sua utilização. Apesar de afirmarem que o programa apresenta muitas informações por tela, gostaram da forma como é apresentado.

#### *Análise qualitativa dos programas Classroom ConQuest e Mercury*

A análise qualitativa dos programas foi realizada a partir da categorização das respostas dos alunos à questão aberta, através da qual os estudantes puderam expressar suas opiniões em relação a utilização dos programas Classroom ConQuest e Mercury. Na maioria das vezes estas respostas reforçam as impressões já constatadas na análise das respostas ao questionário de avaliação pedagógica dos programas.

As respostas foram reunidas em categorias que revelam aspectos mais enfatizados nas respostas dos estudantes. Naturalmente, muitas destas declarações são abrangentes e podem ser localizadas em mais de uma categoria. A apresentação das respostas categorizadas segundo o programa a que se referem é feita a seguir.

#### *Classroom ConQuest*

- Facilidade e rapidez no acesso as informações

“O ConQuest é um programa de fácil uso, podendo ser usado por pessoas que tenham noções mínimas computacionais. Não dispensa a presença de

um profissional capacitado para dar-nos os conhecimentos químicos necessários para a utilização do programa”.

“O programa é muito bom e fácil de ser usado. Permite rápido acesso às informações desejadas”.

“Logicamente, após a instrução e fornecimento da apostila, o programa foi de fácil manuseio, necessitando apenas de uma hora e depois treino para aprender, na prática, o funcionamento. As variadas opções enriquecem o programa”.

- Opções de busca e qualidade de informações

“O programa não é complicado, é fácil encontrar o que desejamos e possui várias opções de buscas, os elementos encontrados possuem várias informações importantes, descrevendo-os com detalhes e o desenho do elemento é fácil de visualizar e aprender”.

“Este programa facilitou a procura de compostos através de suas ferramentas para a busca das moléculas, sendo feito isto de forma rápida. E também, este programa permite o englobamento de várias informações como artigos, revistas e o banco de dados”.

“Bom programa para pesquisar moléculas e compostos através de vários tópicos, que inclusive podem ser utilizados para fazer uma pesquisa unificada”.

- Utilidade do programa em outras disciplinas da área de química

“O programa é útil para diversas disciplinas, inclusive para a elaboração de relatórios das disciplinas de laboratório. Massa molar, forma cristalina e constantes físico-químicas podem ser facilmente encontradas para o composto em questão”.

“É útil para ser usado nas demais disciplinas como laboratório de inorgânica e cristalografia”.

- Compreensão de conceitos

“A utilização do programa permitiu um aperfeiçoamento na teoria já aprendida em sala, e é um programa de fácil manuseio”.

“A utilização do ConQuest foi fundamental na disciplina, porque através do programa conseguimos aprender conceitos muito importantes de uma maneira descontraída”.

“A utilização do programa na resolução da lista de exercícios foi de grande utilidade, pois me incentivou no aprendizado da matéria. O programa é de fácil manuseio e muito bom”.

Alguns estudantes expressaram também algumas dificuldades encontradas na utilização do programa, que estão detalhadas nos depoimentos a seguir. Estas considerações são importantes, pois em uma próxima aplicação do material podemos enfatizar mais estas funções, para propiciar uma melhor utilização do programa pelos alunos.

“Não achei simples utilizar o programa ConQuest, pois tive dificuldades em combinar buscas para encontrar os compostos. Assim, os resultados de boa parte das buscas eram muito extensos, dificultando o trabalho”.

“Algumas coisas da opção Draw poderiam ser mais facilitadas, como ligar os átomos, isso precisa de um pouco de treino”.

“A minha queixa sobre o ConQuest, é que não consegui imprimir as fórmulas das moléculas, achei o caminho muito trabalhoso”.

### *Mercury*

Através da análise das respostas dos estudantes pode ser observado que, quase na sua totalidade, eles chamaram atenção sobre a possibilidade de visualização espacial e o acesso aos parâmetros geométricos de cada molécula como sendo um agente facilitador da aprendizagem.

- Facilidade e motivação na utilização

“O programa é bastante motivador já que permite ao aluno trabalhar com várias moléculas, podendo analisar cada uma delas em seus detalhes, incentivando o interesse do aluno que, às vezes, fica muito preso e limitado pelo uso só de livros”.

“Esse programa é de fácil manuseio e possibilita a quem o opera um complemento, para melhor visualização da química de coordenação”.

“O programa é de fácil utilização, fornece uma boa visualização das moléculas, é muito simples medir distâncias e ângulos”.

- Compreensão de conceitos

“O Mercury também é uma ferramenta excelente para o desenvolvimento do aprendizado do aluno. Em conjunto com o CSD, foi possível ter uma visualização mais concreta dos conceitos”.

“O programa Mercury sem dúvida possibilitou meu aprendizado em muitos conceitos antes não aprendidos, como o efeito Jahn-Teller. O software é mais exigente que o ConQuest, mas bem mais interessante”.

“A utilização do programa Mercury auxilia a compreensão das ligações químicas e das estruturas moleculares, pois fornece uma visão tridimensional das mesmas”.

- Utilidade do programa em outras disciplinas da área de química

“O programa auxiliou a visualização das moléculas utilizadas para responder o questionário proposto, sendo que ainda é usado para visualizar mais compostos como, por exemplo, os sintetizados no laboratório de química inorgânica”.

“O programa nos permite ter uma noção espacial das moléculas o que é útil para disciplinas como cristalografia. As imagens também podem ser aproveitadas para ilustrar trabalhos e relatórios”.

"O Mercury foi o programa que mais gostei, devido à facilidade de visualizar moléculas, medir o comprimento das ligações e principalmente vê-las tridimensionalmente e poder girá-las, isto facilita o aprendizado e deveria ser utilizado em várias matérias".

Apenas dois estudantes relataram as dificuldades encontradas na utilização do programa, que estão detalhadas nos depoimentos a seguir. Conforme mencionado anteriormente, estas considerações são importantes, pois em uma próxima aplicação do material podemos enfatizar o uso destas funções, visando propiciar uma melhor utilização do programa pelos alunos.

"...encontrei muitas dificuldades para passar para o Word e para imprimir as figuras das moléculas".

"...apresenta-se um pouco confuso com relação às cores: o fundo preto que contém a molécula em 3D muito colorida, pode se tornar um pouco cansativo para a visão se seu uso for prolongado".

### **Considerações finais**

O foco de investigação deste trabalho foi a avaliação pedagógica de dois programas computacionais, ConQuest e Mercury, e a investigação das possibilidades que oferecem para o processo de ensino-aprendizagem de química no ensino superior. De modo geral, os estudantes envolvidos na pesquisa avaliaram positivamente ambos os programas quanto aos seus aspectos pedagógicos.

Os métodos utilizados na pesquisa forneceram resultados coerentes e compatíveis entre si, como é possível constatar comparando-se as respostas dadas às 25 afirmações iniciais com as observações realizadas pelos estudantes na questão aberta.

Constatou-se que os programas apresentam potencial para o desenvolvimento de atividades no ensino superior de química, podendo tornar a aprendizagem mais motivadora e significativa, principalmente mediante os recursos de visualização e acesso a parâmetros geométricos das moléculas, propiciando o estabelecimento de relações entre conceitos apresentados em aula de modo eficiente. Também se constatou, através da utilização do programa ConQuest, o desenvolvimento de habilidades consideradas importantes na formação de profissionais na área de química, como a procura por informações bibliográficas (Oliveira e Queiroz, 2007; Oliveira e Queiroz, 2008).

É também importante destacar a sugestão feita pelos alunos de utilização dos programas em outras disciplinas, que evidencia a ampla potencialidade de aplicação dos mesmos.

### **Agradecimentos**

Os autores agradecem ao CNPq (Processo nº 472967/2004-5) pelo auxílio financeiro, ao Professor Benedito dos Santos Lima Neto e aos alunos

matriculados na disciplina SQM0204-Química Inorgânica B, ministrada no Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, no primeiro semestre letivo de 2004.

### Referências bibliográficas

Allen, F.H. (2002). The Cambridge Structural Database: a quarter of a million crystal structures and rising. *Acta Crystallographica*, B58, 380-388.

Behar, P.A. (1993). *Avaliação de softwares educacionais no processo de ensino-aprendizagem computadorizado: estudo de caso*. Dissertação de Mestrado. Porto Alegre: Instituto de Informática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Belletti, A.; Borromei, R.; G. Ingletto (2006). Teaching physical chemistry experiments with a computer simulation by LabVIEW, *Journal of Chemical Education*, 83, 9, 1353-1355.

Boodts, J.F.C.; Galli, A.M.; O.L. Bottecchia (1988). O uso do micro-computador no ensino e na pesquisa: representação e simulação de voltamogramas cíclicos. *Química Nova*, 11, 2, 227-233.

Bruno, I.J.; Cole, J.C.; Edgington, P.R.; Kessler, M.; Macrae, C.F.; McCabe, P.; Pearson, J. e Taylor R. (2002). New software for searching the Cambridge Structural Database and visualizing crystal structures. *Acta Crystallographica*, B58, 389-397.

Casanova, J. e Weaver E.R. (1965). Introduction to computer use programs for first order rate constants, *Journal of Chemical Education*, 42, 2, 137-139.

Davis, T.V.; Zaveer, M.S. e Zimmer, M (2002). Using the Cambridge Structural Database to introduce important inorganic concepts. *Journal of Chemical Education*, 79, 10, 1278-1280.

Macrae, C.F.; Edgington, P.R.; McCabe, P.; Pidcock, E.; Shields, G.P.; Taylor R.; Towler, M. e Streek, J. (2006). Mercury: visualization and analysis of crystal structures. *Journal of Applied Crystallography*, 39, 453-457.

Masson, B.L. (1996). X-ray powder diffraction simulation with a microcomputer. *Journal of Chemical Education*, 73, 10, 918-921.

Oliveira, J.R.S. e Queiroz, S.L. (2007). Construção participativa do material didático "Comunicação e linguagem científica: guia para estudantes de Química". *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 6, 3: 673-690.

Oliveira, J.R.S. e Queiroz, S.L. (2008). Considerações sobre o papel da comunicação científica na educação em química, *Química Nova*, 31, 5: 1263-1270.

Whitnell, R.M.; Fernandes, E.A.; Almassizahed, F.; Love, J.J.C.; Dugan, B.M.; Sawrey, B.A. e K.R. Wilson (1994). Multimedia chemistry lectures, *Journal of Chemical Education*, 71, 9: 721 - 725.

Woodfield, B.F., Catlin, H.R., Waddoups, G.L., Moore, M.S., Swan, R., Allen, R. e Bodily G. (2004). The virtual ChemLab project: a realistic and sophisticated simulation of inorganic qualitative analysis. *Journal of Chemical Education*, 81, 11, 1672-1678.

**Anexo A** – Exemplos de alguns dos problemas solucionados pelos alunos através da utilização dos programas Classroom Conquest e Mercury.

1. Construa e armazene duas buscas, uma para  $\text{Cr}^{2+}$  e uma para estruturas publicadas na revista J.Chem.Soc., Dalton Trans. Em seguida combine as duas buscas (Combine Queries) e a partir das estruturas localizadas no banco indique uma que possua efeito Jahn-Teller e outra que não possua. Justifique sua resposta com base nos comprimentos de ligação presentes em cada uma delas.

2. Os compostos de coordenação apresentam isomeria *cis-trans* e a isomeria *mer-fac*. Localize no banco exemplos de complexos de rutênio mononucleares que possuam nas suas estruturas pelo menos um átomo de Cl e que permitam a você exemplificar estes dois tipos de isomeria. Uma vez escolhidos os complexos, apresente todos os isômeros geométricos possíveis para cada um deles. Apresente o estado de oxidação, a soma dos elétrons d e o número de coordenação do metal.

3. Faça uma procura no CSD por compostos que possuam o íon  $\text{Fe}^{2+}$ . Dentre os compostos encontrados escolha um que esteja ligado a pelo menos 2 ligações M-N, compare os comprimentos de ligação M-N e explique sua geometria considerando a TLV (Teoria da Ligação de Valência) e a TCC (Teoria do Campo Cristalino).

4. Localize no banco um complexo de Cr mononuclear hexacoordenado contendo cinco ligantes CO e um ligante qualquer X para cada um dos autores: C.Bianchini, D.J.Darensbourg, N.K.Lokanath, M.R.Bryce. Monte uma tabela mostrando o comprimento das ligações M-C (C referente à molécula de CO) e M-X. Compare os valores encontrados e justifique a diferença presente nestes valores com base nos seus conhecimentos sobre o caráter da ligação  $\pi$  em complexos de metais de transição.