

RESSALVA

Atendendo solicitação do(a) autor(a), o texto completo desta dissertação será disponibilizado somente a partir de 24/07/2025.

EDITH CONSUELO MUÑOZ ORDOÑEZ

Desenvolvimento de material pedagógico em química computacional para
auxiliar o aprendizado de química orgânica e bioquímica

Dissertação apresentada ao Instituto de
Química, Universidade Estadual Paulista,
como parte dos requisitos para obtenção do
título de Mestre em Química

Orientador: Prof. Dr. Nailton Monteiro do
Nascimento Júnior

Coorientador: Prof. Dr. Adriano Marques
Gonçalves

ARARAQUARA

2023

FICHA CATALOGRÁFICA

M967d Muñoz Ordoñez, Edith Consuelo
Desenvolvimento de material pedagógico em química
computacional para auxiliar o aprendizado de química orgânica e
bioquímica / Edith Consuelo Muñoz Ordoñez. -- Araraquara, 2023
125 f. : il., tabs.

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista,
Instituto de Química, Araraquara
Orientador: Nailton Monteiro do Nascimento Júnior
Coorientador: Adriano Marques Gonçalves

1. Estudo e ensino. 2. Aprendizagem por atividades. 3. Inovações
educacionais. 4. Material didático. 5. Estrutura química. I. Título.

IMPACTO POTENCIAL DA PESQUISA

Esta pesquisa fornecerá uma ferramenta pedagógica, por meio de vídeos, tutoriais e questionários, para os estudantes dos primeiros semestres da universidade, principalmente na área de Química ou áreas afins. Isso lhes permitirá compreender diferentes conceitos teóricos, utilizando dois programas computacionais de Química de acesso livre (Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298 v 21.1.0.020298 e MarvinSketch v 22.11), podendo ser utilizados como material complementar às aulas ministradas pelo professor. Isso abre a possibilidade de ampliar o conhecimento técnico sobre o uso de ferramentas tecnológicas que podem auxiliar os ambientes escolares, inclusive diante de uma situação inesperada, como a pandemia de COVID-19.

POTENTIAL IMPACT OF THE RESEARCH

This research will provide a pedagogical tool through videos, tutorials, and questionnaires for students in their early semesters of university, particularly in the field of Chemistry or related areas. It will enable them to understand different theoretical concepts by using two freely accessible Chemistry computer softwares (Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298 v 21.1.0.020298 and MarvinSketch v 22.11). This tool can be utilized as supplementary material to the professor's lectures, offering the opportunity to expand technical knowledge on the use of technological tools that can assist educational environments in unexpected situations such as the COVID-19 pandemic.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "Desenvolvimento de material pedagógico em Química Computacional para auxiliar o aprendizado de Química Orgânica e Bioquímica"

AUTORA: EDITH CONSUELO MUÑOZ ORDOÑEZ

ORIENTADOR: NAILTON MONTEIRO DO NASCIMENTO JÚNIOR

COORIENTADOR: ADRIANO MARQUES GONÇALVES

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestra em Química, pela Comissão Examinadora:

Prof. Dr. NAILTON MONTEIRO DO NASCIMENTO JÚNIOR (Participação Virtual)
Departamento de Bioquímica e Química Orgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Prof. Dr. EDUARDO MAFFUD CILLI (Participação Virtual)
Departamento de Bioquímica e Química Orgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Prof. Dr. CARLOS MAURÍCIO RABELLO DE SANT'ANNA (Participação Virtual)
Departamento de Química Fundamental / Instituto de Ciências Exatas - UFRRJ - Seropédica/RJ

Araraquara, 24 de julho de 2023

DADOS CURRICULARES

IDENTIFICAÇÃO

Nome: Edith Consuelo Muñoz Ordoñez

e-mail: ecm.ordonez@unesp.br

Nome em citações bibliográficas: Ordoñez, M. E. C

Naturalidade: Popayan/Cauca – Colômbia

Endereço profissional: Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”. Instituto de Química de Araraquara. Departamento de Química Orgânica.

Laboratório de Química Medicinal, Síntese Orgânica e Modelagem Molecular (LaQMedSOMM). Rua Professor Francisco Degni, 55. CEP: 14800-060.

Araraquara/SP - Brasil.

FORMAÇÃO ACADÊMICA/TITULAÇÃO:

Mestrado em Química – Instituto de Química da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (UNESP IQ-CAr), Araraquara SP. Título da dissertação: Desenvolvimento de material pedagógico em Química Computacional para auxiliar o aprendizado de Química Orgânica e Bioquímica. Orientador: Prof. Dr. Nailton Monteiro do Nascimento Júnior, Coorientador: Prof. Dr. Adriano Marques Gonçalves, Bolsa: CAPES

Graduação em Química – De **2013** a **2019**. Bacharelado em química– Univerdidade do Cauca, Colômbia. Orientadora: Prof. Dr. Juan Carlos Argoti Burbano.

PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS

46 Reunião Anual Sociedade da SBQ, de 28-31 de maio de **2023**. Águas de Lindóia. Participação e apresentação de painel intitulado: "Development of pedagogical material in Computational Chemistry to Assist Organic Chemistry and Biochemistry learning".

Curso: X Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, de 24 a 28 de maio de **2021**, no Laboratório Nacional de Computação Científica -

LNCC/MCTI, com 10 horas de duração, Métodos de Docking receptor-ligante e virtual Screening, Simulação de enovelamento de proteínas em solvente explícito, Predição de estruturas de proteínas. Brasil (ensino remoto).

Curso: Prevenção de lesões autoprovocadas e suicídio: Empoderamento de profissionais de atenção primária à saúde. Organização Pan-Americana da Saúde. 16 horas. 12 de setembro de **2020**. (ensino remoto).

Curso: Introdução à validação de sistemas informatizados. Universidade Autônoma Metropolitana. 14 de agosto de **2020**. Cidade do México. (ensino remoto).

Curso: Introdução à vigilância de medicamentos. Universidade Autônoma Metropolitana. 11 de agosto de **2020**. Cidade do México (ensino remoto).

Seminário: Seminário Internacional: Ciência, Biotecnologia e Inovação. Universidade Nacional Fabiola Salazar Legia. 03 a 08 de agosto de **2020**. Badua, Peru. (ensino remoto).

Curso: Módulo especializado em crianças e mudanças climáticas. UN. 06 de agosto de **2020**. (ensino remoto).

Curso: XVIII Congresso Colombiano de Química. Universidade de Cauca. Popayan-Colombia. 6 a 8 de novembro de **2019**.

Curso: IV Congresso Latino-Americano de Estudantes de Química. 19 a 21 de abril de **2017**, Pereira Colômbia.

OUTROS

Palestra: Estudo da atividade biológica do extrato etanólico total de *Cattleya warscewiczii sanderiana* e cálculos de Docking molecular XVIII Congresso Colombiano de Química. Universidade de Cauca. Popayan-Colombia. 6 a 8 de novembro de **2019**.

Monitoria acadêmica. Universidade do Cauca. Departamento de Química. Unidade de Análises industriais. **2017-2019**

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por todo o Seu amor e cuidado ao longo da minha vida, à minha mãe Gloria Ordoñez Barrionuevo por todo o seu esforço em me proporcionar educação, e ao meu pai Marco Aurelio Muñoz, mesmo não estando mais presente fisicamente, sei que ele ficaria feliz em me ver fazendo o que amo. Muito obrigada às minhas irmãs Oveli Muñoz e Marina Muñoz pelo apoio moral constante. Ao meu namorado Frank Carmona, pelo amor incondicional em meio à minha vida acadêmica e pessoal. Agradeço também aos meus sobrinhos Juan David Cruz Muñoz, Julian Andres Piamba Muñoz, Carolina Cruz Muñoz, Andres Felipe Cruz Muñoz, Dana Cruz, Sofia Cruz e Kevin Cruz.

Gostaria de expressar minha gratidão ao professor Nailton Monteiro do Nascimento Júnior pela oportunidade de fazer parte do seu grupo de pesquisa LaQMedSOMM e pelas suas contribuições na área de Química, e ao professor Adriano Marques Gonçalves pela sua ajuda no desenvolvimento do meu projeto.

Aos meus colegas de laboratório, Daniel Grajales, Hilario Monis, Bruna Lopes, Rodrigo Luiz, Lucca de Felipe e Bruna de Oliveira Silva, agradeço pela companhia no laboratório e pelas conversas em português.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de pessoal de Nivel Superior (CAPES) - código de financiamento 001, e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP, processo 2018/00187-7). Dessa forma, deixo meus agradecimentos a ambas instituições pelo apoio.

RESUMO

O uso de ferramentas computacionais no ensino da química tem se tornado cada vez mais relevante, especialmente no contexto do planejamento e síntese de novos compostos com potencial farmacológico, assim como na compreensão dos fenômenos que ocorrem no mundo atômico e molecular. Nos últimos anos, pesquisadores têm proposto metodologias para implementar estratégias que integrem os estudos computacionais às disciplinas das ciências investigativas, desde os primeiros semestres da faculdade, visando formar cientistas e educadores capazes de visualizar tridimensionalmente as moléculas e utilizar diversos programas de química computacional.

Considerando o rápido desenvolvimento tecnológico e as necessidades formativas de diferentes cursos de graduação, o presente trabalho tem como objetivo proporcionar aos alunos do Instituto de química da Unesp, em Araraquara, acesso a materiais complementares, como vídeos e tutoriais escritos, que podem ser visualizados em computadores ou dispositivos móveis. Esses materiais visam aprimorar a compreensão dos conceitos abordados nas disciplinas de química orgânica e bioquímica, por meio da manipulação de ferramentas computacionais de livre acesso. Isso contribuirá positivamente para a aprendizagem dos alunos no ambiente universitário e facilitará o avanço de suas pesquisas futuras.

Para alcançar esses objetivos, foram utilizados programas computacionais de química, como o Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298 (DSV) e o Marvin Sketch (MS), no auxílio ao ensino dos seguintes tópicos: (1) construção da estrutura primária de uma proteína, (2) identificação da estrutura secundária e terciária de uma proteína, (3) identificação da estrutura quaternária de uma proteína, (4) estereoquímica, ou seja, a determinação da configuração absoluta de compostos com centros quirais e (5) estados de protonação.

Para cada um desses tópicos, foram desenvolvidas três sequências de testes, utilizando a escala Likert, que foram aplicadas antes da visualização do material (pré-vídeo), após a visualização do vídeo (pós-vídeo) e após a realização dos passos do tutorial escrito (pós-tutorial).

Espera-se que o material desenvolvido neste trabalho facilite a compreensão dos alunos em relação aos conteúdos explicados em sala de aula e os motive a utilizar ferramentas de química computacional para complementar os resultados obtidos em laboratório, impulsionando o desenvolvimento de suas carreiras universitárias. Além disso, o uso desse material digital complementar abre portas para o desenvolvimento de aulas na forma digital, que podem ser utilizadas em situações acadêmicas emergenciais, como a ocorrida durante o período da pandemia da COVID-19.

Palavras chave: 1. Estudo e ensino. 2. Aprendizagem por atividades. 3. Inovações educacionais. 4. Material didático. 5. Estrutura química.

ABSTRACT

The use of computational tools in chemistry education, as a way to design and synthesize new compounds with pharmacological potential and to explain atomic and molecular phenomena, has been growing in recent years. In this regard, researchers have proposed methodological approaches to implement new strategies that integrate computational studies into investigative science disciplines, starting from the early semesters of college, in order to train scientists and educators capable of three-dimensional visualization of molecules and proficient in various computational chemistry softwares. Considering the rapid technological development and the formative needs of various undergraduate programs, this study aims to provide students at the Institute of Chemistry, Unesp/Araraquara, with supplementary materials in the form of videos and written tutorials that can be accessed on computers or mobile devices, in order to enhance their understanding of concepts taught in the fields of organic chemistry and biochemistry through the manipulation of freely available computational tools.

The intention is to positively contribute to their learning in the university setting and facilitate their future research endeavors. To this end, chemistry softwares such as Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298 (DSV) and Marvin Sketch (MS) were utilized to aid in teaching the following topics: (1) Construction of the primary structure of a protein, (2) Identification of the secondary and tertiary structure of a protein, (3) Identification of the quaternary structure of a protein, (4) Stereochemistry: Determination of the absolute configuration of compounds with chiral centers, and (5) Protonation states.

Additionally, three sets of tests were developed for each topic using the Likert scale, to be applied before viewing the material (pre-video), after viewing the video (post-video), and after completing the steps of the written tutorial (post-tutorial). It is expected that the materials developed in this study will facilitate students' understanding of topics that have been explained by the professor in the classroom, and will motivate them to utilize computational chemistry tools to complement their laboratory results, thereby opening the door for the use of supplementary digital materials in college lectures that can be employed in

emergency academic situations, such as the one experienced during the COVID-19 pandemic.

Keywords: 1. Study and teaching. 2. Activity-based learning. 3. Educational innovations. 4. Teaching materials. 5. Chemical structure.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Esboço das principais características para uma educação de qualidade. Pagina 19.

Figura 2. Exemplo de estratégia de aprendizagem usado por alguns professores universitários (Copriady et al., 2021a). Pagina 22.

Figura 3. Número de artigos publicados nos últimos 10 anos com o tema "Programas de Computador para a Educação, Computer Programs for Education" em três importantes bases de dados, Sience Direct, Scopus e Springer Link. Pagina 27.

Figura 4. Variação do número de artigos publicados nos últimos 10 anos com o tema "Química Computacional (Computational Chemistry)" e "Química Computacional para Ensinar (Computational Chemistry to Teach". Pagina 28.

Figura 5. Comparação da estrutura bidimensional e tridimensional do 2-butanol. Pagina 30.

Figura 6. Esquema da sequência para a aplicação do material, **Fonte:** Elaborado pela autora. Pagina 46.

Figura 7. Tópico 1: Estrutura primária de uma proteína. A) Abertura do vídeo; B) Instrução para a construção da angiotensina II; C) Características do vídeo; D) Resumo dos materiais elaborados para o tópico 1. **Fonte:** Programa Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298. Pagina 49.

Figura 8. Tópico 2: Identificação da estrutura secundária e terciária de uma proteína. A) Abertura do vídeo; B) Instrução para a análise da enzima conversora de angiotensina 2; C) Características do vídeo; D) Materiais elaborados para o tópico 2. **Fonte:** Programa Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298. Pagina 51.

Figura 9. Tópico 3: Identificação da estrutura quaternária de uma proteína. A) Abertura do vídeo; B) Instrução para a análise da proteína SARS-CoV-2 3CL protease (3CL pro); C) Características do vídeo; D) Materiais elaborados para o tópico 3. **Fonte:** Programa Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298. Pagina 53.

Figura 10. Tópico 4: Estereoquímica, A) Abertura do vídeo e informações do 2-butanol B) Abertura do vídeo e informações da Talidomida C) Abertura do vídeo e informações do Limoneno. **Fonte:** Elaborado pela autora Pagina 56.

Figura 11. Tópico 5: Estados de protonação. A) Abertura do vídeo e informações do ácido aspártico B) Abertura do vídeo e informações da dopamina C) Abertura do vídeo e informações do 3-Piridoxal fosfato D) Espaço para escrever dúvidas, sugestões e comentários sobre o material. **Fonte:** Elaborado pela autora. Pagina 58.

Figura 12. Conteúdo dos manuais de instrução dos programas de Química Computacional. **Fonte:** Elaborado pela autora. Pagina 60.

Figura 13. Adição de aminoácidos na sequência desejada no Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298. Pagina 61.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Alguns programas de química computacional usados para o ensino da química de acordo com bases de dados mais relevantes. Pagina 29.

Tabela 2. Principais características de alguns programas de usados para o ensino em química. Pagina 33.

Tabela 3. Programas de química utilizados para alunos com deficiência visual. Pagina 37.

Tabela 4. Requisitos para instalação do programa MarvinSketch v 22.11. **Fonte:** CHEMAXOM. Pagina 43.

Tabela 5. Requisitos para instalação do programa Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298. **Fonte:** Dassault Systèmes. Pagina 44.

Tabela 6. Teste pré-vídeo do Discovery Studio “Construção da estrutura primária de uma proteína”. Pagina 62.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADME	Absorção, Distribuição, Metabolismo e Excreção
QSAR	Quantitative Structure Activity Relationship
MOPAC	Molecular Orbital PACkage
IA	Inteligência Artificial
DSV	Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298
MS	MarvinSketch v 22.11
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
AG2	Angiotensina II
ECA	Enzima Conversora de Angiotensina
PLP	Piridoxal-5-fosfato
TICs	Tecnologias da Informação e da Comunicação

SUMARÍO

ITEM	PÁGINA
1. INTRODUÇÃO	18
1.1 FORMAÇÃO UNIVERSITÁRIA	19
1.2 APRENDIZAGEM E AS PRINCIPAIS FORMAS DE APRENDIZAGEM	20
1.3 O ENSINO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS	22
1.4 A QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO FERRAMENTA EDUCACIONAL	23
1.5 INÍCIO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO FERRAMENTA DE ENSINO	25
1.6 UTILIZAÇÃO DE PROGRAMAS NOS ÚLTIMOS 10 ANOS, COM FOCO EM QUÍMICA COMPUTACIONAL EM SALA DE AULA	26
1.7 METODOLOGIAS UTILIZADAS PARA IMPLEMENTAR O USO DE PROGRAMAS DE QUÍMICA NA EDUCAÇÃO PRESENCIAL OU REMOTA: CASOS DE SUCESSO	29
1.8 PERCEPÇÃO DE ALUNOS E PROFESSORES SOBRE O USO DE FERRAMENTAS INFORMÁTICAS NO ENSINO DE QUÍMICA	35

1.9	DESAFIOS NO USO DE ESTRATÉGIAS DE TREINAMENTO USANDO PROGRAMAS DE QUÍMICA	36
1.9.1	Caso de pessoas com dificuldade visual	36
1.9.2	O uso de ferramentas computacionais em contextos em que atividades presenciais não são possíveis: A pandemia do COVID-19	38
1.10	PERSPECTIVAS FUTURAS DA QUÍMICA COMPUTACIONAL NO PROCESSO DE APRENDIZAGEM	39
1.	OBJETIVOS	42
2.1	Objetivo Geral	42
2.2	Objetivos específicos	42
3.	METODOLOGIA	43
3.1	Gestão de programas de Química Computacional	43
3.2	Videos, tutoriais e questionários	46
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	48
4.1.1	Tópico 1: Estrutura primária de uma proteína	48
4.1.2	Tópico 2: Identificação da estrutura secundária e terciária de uma proteína	50

4.1.3 Tópico 3: Identificação da estrutura quaternária de uma proteína	52
4.1.4 Tópico 4: Estereoquímica; Determinação absoluta de compostos com centro quiral	54
4.1.5 Estados de protonação	56
4.2 Tutoriais	59
4.3 Questionários	61
5. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	63
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	65
7. ANEXOS	74

1. INTRODUÇÃO

A palavra educação tem muitas definições, porém, em termos gerais, pode ser considerada como todas aquelas atividades ou processos cujo objetivo principal é formar um ser humano integral, ou seja, que possa funcionar em todas as áreas da sociedade e, por sua vez, constitui um direito fundamental para a vida (JIMÉNEZ, 2019). A Figura 1 mostra um esquema em que se percebe que a educação abrange um amplo leque de situações e possibilidades, que buscam direcionar o olhar para o desenvolvimento daquelas habilidades de cada educando, necessárias para construir seu futuro. Razão pela qual o foco na aprendizagem do aluno, juntamente com o desenvolvimento de um currículo acadêmico adequado, são dois grandes indicadores de qualidade educacional (CHEN; GUO; TANG, 2022). Nesse sentido, dois aspectos devem ser destacados, o primeiro relacionado à importância do professor na orientação da aprendizagem do aluno e o segundo, o tipo de interação entre os alunos e os novos conceitos, seja presencial ou virtual, dependendo das necessidades e recursos de cada pessoa (MAY et al., 2020). Portanto, é necessário que tanto alunos quanto professores sejam alfabetizados e instruídos de acordo com os avanços que a sociedade apresenta com o passar do tempo, isso permitirá uma educação atualizada e de qualidade com potencial para o desenvolvimento intelectual e pessoal de cada aluno (ZENG et al., 2018).

O mundo atual está sendo cada vez mais influenciado por avanços tecnológicos que são indiscutivelmente necessários, para os quais várias pesquisas têm sido realizadas, com base em uma educação mais inclusiva e crítica, voltada principalmente para uma aprendizagem integral que considere não apenas aspectos intelectuais, acadêmicos ou físicos, mas também outros aspectos de grande importância como as condições socioeconômicas, culturais e emocionais que influenciam diretamente na aprendizagem e no ensino (WRAY; SHARMA; SUBBAN, 2022). Sendo assim, uma importante frente de atuação é a busca por novas ferramentas pedagógicas para os alunos do ensino médio ou superior, como por exemplo a química computacional, que através do uso de

programas de computador busca levar a outro nível o ensino no mundo atômico. Outra questão que vem sendo trabalhada com mais ênfase é o modelo em que os educandos podem vivenciar situações de aprendizagem de novos conceitos ativamente, por exemplo, com a aprendizagem baseada em problemas (ABP), influenciando positivamente as condições de trabalho dos professores. Apesar do cenário positivo, a realidade diária mostra que estamos em um mundo muito mais complexo do que em épocas anteriores e os desafios para se estabelecer uma relação de ensino-aprendizagem de qualidade podem ser muito grandes (ALKHATEEB et al., 2022).

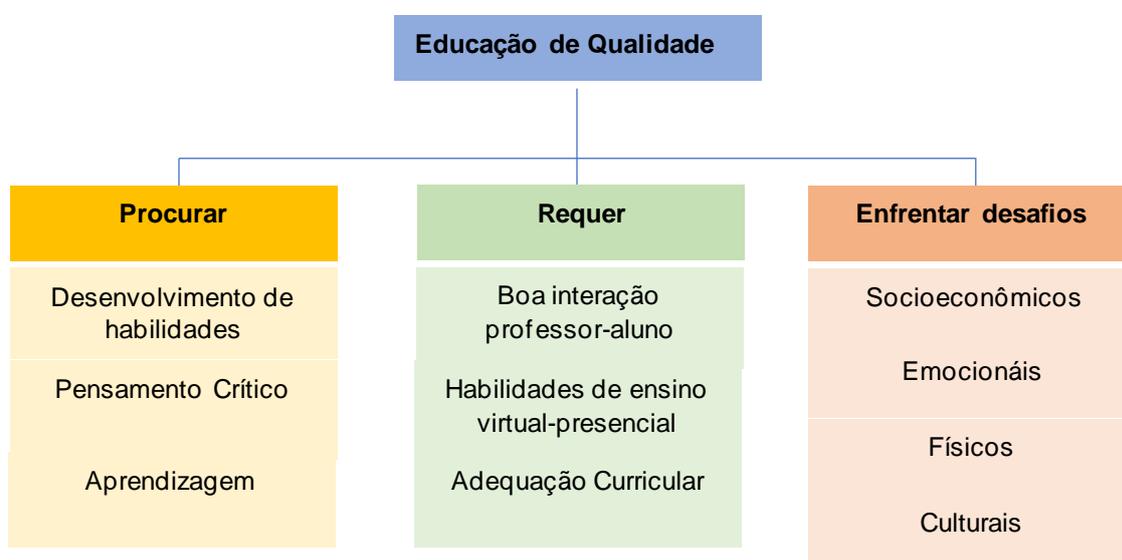


Figura 1- Esboço das principais características para uma educação de qualidade.

Fonte: (ALKHATEEB et al., 2022)

1.1 Formação universitária

O ensino universitário também é considerado ensino superior, pois constitui uma transferência para um nível de maior exigência intelectual em que cada aluno se depara com várias disciplinas avançadas em relação ao que foi ensinado no ensino fundamental ou médio. Da mesma forma, o ingresso no ensino superior é também um mecanismo de ascensão econômica e social (JANZEN; PANITZ; GLÜCKLER, 2022), que permite adquirir bens ou serviços que conferem valor mais alto ao grau universitário (WANG et al., 2022). Além disso, uma educação emancipadora também gera reflexões sobre preconceitos

e ideologias, sobre aspectos como grupos sociais, étnicos e até políticos, pois a aquisição de conhecimentos pode gerar uma mentalidade mais aberta e socialmente tolerante (SCOTT, 2022). Dessa forma, a educação universitária de qualidade deve considerar também os aspectos locais, e não deve apenas se basear em conceitos gerais, desconsiderando as particularidades locais. Isso se refere ao fato de que a metodologia de ensino, as carreiras disponíveis e seus conteúdos dependem em grande parte do ambiente em que os alunos vivem, e estas questões devem ser norteadas principalmente para a superação dos problemas que afetam uma comunidade ou grupo sociocultural (ABDULKERIM et al., 2022). Por exemplo, muitas universidades, além de direcionar suas ações para a excelência acadêmica, também pretendem se tornar universidades verdes, ou seja, oferecer um tipo de educação universitária onde os alunos estejam sempre cientes de práticas e hábitos que favorecem o meio ambiente, garantindo, de certa forma, que os futuros acadêmicos consigam tomar decisões políticas ou ambientais de acordo com o que aprenderam em sua formação (MASSAGLIA et al., 2022).

Outro aspecto do ensino universitário atual é que ele foi muito afetado pelas consequências causadas em todo o mundo devido à pandemia do COVID-19. Nesse sentido, novas estratégias relacionadas às Tecnologias da informação e da comunicação (TICs) têm sido utilizadas para transpor as barreiras educacionais impostas pela pandemia, contribuindo para o progresso tecnológico e a boa qualidade do ensino superior (Kozlova & Pikhart, 2021). No entanto, os fundamentos da formação universitária continuam a se basear principalmente nas relações de ensino-aprendizagem através da complexidade de experiências, de forma a melhorar as condições de vida e reduzir as desigualdades sociais, tecnológicas, ambientais ou culturais.

1.2 Aprendizagem e as principais formas de aprendizagem

A aprendizagem ou a aquisição de conhecimento pode ocorrer de várias formas e isso depende de cada indivíduo, pois cada pessoa tem a sua própria forma de lidar com a internalização daqueles novos conceitos ou competências com os quais não está familiarizado. A verdade é que existem muitos modelos

de aprendizagem, porém, algo comum que relaciona todos esses é que eles buscam trabalhar conhecimentos diversificados, de acordo com o conforto de cada aluno, ou seja, os alunos são tratados como casos únicos e quando o ambiente adequado para os alunos é proporcionado, o seu aprendizado é otimizado (DENG; BENCKENDORFF; GAO, 2022). Algumas formas relacionadas ao processo de ensino-aprendizagem mudaram nos últimos dois anos devido à pandemia da COVID 19 e foram encontrados resultados interessantes que relacionam a facilidade de aprendizagem em uma estrutura online, principalmente para quem teve dificuldades de adaptação em um ambiente social. Por exemplo, aqueles alunos que pareciam um pouco mais tímidos ou introvertidos na sala de aula presencial, tiveram maior facilidade de expressão na modalidade online, então pode-se dizer que este foi um ambiente ideal para eles por meio da auto-regulação (Self-regulated learning SRL na sigla em inglês), em que, basicamente, o aluno desenha suas próprias estratégias para atingir um ou vários objetivos acadêmicos, ou seja, ele regula sua vida social, emocional, física e acadêmica para alcançar o que deseja (OINAS et al., 2022). Do mesmo modo, algumas formas de aprendizagem baseiam-se principalmente no aprimoramento da memória, como o uso de mapas conceituais, que permitem resumir e organizar os conceitos adquiridos de forma independente ou no decorrer das aulas, reforçando as conexões entre os diversos conhecimentos, o que auxilia na aprendizagem (LIN et al., 2022).

O aprendizado profundo baseado no conhecimento de redes neurais também é frequentemente mencionado, permitindo que conceitos previamente adquiridos sejam úteis para desenvolver uma nova tarefa em que o nível de aprendizado será maior, também chamado de aprendizado de transferência (Malik & Bzdok, 2022). É importante considerar o processo de ensino-aprendizagem focado no aluno mais do que no professor, para melhorar o desenvolvimento intelectual do educando, considerando que o processo está diretamente relacionado aos sentimentos, embora, em termos gerais, dependa de cada aluno e do seu empenho na aquisição de novos conhecimentos (Wu et al., 2022; Ye & Zhou, 2022).

1.3 O ensino de ciências químicas

Observado o campo da química, constatamos que existem diferentes estratégias adotadas pelos professores para trabalhar o conhecimento da melhor maneira possível, dependendo de cada situação. Essas estratégias de ensino ajudam a visualizar o que acontece no mundo atômico. Uma parte indispensável quando se trata de ciências químicas é a parte experimental, realizada principalmente em laboratório por meio de experimentos que destacam as principais características e propriedades de diferentes substâncias, além de induzir os alunos a indagar e ter curiosidade sobre o que está acontecendo nesse processo. Apesar de ser uma parte indispensável para o ensino de ciências químicas, existem diferentes problemas que se baseiam principalmente na aquisição de recursos financeiros para ter acesso aos reagentes e equipamentos laboratoriais necessários, razão pela qual o uso de recursos digitais está sendo cada vez mais implementado (Brovelli Sepúlveda & Cañas Urrutia Carla Bobadilla Gómez, 2018). Na verdade, a questão da prática, tanto com experimentos laboratoriais quanto computacionais reflete um trabalho completo, que vai desde a explanação teórica em sala de aula, onde são trabalhados os conhecimentos mínimos necessários para o desenvolvimento das práticas, até o momento em que os educandos são estimulados a realizar a prática de forma independente, com o auxílio do professor, quando necessário. Um exemplo de proposta de aprendizagem usada por professores de ciências é baseado no esquema mostrado na figura 2 (Gouws, 2022).

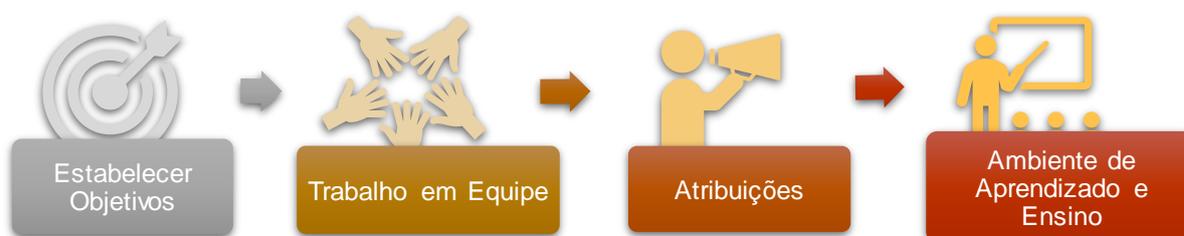


Figura 2- Exemplo de estratégia de aprendizagem usado por alguns professores universitários.

Fonte: (Copriady et al., 2021a).

Um dos aspectos essenciais e iniciais é estabelecer objetivos claros focados na aprendizagem de cada um dos alunos, para o desenvolvimento do trabalho em equipe, com as respectivas atividades atribuídas pelo professor e garantir um ambiente adequado em que os alunos possam refletir e construir os seus conhecimentos coletivamente. Além disso, é importante dizer que, em termos gerais, a formação em ciências químicas requer a ajuda e colaboração geral entre os professores, pois os mais experientes podem contribuir com seu ponto de vista sobre os aspectos mais relevantes no ensino da ciência e, por sua vez, os mais jovens no campo da educação podem fornecer novas ideias e conceitos que ajudam a inovar constantemente o campo acadêmico (Copriady et al., 2021b).

Outro fator que fomenta várias pesquisas é sobre o ensino das ciências químicas com ênfase em aplicações cotidianas, ou seja, chamar a atenção dos alunos por meio de exemplos ou experiências que possam ser uma explicação do mundo cotidiano, para que não seja considerada como uma ciência abstrata sem importância para a vida, uma vez que a química está imersa em todo o universo e no cotidiano de nossas vidas (Parga Lozano & Piñeros-Carranza, 2018). Esta forma de ensino baseada em contextos tenta dar uma explicação do que acontece no mundo real. A contextualização levanta 5 indicadores possíveis: (1) Autenticidade, demonstra os novos aspectos que devem ser considerados; (2) Relevância, que mostra o quão importante é no meio da sociedade e do sistema educacional; (3) Persistência, para alcançar resultados; (4) Investigação do porquê e para quê; (5) Construção, com objetivos claros e adequados (Toledo et al., 2019).

1.4 A Química computacional como ferramenta educacional

Há várias décadas, esforços são feitos para melhorar a qualidade do ensino e isso tem permitido que novas estratégias sejam incorporadas para garantir uma aprendizagem abrangente, que contribua com o desenvolvimento do senso crítico nos alunos atraídos para áreas como ciências químicas ou afins. Por isso, têm sido utilizadas ferramentas pedagógicas, ou seja, aqueles recursos

didáticos usados para promover a aprendizagem que facilitam a vida tanto do aluno quanto do professor (ORJI; OJADI; OKWARA, 2022). Uma dessas ferramentas no plano digital é a química computacional, definida como um ramo da química teórica que se baseia nos postulados da mecânica quântica. Assim, é possível explicar as propriedades do mundo atômico fazendo uso de ferramentas de computador e vários programas (Acuña, 2018). A química Computacional tem sido gradativamente incorporada ao desenvolvimento do ensino e aprendizagem da química em geral, a começar pela sua integração no currículo acadêmico, uma vez que diversos programas permitem a visualização tridimensional de diferentes moléculas, facilitando a compreensão dos fenômenos que ocorrem no mundo atômico (MARTIN, 1998). A ideia é que esses recursos computacionais gerem as chamadas “pontes cognitivas”, ou seja, atividades que permitem maximizar o desempenho acadêmico, sendo utilizados como elementos co-estruturais, para produzir bases sólidas fundamentais na geração de um conhecimento mais bem estabelecido (Brito, 2001).

É importante destacar que o uso de recursos computacionais proporcionados pelos avanços tecnológicos, embora na maioria dos casos se destinem a auxiliar no desenvolvimento de pesquisas mais avançadas, também têm sido considerados como uma forma de conduzir os alunos a um tecnicismo desumanizador, como uma maneira de dizer que os avanços tecnológicos nos fazem perder parte da humanidade. (Ribeiro & Greca, 2003). Em contrapartida, não se pode negar que o uso de programas que permitem diversos cálculos computacionais proporcionará uma excelente interação entre aluno e conhecimento, que é realmente o que se busca cada vez que nos deparamos com o aprendizado de qualquer aspecto da vida, seja no meio acadêmico ou na esfera pessoal, para o qual muitos educadores têm proposto diversas modificações nos aspectos que dizem respeito ao ensino, pois o uso de computadores e programas geram uma ressignificação do espaço de aprendizagem e aumentam o pensamento ativo, reflexivo e atuante de cada aluno (Arroio et al., 2005).

Assim, em uma sociedade informatizada, os alunos podem usar essas ferramentas da maneira que se sentirem mais à vontade com seu aprendizado. Elas facilitam a experiência da informação desejada, ou seja, cada aluno pode

manipular os programas ou bancos de dados como tal, diferente de simplesmente memorizar tudo como era apresentado no ensino tradicional. Além disso, a ênfase principal é dada para a aprendizagem real, que também permite a interpretação dos resultados obtidos e que cada educando consiga realizar seu próprio trabalho, sendo o professor um mediador entre o aluno e seu conhecimento. Em outras palavras, o uso de programas de química permitiu um ambiente mais flexível no mundo da educação e têm se mostrado como facilitadores do aprendizado dos alunos. Este fato é realmente muito importante no mundo da educação, pois muitas vezes os alunos não têm contato suficiente com os programas de química e, portanto, desconhecem suas utilidades e limitações (Pearson, 2007).

1.5 Início da Química computacional como ferramenta de ensino

Desde a década de 1970, já são relatados trabalhos nos quais têm sido utilizados programas de química para o ensino universitário, por exemplo, no estudo da teoria do orbital molecular de alguns compostos aromáticos, com o qual se buscou que os alunos manipulassem tais ferramentas e desenvolvessem novas habilidades tecnológicas (Duke, 1972). Por outro lado, também foram iniciadas simulações de práticas laboratoriais, com o objetivo de obter uma melhor visualização de algumas reações perigosas ou muito complexas para explicar em uma lousa convencional (Smith, 1998). Algumas das aplicações na década dos 70 foram baseadas em programas como PC Spartan pro, Gaussian 98 W, Gaussian View, Jaguar, GAMESS, AIMPRO, Insight e Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298 para serem incorporados ao desenvolvimento de laboratórios orgânicos, inorgânicos e bioquímicos (Paselk & Zoellner, 2002). Por exemplo, em 1997 na Liberal Arts University em Lake Forest, Illinois, vários recursos computacionais foram implementados pela primeira vez usando o programa Spartan em uma sequência em que os alunos desenhavam estruturas, faziam seus respectivos cálculos e analisavam os resultados, para aprender sobre as forças intermoleculares presentes entre diferentes moléculas, respondendo às suas próprias perguntas (Cody, 2003).

Outro exemplo, já no ano 2000, foi o desenvolvimento de 13 exercícios de modelagem molecular no Wabash College, Crawfordsville para estudantes de química do primeiro semestre com programas como CHARM (Feller, 2004). No entanto, as possibilidades de realizar cálculos robustos eram baixas, pois os programas disponíveis eram escassos e muito caros, e também exigiam a ajuda ou suporte técnico de especialistas em sistemas, razão pela qual às vezes o verdadeiro propósito de estudar química era visto como tendencioso para outros objetivos. Neste mesmo ano houve uma mudança importante com o lançamento do WebMO, ou seja, a oportunidade de realizar cálculos computacionais baseados na web. Juntamente com o desenvolvimento de programas de acesso livre que permitiram a realização de mais estudos deste tipo. Fazendo que alunos e professores também fossem formados, que é a estratégia atual, em que se dá maior ênfase, para que os futuros profissionais possam ter acesso a essa modalidade de ensino com ferramentas computacionais disponíveis até o momento para auxiliar na aquisição de conhecimentos, juntamente com as aulas teóricas ministradas (Grushow & Reeves, 2019).

1.6 Utilização de programas nos últimos 10 anos, com foco em química computacional em sala de aula

Na figura 3, podemos ver o número de artigos publicados nos últimos 10 anos, relacionados ao uso de "programas de computador para educação, (computer programs for education)" em geral, em três bases de dados muito populares como Science Direct, Scopus e SpringerLink pesquisa feita em inglês. Pode-se perceber que ao final dos anos de 2020 e 2021 houve um aumento significativo no número de resultados com esse parâmetro de busca, para o qual duas coisas podem ser ditas, primeiro que estamos em meio a uma sociedade cada vez mais tecnológica e tal aumento pode estar relacionado à pandemia do COVID-19, já que era necessário continuar a vida em meio ao distanciamento e isolamento preventivo.

Variación no número de artigos científicos sobre o uso de Software nos últimos 10 anos

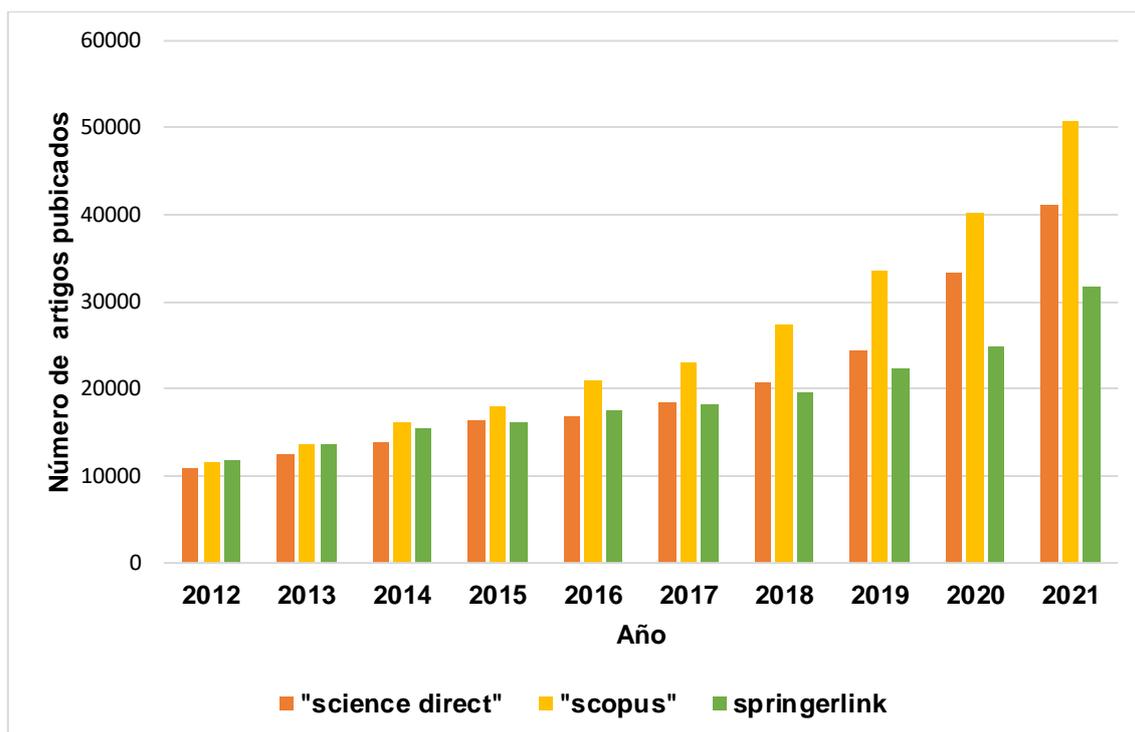


Figura 3- Número de artigos publicados nos últimos 10 anos com o tema "programas de computador para a educação, computer programs for education" em três importantes bases de dados, Science Direct, Scopus e Springer Link.

Fonte: Elaborado pela autora. 2022.

No caso da figura 4, apresenta-se um gráfico no critério de busca "química computacional" (computational chemistry, em inglês), com comportamento semelhante ao apresentado na figura 2, porém, quando a busca muda para o critério "química computacional para ensinar" (computational chemistry to teach), este resultado diminui radicalmente, indicando que ainda está no processo de se tornar uma ferramenta pedagógica aliada no desenvolvimento da educação.

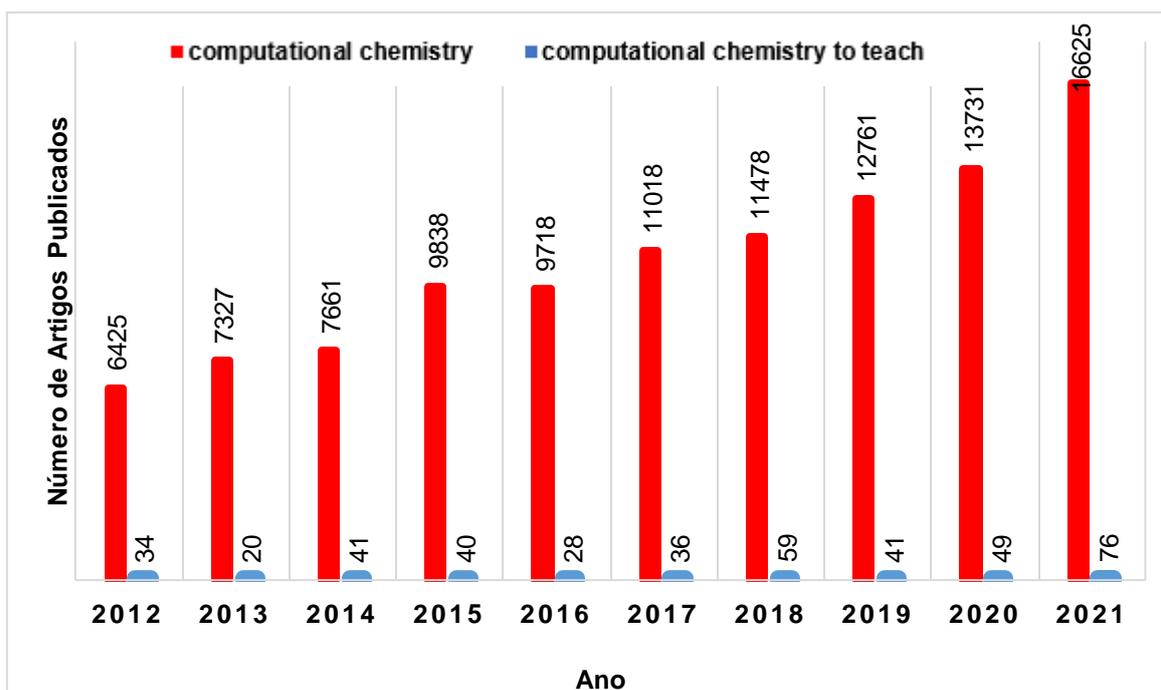


Figura 4- Variação do número de artigos publicados nos últimos 10 anos com o tema "química computacional (computational chemistry)" e "Química Computacional para Ensinar (computational chemistry to teach".

Fonte: Elaborado pela autora. 2022.

Nos artigos relacionados com a química, os tópicos de pesquisa mais frequentes em que um programa de computador tem sido usado para o desenvolvimento de aulas foram, a estereoquímica de reações químicas, reatividade na área de química orgânica, estudos de matéria e reações de combustão elementares, propriedades dos elementos da tabela periódica, isomeria, teoria dos campos cristalinos, ligações e geometria molecular (Andrés et al., 2019). Na tabela 1, podemos ver os principais programas usados em diferentes artigos, além da sua área de atuação, principalmente nos últimos 10 anos, sendo assim Autodock e Gaussian os mais frequentes em áreas como a bioquímica e química medicinal.

Tabela 1. Alguns programas de química computacional usados para o ensino da química de acordo com bases de dados mais relevantes.

Programa	Título do artigo publicado	Área onde foi usado
PyMOL e FoldIt	Increasing Computational Protein Design Literacy through Cohort-Based Learning for Undergraduate Students	Bioquímica e educação química
LabLessons de Amazon Web Services	Exploring the Viability and Role of Virtual Laboratories in Chemistry Education Using Two Original Modules	Educação química, química orgânica e fisicoquímica
Autodock		
UCSF Chimera, Autodock Vina	Teaching of Biopharmaceutics in a Drug Design Course: Use of GastroPlus as Educational Software	Educação em biofarmácia
ADMET Predictor		
DockThor	Using Free Computational Resources to Illustrate the Drug Design Process in an Undergraduate Medicinal Chemistry Course	Química medicinal
Autodock Vina		
ArgusLab under		
FOSS	Free and open-source software for computational chemistry education	Educação química
Gaussian 09	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	Educação química

Fonte: Elaborada pela autora. 2022.

1.7 Metodologias utilizadas para implementar o uso de programas de química na educação presencial ou remota: Casos de sucesso

Geralmente podemos dizer que o aprendizado da Química se dá por três níveis, macro, sub-micro e simbólico, o primeiro indica que o aluno desenvolve principalmente suas habilidades organolépticas, ou seja, seu contato com a química é utilizando os sentidos para olfato, visão e tato. O nível sub-micro é baseado naquelas moléculas, átomos ou estruturas que fazem parte desta ciência e requerem dispositivos para sua análise. Finalmente no nível simbólico o aluno entra em contato com as informações fornecidas em tabelas, gráficos ou

equações (REES; KIND; NEWTON, 2019). Além disso, entre as formas mais comuns encontradas para trabalhar os conhecimentos está o uso de questionários e entrevistas com alunos para identificar seus conhecimentos prévios sobre um tema específico. É importante considerar como aspecto primordial a participação ativa do educando, de acordo com sua forma predominante de aprendizagem, seja auditiva, visual ou tátil, sendo o uso do laboratório uma forma de motivar o contato e a vivência com o mundo da ciência (Aristizabal et al., 2018; Gamboa et al., 2017).

Da mesma forma, destaca-se a importância da visualização tridimensional com diferentes programas ou também com o uso de recursos online que, contribuem para a aprendizagem integral não só dos alunos, mas também dos professores (TUVI-ARAD; BLONDER, 2019) (PAGLIARO, 2019) A Figura 5, por exemplo, mostra a diferença na visualização bidimensional ou tridimensional do (*R*)-2-butanol, que realmente demonstrou influenciar o aprendizado de química, pois nem todos os alunos têm a mesma capacidade de percepção espacial de imaginar esse tipo de estrutura por conta própria, sendo muito mais difícil no caso de alunos do primeiro ano da universidade, porque, em geral, eles ainda não têm uma vivência de química em nível avançado.

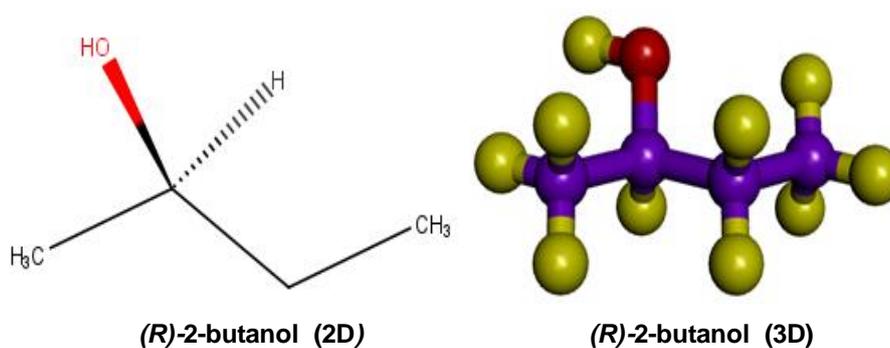


Figura 5- Comparação da estrutura bidimensional e tridimensional do 2-butanol.

Nesse sentido, em um estudo realizado com 52 alunos aos quais foram feitas 20 questões para avaliar sua habilidade espacial e a facilidade para resolver questões de estereoquímica, foi demonstrado que por meio do aplicativo OSRA aqueles alunos que tiveram contato com o referido aplicativo obtiveram

melhores resultados na nota da prova escrita, comparado para aquele grupo de controle onde a referida ferramenta não foi usada (Fatemah et al., 2020).

Outra área que tem se beneficiado de estratégias computacionais é a de planejamento de medicamentos, sendo uma questão muito recorrente onde os programas são usados para desenvolver diferentes disciplinas. Por exemplo, o site PatchDock foi de grande ajuda no laboratório de química orgânica da Marion University, Ohio. Inicialmente, cada aluno recebeu um ligante e teve que observar a interação com a acetilcolinesterase, usando o programa Chimera, para o qual os alunos inicialmente assistem a um tutorial em vídeo no YouTube que explica o manuseio e os conceitos mais importantes desse programa. Por fim, utilizando o programa SwissADME, eles tiveram a oportunidade de gerar suas próprias moléculas e realizar as respectivas análises farmacológicas ou toxicológicas *in silico*. A experiência narrada por cada grupo de alunos foi diferente, alguns consideraram que gostaram da experimentação, enquanto outros manifestaram a sua insatisfação com os programas e consideraram que os mesmos devem ser melhorados, no entanto, todos concordam que a interação com essas ferramentas computacionais utilizadas é um complemento à sua formação acadêmica que os ajudou muito em seu aprendizado (Acuna et al., 2020).

Adicionalmente, em outra pesquisa relacionada à aplicação de ferramentas computacionais no desenvolvimento pedagógico, a percepção do uso do simulador virtual PhET foi avaliada. O trabalho começou com 105 alunos, dos quais alguns foram escolhidos aleatoriamente para responder uma pesquisa na qual foi utilizada a escala Likert, onde mais de 47% dos pesquisados concordam que o uso desses recursos auxilia no aprendizado e gera curiosidade por ser algo diferente dos métodos tradicionais (Carrión-Paredes et al., 2020).

Em outro caso particular, os alunos aprenderam a usar a linguagem de programação em Python e alguns programas úteis para o desenvolvimento da mecânica molecular através de atividades distribuídas em 9 módulos, depois realizaram cálculos de mecânica quântica começando com uma aula de 1 hora, para aprender os conceitos básicos deste tópico. Eles então projetaram e otimizaram as estruturas químicas nos programas baixados e calcularam o

potencial redox para as reações químicas fornecidas. Sempre enfatizando o trabalho individual e a análise de cada resultado (McDonald et al., 2020).

Paralelamente, outro estudo utilizou uma estratégia que consistia na distribuição de artigos específicos em que os alunos de biotecnologia farmacêutica deveriam observar e reproduzir as moléculas, de acordo com os objetivos específicos e interesse fornecidos por seus professores. Os educandos deveriam utilizar programas como ChemAxon, MarvinSketch v 22.11 ou o aplicativo web Py -MolEdit disponível no site www.3d-qsar.com, a fim de trabalhar o planejamento de substâncias usando métodos 3D-QSAR, incluindo análise conformacional e algumas regras de alinhamento. Foi observado que os alunos obtiveram excelentes resultados nos respectivos exames destas disciplinas, evidenciando que o exercício de desenvolvimento realizado contribuiu significativamente para a sua aprendizagem, além de estarem motivados a continuar a utilizar estas ferramentas após o encerramento das disciplinas (Ragno et al., 2020).

O programa Gaussian 09, em conjunto com a interface Webmo, foram ferramentas utilizadas para auxiliar no estudo dos conceitos básicos de química orgânica, em um caso específico desenvolvido na Universidade de Wisconsin. Foram elaborados 3 vídeos anteriores e realizada a leitura de um manual de instruções com as informações mais relevantes sobre este programa para realizar cálculos *Ab-initio* e sobre a teoria funcional da densidade como complemento aos laboratórios de química orgânica. O desempenho dos alunos foi avaliado realizando vários exercícios por conta própria nos quais conseguiram otimizar a estrutura molecular e determinar sua energia mínima (Esselman & Hill, 2016).

Além das ferramentas utilizadas para pesquisa, alguns programas de computador também foram elaborados para serem utilizados no ambiente educacional, como é o caso do desenvolvimento do Kit de Modelagem e Simulação Molecular (MaSK), o qual foi desenvolvido para alunos iniciantes e como auxílio para professores, pois permite visualizar diferentes propriedades das moléculas, otimizações, vibrações potenciais moleculares, eletrostáticos, entre outros. O software pode ser facilmente baixado para o computador, permitindo que os alunos tenham a liberdade de criar e modificar as estruturas

projetadas e interagindo de maneira intuitiva com o programa (PODOLYAN; LESZCZYNSKI, 2009).

Outro caso de sucesso foi o uso do programa gratuito Swiss-Pdb Viewer aplicado a estudantes de biologia e farmácia para que pudessem visualizar as estruturas tridimensionais do DNA e de algumas proteínas. O processo consistiu primeiramente na avaliação pré-teste, seguida da instalação do programa, utilização do Protein Data Bank para obtenção das estruturas de interesse, visualização 3D no programa e a avaliação final após a experiência. Após trabalharem com o programa, ocorreu um aumento nas notas dos processos avaliativos, alcançando um percentual de acerto ao questionário de 91% após o contato com o programa, comparado a 35,53% quando o referido processo pedagógico ainda não havia sido realizado. Dessa maneira, fica evidente que a visualização tridimensional permitiu o melhor aprendizado dos conceitos teóricos (ABREU et al., 2019).

Outros trabalhos foram feitos usando o programa Avogadro projetando as estruturas protonadas e desprotonadas de diferentes moléculas, o programa MOPAC foi usado para determinar a geometria de equilíbrio e a solvatação com os programas, GAMESS 7 e Gaussian. A metodologia utilizada consistiu no desenho de guias ilustrativas para gerar estruturas tridimensionais e como realizar cálculos simples, para que os alunos pudessem fazer o trabalho por conta própria com motivação suficiente para continuar explorando conteúdos relacionados com a área de química. Após a respectiva instalação dos programas, foram elaborados manuais por cada aluno, que construiu as suas próprias estruturas e realizou as análises necessárias (Patiño, 2017).

A tabela 2 mostra um resumo das características principais dos programas mencionados anteriormente.

Tabela 2. Principais características de alguns programas de usados para o ensino em química.

Nome	Função	Sítio web
OSRA	Programa de código aberto para reconhecer estruturas encontradas em formatos como TIFF, JPEG, GIF, PNG, PDF, processá-lo, gerar seu código Smiles e produzir um modelo 3D.	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ci800067r

PatchDock	Servidor online que permite cálculos de docagem molecular que também podem ser baixados.	https://bioinfo3d.cs.tau.ac.il/PatchDock/php.php
Chimera	Programa utilizado para visualização e análise interativa de diferentes estruturas moleculares.	https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/
Simulador virtual phET	Servidor web que possui diferentes simulações interativas de matemática e ciências, como física, química e biologia. Neste caso, o objetivo é aprender explorando e descobrindo.	https://phet.colorado.edu/es/
SwissADME	Este servidor online permite obter códigos Smiles e gerar as propriedades mais importantes de possíveis moléculas que podem servir como drogas. Por exemplo, cinética e compatibilidade.	http://www.swissadme.ch/index.php
Python	Trata-se de uma linguagem de programação de alto nível em que os pedidos são realizados pelo computador, utilizando um intérprete, de modo que não é necessário traduzi-los para uma linguagem de máquina.	https://www.python.org/about/
MarvinSketch v 22.11	Este programa permite desenhar de forma rápida e precisa vários compostos químicos, reações e estruturas que podem ser verificadas e contribuem para a determinação de diferentes propriedades.	https://chemaxon.com/products/marvin
Kit de simulación Mask	Este é um programa utilizado para a visualização de várias propriedades moleculares com a ajuda de GAMESS/Firefly ou Gaussian. Realizando otimizações, determinação de orbitais moleculares, momento dipolar, etc.	http://ccmsi.us/mask/
Swiss-PdbViewer	É uma interface que permite a análise de várias proteínas ao mesmo tempo, com capacidade de sobrepor mutações de aminoácidos, ligações de hidrogênio, ângulos e distâncias entre átomos.	https://spdbv.unil.ch/
GAMESS	Software que permite realizar cálculos de química quântica Ab-initio, também permite realizar cálculos funcionais de densidade e outros métodos semi-empíricos.	www.msg.chem.iastate.edu/gamess/download.html
Gaussian	É um software comercial pago que resolve a equação de Schrodinger com base na teoria do orbital molecular, prediz características de moléculas como energia, estruturas moleculares, frequências de vibração em compostos e reações considerando diferentes ambientes.	https://gaussian.com/g16new/
Interface Webmo	Essa interface baseada na web permite executar programas de Química Computacional, editar moléculas e acessar trabalhos avançados. Pode ser usado a partir de qualquer computador.	https://www.webmo.net/
MOPAC	Programa capaz de realizar cálculos semi-empíricos, utilizando a química quântica, baseado na aproximação de Dewar, NDDO e Thiel.	http://openmopac.net/

Fonte: Elaborada pela autora.2022.

1.8 Percepção de alunos e professores sobre o uso de ferramentas computacionais no ensino de química

Um dos aspectos mais mencionados neste caso é que devido ao surgimento de novas ferramentas pedagógicas que integram as TICs, muitos professores têm se preocupado com o uso das novas ferramentas, de tal forma que consideram de extrema importância adquirir novos conhecimentos nessas questões tecnológicas, uma vez que foi comprovado que existem vários professores que não possuem educação digital suficiente para ensinar adequadamente e oferecer uma educação de qualidade (GARZÓN-ARTACHO et al., 2021).

Da mesma forma, professores e alunos consideram que o fato de aprender sobre essas ferramentas integradas ao ensino os ajuda a identificar suas próprias fragilidades e gera autonomia, ou seja, isso permite que tanto o aluno quanto o professor explorem por conta própria a aprendizagem, auxiliando no desenvolvimento do pensamento científico, com a posterior interpretação dos resultados e a formulação de conclusões que são importantes no desenvolvimento de um futuro experimento (Rodríguez-Becerra et al., 2020).

Além disso, os professores universitários responsáveis pelo ensino de Química, com ênfase em química computacional, mencionam que é importante, em primeiro lugar, a aquisição de recursos institucionais, ou seja, que cada aluno tenha as ferramentas mínimas para realizar o trabalho necessário ou que a Universidade forneça tais recursos. Sugerem também uma formação adequada para a gestão dos programas, bem como a participação em diversos eventos científicos que permitam aos alunos um maior contato com outras pesquisas nesta área, desde a formulação de hipóteses até a publicação de resultados (Ball et al., 2020).

Quanto aos educandos, consideram que a utilização deste tipo de recursos pedagógicos contribui definitivamente de forma significativa para o seu desenvolvimento acadêmico, uma vez que facilita muito a visualização tridimensional das moléculas, como foi observado em diversos exemplos

mencionados acima (Abreu et al., 2019; Gamboa et al., 2017; Pagliaro, 2019; Podolyan, 2009; Tuvi-Arad, 2019). Aqui é importante ter em conta como o uso destas ferramentas computacionais também os incentiva a realizar um trabalho individual, pois devem enfrentar um novo desafio de utilização tecnológica, mas também com a facilidade de fazer um trabalho conjunto como estratégia emocional para se sentirem apoiados e desenvolverem habilidades para seus futuros trabalhos em empresas ou universidades (Aristizabal et al., 2018; Ball et al., 2020).

1.9 Desafios no uso de estratégias de treinamento usando programas de química

Vários motivos influenciam no uso de programas computacionais para o ensino de química como a dificuldade para a visualização 3D de diferentes moléculas, a falta de familiaridade que muitos alunos demonstram quanto ao uso de recursos tecnológicos e até mesmo um ambiente de aprendizagem inadequado, incluindo a ausência de pessoas preparadas para trabalhar o assunto ou até a falta de motivação para executar os trabalhos (Jones, 2013). A seguir vamos falar sobre duas situações específicas e desafiadoras quanto ao uso de ferramentas pedagógicas computacionais. Primeiro, aquelas pessoas com problemas de visão que querem trabalhar em pesquisa e, segundo, em meio a uma situação em que atividades presenciais não são possíveis, como a pandemia do COVID-19, que gerou um estado imediato de emergência e a necessidade repensar em muitas áreas a nível mundial.

1.9.1 Caso de pessoas com dificuldade visual

Dentro da área de química, destaca-se o fato de alguns alunos apresentarem dificuldades visuais, razão pela qual tem sido necessário implementar novas estratégias para fazer uma educação inclusiva. Dessa forma, a tabela 3, a seguir, mostra alguns exemplos de programas que desenvolveram recursos especiais para alunos com dificuldades visuais (Binev et al., 2018; NavMol [Version 4.h], n.d.).

Tabela 3. Programas projetados que têm características especiais que podem ajudar alunos com deficiência visual na aprendizagem de química.

Nome do programa	Características importantes do programa
Navmol	Permite criar e editar moléculas, tem sintetizadores de fala que permitem ler as informações obtidas (Fartaria et al., 2013).
Brailchem	É um editor de extensão molecular do Firefox, permite explorar estruturas e estudar os elementos da tabela periódica.
Marvin-View	Neste caso, a principal característica é que ele permite a entrada de diferentes formatos de arquivo e também permite o uso de SMILES
Sonificación de espectros IR (JDXview v0.2)	Espectros de IR são convertidos em informações audíveis (Pereira et al., 2013).
EDICO	Editor Científico ONCE: Permite editar conteúdo científico, reduzindo a barreira entre pessoas com visão e cegos (Centro de Tiflotecnología e Innovación de la ONCE, 2018).

Fonte: Elaborado pela autora.

Em alguns casos, o processo para alcançar a educação inclusiva é descrito, começando com o desenho de estruturas químicas por meio dos códigos SMILES para as moléculas de interesse, depois o uso de alguns programas de leitura de tela como VoiceOver ou JAWS e posteriormente o ChemDraw, que é um criador de gráficos muito popular. Uma das desvantagens manifestadas é que atualmente não existe um programa de leitura de tela que funcione diretamente com o ChemDraw um programa para o desenho de estruturas químicas e cálculos de propriedades, então o processo se torna um pouco mais demorado e é necessário usar a memória do aluno para aprender a sequência de comandos. O programa Open Babel é usado para transformar a referida sequência em um formato 3D, a fim de se certificar que a molécula projetada está correta, seguindo para os respectivos cálculos computacionais. Embora ainda existam muitas deficiências em termos de educação inclusiva na área de química para alunos com dificuldades visuais, os grandes avanços tecnológicos ajudam cada vez mais e estão aprimorando essas experiências em busca de estabelecer sua completa autonomia, pois atualmente em alguma etapa é necessária a ajuda de um clarividente (Wedler et al., 2012).

1.9.2 O uso de ferramentas computacionais em contextos em que atividades presenciais não são possíveis: A pandemia do COVID-19

Sem dúvida, a pandemia do COVID-19 foi um dos maiores acontecimentos dos últimos anos e gerou grandes desafios no ensino, pois era necessário utilizar os recursos computacionais que estavam disponíveis, passando de uma sala de aula presencial para 100% virtual, agradável para alguns, mas às vezes com maiores distrações e dificuldade de concentração para obtenção de bons resultados (Ghasem & Ghannam, 2021). Este evento causou diversos efeitos nos alunos e professores, uma vez que, por um lado, alguns professores não estavam preparados para digitalizar o conteúdo das suas aulas ou simplesmente não tinham os conhecimentos necessários para explorar o mundo digital e, por outro, os alunos, que, embora com maior facilidade de atuação no uso de tecnologias modernas, foram afetados por outros fatores como socioeconômicos, culturais e até motivacionais, situações estressantes como tempo limitado para apresentação e entrega de trabalhos, timidez para fazer perguntas em público ou procrastinação quando o material estava disponível a qualquer momento, prejudicando seu aprendizado (Bruggeman et al., 2022).

Desta forma, os professores em geral implementaram novas ferramentas pedagógicas construtivistas e conectivistas onde a colaboração simultânea professor-aluno foi essencial para trabalhar os conhecimentos em diversas áreas, incluindo a química, bioquímica, farmácia e outras. Normalmente essas áreas possuem um importante componente presencial através das práticas laboratoriais, que foram inviabilizadas devido às questões de saúde pública. Por isso, algumas estratégias de aprendizagem foram focadas no desenvolvimento de 5 componentes principais, descobrir, aprender, praticar, colaborar e avaliar. Por exemplo, com o auxílio de plataformas como o YouTube, foi possível gerar vídeos pré-gravados que os alunos podiam assistir e repetir em qualquer momento, trabalhar em seu próprio ritmo para descobrir novos aspectos importantes em sua formação, juntamente com links de acesso gratuito e outros materiais digitais enviados pelo professor. Posteriormente, os professores usaram programas como Google Meet, Zoom e Skype para suas reuniões ou

aulas, onde buscaram reforçar os conhecimentos adquiridos antes da pandemia e aprender novos conceitos, que foram postos em prática por meio do desenvolvimento do trabalho em equipe ou individual. Tais ferramentas possibilitaram colaborações entre os educandos, em treinamentos coletivos, já que no meio das aulas surgiam diferentes questões sobre os conteúdos, assim como dos recursos tecnológicos utilizados. Por fim, as avaliações também foram adequadas à nova realidade, a fim de avaliar se os objetivos de aprendizagem foram alcançados (Lapitan et al., 2021).

1.10 Perspectivas futuras da química computacional no processo de aprendizagem

Como se sabe, os avanços tecnológicos abrangem atualmente todas as áreas de nossas vidas e nas ciências químicas esse fato também é de suma importância. Assim, espera-se a consolidação e a popularização de novas tecnologias no campo da química computacional. Um exemplo é a Inteligência Artificial (IA), que se baseia em um processo automático de várias tarefas que normalmente seriam feitas por seres humanos, ou seja, uma simulação que auxilia na resolução de determinados problemas. A IA é amplamente utilizada em processos de retro síntese, para prever o resultado de uma reação química, em planejamento molecular, para tratamento de efluentes, em nanotecnologia, descoberta de medicamentos, para prever propriedades moleculares, entre outras coisas. A IA tem um ótimo potencial em aplicações pedagógicas, o que pode contribuir substancialmente para cativar os alunos em todo o esplendor da química, planejar futuras práticas laboratoriais, trabalhar conceitos computacionais envolvendo IA, entre outras possibilidades. O uso da IA também pode facilitar a vida dos alunos, principalmente em momentos que as atividades presenciais não são acessíveis, ou que são realizadas de maneira remota (Choudhary et al., 2021; Tai et al., 2020).

Outra perspectiva futura é o desenvolvimento do metaverso, ou seja, um universo dentro do mundo digital que cria um ambiente virtualizado, mas com características muito semelhantes ao nosso ambiente cotidiano. Neste caso, o

uso de óculos especiais e diferentes programas possibilita a interação dentro deste sistema cibernético que ainda está em desenvolvimento, embora haja alguns avanços como na medicina, para estudar dinamicamente muitas das doenças que afligem a sociedade ou problemas como depressão, ansiedade, problemas cognitivos e sociais, contudo mais tempo de desenvolvimento será necessário para compreendermos as possibilidades de aplicação dessa ferramenta (Sun et al., 2022). Na área da educação, foi proposta a utilidade do metaverso para aprender novos idiomas, pois geraria um ambiente onde os alunos viveriam 100% naquele idioma, otimizando o processo. Outra aplicação seria para aqueles que estão estudando para serem professores terem experiências com grupos de alunos em instituições de avatares, facilitando praticar sua didática em ambientes controlados, incluindo a possibilidade de os alunos participarem de atividades que não seriam possíveis no mundo real, seja pelo custo ou pela falta de materiais, o que lhes permitiria explorar seus pensamentos em situações complexas ou autênticas (Hwang & Chien, 2022). Essas novas possibilidades, na área da química, por exemplo, podem permitir o desenvolvimento de práticas ou processos químicos muito caros ou altamente perigosos, reduzindo assim o consumo de reagentes, poluentes atmosféricos e periculosidade.

A realidade aumentada é a terceira perspectiva que pode ser mencionada, embora atualmente várias investigações tenham sido realizadas sobre o uso dessa ferramenta para gerar um ambiente mais real do que em um computador convencional e que, diferentemente do metaverso, possui um número maior de publicações. A realidade aumentada pode ser uma ferramenta útil, pois o desenvolvimento de avaliações acadêmicas, por exemplo, tem dado resultados quantitativamente superiores em relação aos alunos que não tiveram a mesma experiência de realidade aumentada, dessa maneira, a referida ferramenta permite a visualização e memorização de diferentes propriedades químicas e equações ou reações específicas, facilitando a aprendizagem (S. Y. Chen & Liu, 2020). A realidade aumentada também pode ser utilizada para estimular alunos em formação inicial, levando em conta que nos primeiros anos de ensino nosso cérebro ainda está em desenvolvimento e em meio a esse processo de

aprendizado contínuo é preciso estímulo adequado, paciência e disciplina (Cai et al., 2014).

O uso de sistemas automatizados, para a química, envolve o desenvolvimento de robôs e o gerenciamento de tecnologias que ainda estão sendo testadas, indicando a necessidade iminente de continuarmos em nosso aprendizado diário e nos adaptarmos pouco a pouco às mudanças e avanços tecnológicos (Thurow et al., 2021).

5. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Em linhas gerais, pode-se dizer que a química computacional na educação vem ganhando espaço no meio acadêmico e constitui realmente uma ferramenta pedagógica que é sem dúvida essencial, com potencial de mudar os paradigmas relacionados à educação tradicional. Embora as questões socioeconômicas influenciem o acesso à tecnologia, o foco principal nos últimos anos tem sido buscar que os alunos que estão em uma instituição pública ou privada tenham a oportunidade de acessar esse tipo de informação e serem capacitados para utilizar as ferramentas da química computacional. Além disso, situações como a pandemia de COVID-19 têm ressaltado a necessidade de buscarmos alternativas de ensino nos momentos em que as atividades presenciais não são possíveis, razão pela qual será de grande interesse para muitos continuar desenvolvendo programas, aplicativos móveis ou mesmo páginas de internet, que permitam cálculos computacionais relacionados à química.

Respeito ao fator pedagógico, é necessário enfatizar como a visualização tridimensional facilita a aprendizagem de ideias teóricas difíceis para os alunos de áreas como química ou afins. Além disso, é uma parte importante do desenvolvimento integral dos alunos, para motivá-los a continuar formulando novas perguntas e dando possíveis respostas do ponto de vista científico.

Entre os resultados esperados como perspectivas futuras deste trabalho, pretende-se que os alunos tenham uma melhor compreensão dos conceitos lecionados na área da química orgânica e bioquímica, através da manipulação de ferramentas computacionais de fácil acesso.

Outro aspecto importante do material desenvolvido é a possibilidade de auxiliar o trabalho docente, contribuindo para que possam ilustrar, por meio de um ou mais programas, conceitos teóricos importantes.

Por fim, este material utiliza português e espanhol, visando abranger um maior número de usuários, visto que, atualmente, poucas informações sobre os processos de química computacional estão disponíveis em espanhol ou

português com acesso gratuito. Dessa maneira, o presente trabalho tem o potencial de impactar positivamente na formação de vários novos usuários.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDUL HUSSEIN, E. et al. **1-Isoquinolinyl phenyl ketone as a corrosion inhibitor: A theoretical study**. *Materials Today: Proceedings*. Anais.Elsevier Ltd, 2021.

ABDULKERIM, S. et al. Enhancing higher education teaching and learning in northern Syria: Academic development needs of teaching staff at free Aleppo and Sham universities. **International Journal of Educational Research Open**, v. 3, p. 100143, 1 jan. 2022.

ABREU, P. A. et al. Computational strategy for visualizing structures and teaching biochemistry. **Biochemistry and Molecular Biology Education**, v. 47, n. 1, p. 76–84, 1 jan. 2019.

ACUÑA, F. **La Química Computacional com a eina per promoure l'aprenentatge basat en modells en els centres d'educació secundària**. [s.l.] Universitat de les Illes Balears, 2018.

ACUNA, V. V.; HOPPER, R. M.; YODER, R. J. Computer-Aided Drug Design for the Organic Chemistry Laboratory Using Accessible Molecular Modeling Tools. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 3, p. 760–763, 10 mar. 2020.

ALKHATEEB, H. et al. Challenges facing teacher education in Qatar: Q methodology research. **Heliyon**, v. 8, n. 7, p. e09845, 1 jul. 2022.

ANDRÉS, C. et al. **Uso de la Realidad Aumentada como Estrategia de Aprendizaje para la Enseñanza de las Ciencias Naturales**. Tese de Especialidade—Bogotá: Universidad Cooperativa de Colombia, 2019.

ARISTIZABAL, E.; PORTILLA, N.; BUITRAGO, A. **Enseñar y Aprender Utilizando TIC**. [s.l.: s.n.].

ARORA, S.; TYAGI, A. Music as a blend of spirituality, culture, and mind mollifying drug. **Applied Acoustics**, v. 189, p. 108615, 28 fev. 2022.

ARROIO, A. et al. O Ensino de Química Quântica e o Computador na Perspectiva de Projetos the Teaching of Quantum Chemistry and the Computer from the Perspective Projects. **Química Nova**, v. 28, n. 2, p. 360–363, 2005.

ARROUSSE, N. et al. The inhibition behavior of two pyrimidine-pyrazole derivatives against corrosion in hydrochloric solution: Experimental, surface analysis and in silico approach studies. **Arabian Journal of Chemistry**, v. 13, n. 7, p. 5949–5965, 1 jul. 2020.

BALL, K. A.; HE, K.; HENDRICKSON, H. P. Engaging undergraduate students in computational chemistry research: A tutorial for new assistant professors. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 120, n. 20, 15 out. 2020.

BARANOWSKA-ŁĄCZKOWSKA, A. et al. Towards understanding the interaction of (S)-thalidomide with nucleobases. 2020.

BATISTA, V. S. et al. CONSTRUÇÃO, OTIMIZAÇÃO E ANCORAGEM MOLECULAR DE SUBSTÂNCIAS BIOATIVAS EM BIOMACROMOLÉCULAS: UM TUTORIAL PRÁTICO. **Química Nova**, v. 45, n. 2, p. 223–234, 2022.

BEATRIZ, M.; MEDINA, E. Influencia de la interacción alumno-docente en el proceso enseñanza-aprendizaje. **PAAKAT: Revista de Tecnología y Sociedad**, v. 0, n. 8, 2015.

BINEV, Y. et al. NavMol 3.0: Enabling the representation of metabolic reactions by blind users. **Bioinformatics**, v. 34, n. 1, p. 120–121, 1 jan. 2018.

BRITO, S. L. Um ambiente Multimediatizado para Construção do conhecimento em Química. n. 14, 2001.

BROVELLI SEPÚLVEDA, F.; CAÑAS URRUTIA CARLA BOBADILLA GÓMEZ, F. Herramientas Digitales para la Enseñanza y Aprendizaje de Química en Escolares Chilenos. **Educación Química**, v. 29, n. 3, p. 99–107, 2018.

BRUGGEMAN, B. et al. Exploring university teachers' online education during COVID-19: Tensions between enthusiasm and stress. **Computers and Education Open**, v. 3, p. 100095, dez. 2022.

CAI, S.; WANG, X.; CHIANG, F. K. A case study of Augmented Reality simulation system application in a chemistry course. **Computers in Human Behavior**, v. 37, p. 31–40, 2014.

CARRIÓN-PAREDES, F. A. et al. Simulador virtual PhET como estrategia metodológica para el aprendizaje de Química. **CIENCIAMATRIA**, v. 6, n. 3, p. 193–216, 20 nov. 2020.

CENTRO DE TIFLOTECNOLOGÍA E INNOVACIÓN DE LA ONCE. **Disponible el Editor Científico ONCE**. Disponible em: <<https://cti.once.es/noticias/disponible-el-editor-cientifico-once>>. Acesso em: 25 jul. 2022.

CHAN-HUOT, M. et al. NMR studies of the protonation states of pyridoxal-5 O-phosphate in water. 2010.

CHEMAXON. **Marvin**. Disponível em: <<https://chemaxon.com/marvin>>. Acesso em: 26 jun. 2023.

CHENG, C. et al. Can Likert scales predict choices? Testing the congruence between using Likert scale and comparative judgment on measuring attribution. **Methods in Psychology**, v. 5, p. 100081, 1 dez. 2021.

CHEN, M.-J.; GUO, C.-Y.; TANG, C. W. Monitoring learning-oriented school education: Indicator construction and their application. **Studies in Educational Evaluation**, v. 73, n. 101142, 1 jun. 2022.

CHEN, S. Y.; LIU, S. Y. Using augmented reality to experiment with elements in a chemistry course. **Computers in Human Behavior**, v. 111, 1 out. 2020.

- CHOUDHARY, N.; BHARTI, R.; SHARMA, R. Role of artificial intelligence in chemistry. **Materials Today: Proceedings**, v. 48, p. 1527–1533, 2021.
- CODY, J.-W. D. Laboratory Sequence in Computational MethodsWfor Introductory ChemistryJason. **Journal of Chemical Education**, v. 80, n. 7, p. 793–795, 2003.
- COPRIADY, J. et al. In-service training and teaching resource proficiency amongst Chemistry teachers: the mediating role of teacher collaboration. **Heliyon**, v. 7, n. 5, p. e06995, 1 maio 2021a.
- COPRIADY, J. et al. In-service training and teaching resource proficiency amongst Chemistry teachers: the mediating role of teacher collaboration. **Heliyon**, v. 7, n. 5, p. e06995, 1 maio 2021b.
- CORDELLA, A. et al. Dopamine loss alters the hippocampus-nucleus accumbens synaptic transmission in the Tg2576 mouse model of Alzheimer’s disease. 2018.
- COVARRUBIAS PAPAHIU, P.; MAGDALENA PIÑA ROBLEDO, M. La interacción maestro-alumno y su relación con el aprendizaje. **Revista Latinoamericana de Estudios Educativos (México)**, n. 1, p. 47–84, 2004.
- DA SILVA, J. N. et al. HSG400 – Design, implementation, and evaluation of a hybrid board game for aiding chemistry and chemical engineering students in the review of stereochemistry during and after the COVID-19 pandemic. **Education for Chemical Engineers**, v. 36, p. 90–99, 1 jul. 2021.
- DASSAULT SYSTÈMES. **Free Download: BIOVIA Discovery Studio Visualizer v 21.1.0.020298 - Dassault Systèmes**. Disponível em: <<https://discover.3ds.com/discovery-studio-visualizer-download>>. Acesso em: 26 jun. 2023.
- DENG, R.; BENCKENDORFF, P.; GAO, Y. Limited usefulness of learning style instruments in advancing teaching and learning. **The International Journal of Management Education**, v. 20, n. 3, p. 100686, 1 nov. 2022.
- 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, p. 711–721, 2019.
- DUKE, B. Use of the Huckel Molecular Orbital Computer Programs in Teaching. **Journal of Chemical Education**, v. 49, n. 10, 1972.
- 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.
- FARTARIA, R. P. S. et al. NavMol 2.0 - A molecular structure navigator/editor for blind and visually impaired users. **European Journal of Organic Chemistry**, n. 8, p. 1415–1419, mar. 2013.
- FATEMAH, A.; RASOOL, S.; HABIB, U. Interactive 3D Visualization of Chemical Structure Diagrams Embedded in Text to Aid Spatial Learning Process of

Students. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 4, p. 992–1000, 14 abr. 2020.

FELLER, S. D. R. M. P. Program of Computational Chemistry Exercises for the First-Semester General Chemistry Course. **Journal of Chemical Education**, v. 81, n. 2, p. 283–287, 2004.

GAMBOA, J. et al. Las TICs como herramienta para visualizar estructuras moleculares en la enseñanza de la Química General The ICTs as a tool to visualize molecular structures in the teaching process of General Chemistry. **Revista Cubana de Química**, v. 29, n. 3, p. 466–479, 2017.

GARZÓN-ARTACHO, E. et al. Teachers' perceptions of digital competence at the lifelong learning stage. **Heliyon**, v. 7, n. 7, 1 jul. 2021.

GHAFOURI-FARD, S. et al. Angiotensin converting enzyme: A review on expression profile and its association with human disorders with special focus on SARS-CoV-2 infection. 2020.

GHASEM, N.; GHANNAM, M. Challenges, benefits & drawbacks of chemical engineering on-line teaching during Covid-19 pandemic. **Education for Chemical Engineers**, v. 36, p. 107–114, 1 jul. 2021.

GOLTZ, F.; SADAKATA, M. Do you listen to music while studying? A portrait of how people use music to optimize their cognitive performance. **Acta Psychologica**, v. 220, p. 103417, 2021.

GOUWS, S. Teaching for chemical process technicians. **Education for Chemical Engineers**, v. 39, p. 6–14, 1 abr. 2022.

GRUSHOW, A.; REEVES, M. S. Using Computational Methods to Teach Chemical Principles: Overview. **American Chemical Society Symposium Series**, v. 1, p. 1–10, 2019.

HAMEDI, N. et al. Effects of circularly-polarized electromagnetic fields on solvated hemoglobin structure. 2020.

HWANG, G.-J.; CHIEN, S.-Y. Definition, roles, and potential research issues of the metaverse in education: An artificial intelligence perspective. **Computers and Education: Artificial Intelligence**, v. 3, p. 100082, 2022.

JANZEN, K.; PANITZ, R.; GLÜCKLER, J. Education premium and the compound impact of universities on their regional economy. **Research Policy**, v. 51, n. 1, p. 104402, 1 jan. 2022.

JIMÉNEZ, P. Education as a social, human and fundamental law: Principles and perspectives of modern education. **Revista de Investigações Constitucionais**, v. 6, n. 3, p. 669–686, 1 dez. 2019.

JONES, L. L. How multimedia-based learning and molecular visualization change the landscape of chemical education research. **Journal of Chemical Education**, v. 90, n. 12, p. 1571–1576, 10 dez. 2013.

KAMP, J. et al. Stereoselective ketamine effect on cardiac output: a population pharmacokinetic/pharmacodynamic modelling study in healthy volunteers. **Anaesth**, v. 2021, p. 1–2, 2021.

KOVALEVSKY, A. Y. et al. Direct Determination of Protonation States of Histidine Residues in a 2 Å Neutron Structure of Deoxy-Human Normal Adult Hemoglobin and Implications for the Bohr Effect. **Journal of Molecular Biology**, v. 398, p. 276–291, 2010.

KOZLOVA, D.; PIKHART, M. The Use of ICT in Higher Education from the Perspective of the University Students. **Procedia Computer Science**, v. 192, p. 2309–2317, 1 jan. 2021.

KRANC, S. N. et al. Computational Modeling: Exploring How Mini Reserach Projects and Classroom Activities Impact Student Learning. **Biophysical Journal**, v. 116, n. 3, p. 450a, 15 fev. 2019.

KRISHNAMURTHY, N. Teaching Freshmen Chemistry in India During the COVID-19 Pandemic: Student Perspectives and Challenges. **Journal Chemical Education**, v. 98, p. 3891, 2021.

LAPITAN, L. D. et al. An effective blended online teaching and learning strategy during the COVID-19 pandemic. **Education for Chemical Engineers**, v. 35, p. 116–131, 1 abr. 2021.

LIN, C. C. et al. Effectiveness of the use of concept maps and simulated cases as a teaching-learning strategy in enhancing the learning confidence of baccalaureate nursing students: A qualitative approach. **Nurse Education Today**, v. 115, p. 105418, 1 ago. 2022.

MALIK, N.; BZDOK, D. From YouTube to the brain: Transfer learning can improve brain-imaging predictions with deep learning. **Neural Networks**, v. 153, p. 325–338, 1 set. 2022.

MAMMINO, L. Computational chemistry for green design in chemistry and pharmacy: Building awareness in the classroom. **Sustainable Chemistry and Pharmacy**, v. 18, p. 100283, 1 dez. 2020.

MARCELA, Y.; GARCÍA, D. Enseñanza Aprendizaje de la estructura de proteínas utilizando herramientas virtuales. 2016.

MARTIN, N. Use of the Hiickel Molecular Orbital Computer Programs in Teaching. v. 75, n. 2, p. 241–243, 1998.

MASSAGLIA, S. et al. Food sustainability perception at universities: Education and demographic features effects. **The International Journal of Management Education**, v. 20, n. 2, p. 100653, 1 jul. 2022.

MAY, L. et al. Developing tools for learning oriented assessment of interactional competence: Bridging theory and practice. **Language Testing**, v. 37, n. 2, p. 165–188, 1 abr. 2020.

MCDONALD, A. R. et al. Building capacity for undergraduate education and training in computational molecular science: A collaboration between the MERCURY consortium and the Molecular Sciences Software Institute. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 120, n. 20, 15 out. 2020.

MUBARAKALI, D. et al. An evidence of microalgal peptides to target spike protein of COVID-19: In silico approach. 2021.

NavMol [Version 4.h]. Disponível em: <http://neural.dq.fct.unl.pt/molinsight/Navmol_pt.htm>. Acesso em: 26 jul. 2022.

OFELIA MUÑOZ-OSUNA, F. et al. NOVIEMBRE DE 2013 • EDUCACIÓN QUÍMICA Actitudes que propician el aprendizaje de la Química en estudiantes universitarios conforme avanzan en la carrera. v. 24, n. 2, p. 1870–8404, 2013.

OINAS, S. et al. Remote learning experiences of girls, boys and non-binary students. **Computers & Education**, v. 183, p. 104499, 1 jul. 2022.

ORJI, I. J.; OJADI, F.; OKWARA, U. K. Assessing the pre-conditions for the pedagogical use of digital tools in the Nigerian higher education sector. **The International Journal of Management Education**, v. 20, n. 2, p. 100626, 1 jul. 2022.

PAGLIARO, M. Chemistry Education Fostering Creativity in the Digital Era. **Israel Journal of Chemistry**, v. 59, n. 6, p. 565–571, 1 jun. 2019.

PARGA LOZANO, D. L.; PIÑEROS-CARRANZA, G. Y. Enseñanza de la química desde contenidos contextualizados. **Educación Química**, v. 29, n. 1, p. 55, 9 abr. 2018.

PASELK, R. A.; ZOELLNER, R. W. Molecular Modeling and Computational Chemistry at Humboldt State University. **Journal of Chemical Education**, v. 79, n. 10, p. 27, 2002.

PATIÑO, D. **Uso de la Química Computacional como Herramienta para la Enseñanza de la Química en Instituciones Educativas**. Tese de graduação—Bogotá: Universidad de Ciencias Aplicadas, fev. 2017.

PEARSON, J. K. Introducing the Practical Aspects of Computational Chemistry to Undergraduate Chemistry Students. **In the Laboratory www.JCE.DivCHED.org**, v. 84, n. 8, p. 1323, 2007.

PEÑA-CAARO, J. M.; GREGORIO-RAMÍREZ, O.; BARRERA-FIGUEROA, B. E. EDUCACIÓN QUÍMICA Los métodos experimentales que permiten el estudio de las macromoléculas de la vida: historia, fundamentos y perspectivas. **Educación Química** v. 24, n. 2, p. 237–246, 2013.

PEREIRA, F. et al. Sonified Infrared Spectra and Their Interpretation by Blind and Visually Impaired Students. **Journal Chemical Education**, v. 90, p. 1028–1031, 19 jul. 2013.

PODOLYAN, Y.; LESZCZYNSKI, J. MaSK: A visualization tool for teaching and research in computational chemistry. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 109, n. 1, p. 8–16, 2009.

RAGNO, R. et al. Teaching and Learning Computational Drug Design: Student Investigations of 3D Quantitative Structure-Activity Relationships through Web Applications. **Journal of Chemical Education**, v. 97, n. 7, p. 1922–1930, 14 jul. 2020.

REES, S.; KIND, V.; NEWTON, D. Meeting the Challenge of Chemical Language Barriers in University Level Chemistry Education. **Israel Journal of Chemistry**, v. 59, n. 6, p. 470–477, 1 jun. 2019.

RIBEIRO, A. A.; GRECA, I. M. Simulações Computacionais e Ferramentas de Modelização em Educação Química: Uma Revisão de Literatura Publicada. **Quimica Nova**, v. 26, n. 4, p. 542–549, 2003.

RICHARDS, L. B. LA INTERACCIÓN PROFESOR-ALUMNO. UNA VISIÓN DESDE LOS PROCESOS ATRIBUCIONALES. *Revista de la escuela de psicología*, vol. 4, p. 57 – 73, 2005.

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, 1 abr. 2020.

RUSWANTO, R. et al. In silico study of 1-benzoyl-3-methylthiourea derivatives activity as epidermal growth factor receptor (EGFR) tyrosine kinase inhibitor candidates. **Chemical Data Collections**, v. 34, p. 100741, 1 ago. 2021.

SCHIFFMAN, L. G.; LAZAR KANUK, L.; WISENBLIT, J. **Comportamiento del consumidor**. [s.l.] Prentice Hall, 2010.

SCOTT, R. Does university make you more liberal? Estimating the within-individual effects of higher education on political values. **Electoral Studies**, v. 77, p. 102471, 1 jun. 2022.

SIMONS, M.; MEEUS, W. Measuring Media Literacy for Media Education: Development of a Questionnaire for Teachers' Competencies. **Sas / Journal of Media Literacy Education**, v. 9, n. 1, p. 99–115, 2017.

SMITH, S. G. Chemical Education Today 1080. **Journal of Chemical Education**, v. 75, n. 9, 1998.

STANFORD UNIVERSITY. **Tutorials: Advantages, Disadvantages and Considerations**. Disponível em: <<https://web.stanford.edu/group/swain/cinf/workshop97jun/tutorials.html>>. Acesso em: 26 jun. 2023.

SUNKAR, S. et al. Genetic variations and their impact on protein function: Study on deleterious nsSNPs in Cancer related genes of Wnt pathway. **Meta Gene**, v. 23, p. 100626, 1 fev. 2020.

SUN, M. et al. The metaverse in current digital medicine. **Clinical eHealth**, v. 5, p. 52–57, dez. 2022.

TAHERDOOST, H. What Is the Best Response Scale for Survey and Questionnaire Design; Review of Different Lengths of Rating Scale / Attitude Scale / Likert Scale. **International Journal of Academic Research in Management (IJARM)**, v. 8, n. 1, p. 2296–1747, 2019.

TAI, X. Y. et al. The future of sustainable chemistry and process: Convergence of artificial intelligence, data and hardware. **Energy and AI**, v. 2, n. 100036, 1 nov. 2020.

THUROW, K. et al. Integrating Mobile Robots into Automated Laboratory Processes: A Suitable Workflow Management System. **SLAS Technology**, v. 26, n. 2, p. 232–235, 1 abr. 2021.

TOLEDO, S. M.; BLANCH, M. E.; MERINO RUBILAR, C. El contexto en la enseñanza de la química: Análisis de secuencias de enseñanza y aprendizaje diseñadas por profesores de ciencias de secundaria en formación inicial. **Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias**, v. 16, n. 1, p. 1604, 2019.

TUVI-ARAD, I.; BLONDER, R. Technology in the Service of Pedagogy: Teaching with Chemistry Databases. **Israel Journal of Chemistry**, v. 59, n. 6, p. 572–582, 1 jun. 2019.

VALLEJO ARDILA, D. L.; TAMAYO CÁCERES, Y. R.; MUNIVE, A. A. Uso terapéutico de los inhibidores de la enzima convertidora de angiotensina en pacientes con COVID-19: las «dos caras de la moneda». **Revista Colombiana de Cardiología**, v. 27, n. 4, p. 212–222, jul. 2020.

VÁZQUEZ GARCÍA, C. TRABAJO DE FIN DE GRADO GRADO EN FARMACIA Análisis y presentación de la estructura y función de una proteína. Estudio de la estructura y función de K-RAS. 2016.

WANG, H. et al. University education, homeownership and housing wealth. **China Economic Review**, v. 71, p. 101742, 1 fev. 2022.

WEDLER, H. B. et al. Applied computational chemistry for the blind and visually impaired. **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 11, p. 1400–1404, 9 out. 2012.

WRAY, E.; SHARMA, U.; SUBBAN, P. Factors influencing teacher self-efficacy for inclusive education: A systematic literature review. **Teaching and Teacher Education**, v. 117, p. 103800, 1 set. 2022.

WU, I.-L.; HSIEH, P.-J.; WU, S.-M. Developing effective e-learning environments through e-learning use mediating technology affordance and constructivist learning aspects for performance impacts: Moderator of learner involvement. **The Internet and Higher Education**, v. 55, p. 100871, 1 out. 2022.

YE, J.; ZHOU, J. Exploring the relationship between learning sentiments and cognitive processing in online collaborative learning: A network analytic approach. **The Internet and Higher Education**, v. 55, p. 100875, 1 out. 2022.

ZENG, W. et al. Towards a learning-oriented assessment to improve students' learning—a critical review of literature. **Educational Assessment, Evaluation and Accountability**, v. 30, n. 3, p. 211–250, 1 ago. 2018.

ZHU, J.-J. et al. Comparative antioxidant, anticancer and antimicrobial activities of essential oils from Semen Platycladi by different extraction methods. 2020.