

AVOGADRO NO ENSINO DE QUÍMICA: UM AVANÇADO EDITOR MOLECULAR DE VISUALIZAÇÃO DE UM GRANDE POTENCIAL PEDAGÓGICO

Gerliane da Costa Batista¹
Emanuelle Machado Marinho²
Marcia Machado Marinho³
Emmanuel Silva Marinho⁴

Resumo

Com a crescente evolução dos recursos computacionais, a utilização de novas tecnologias tem provocado uma transformação na sociedade, têm proporcionado um acesso rápido aos conhecimentos construídos pela humanidade. Na Química, assim como nas outras ciências, a isenção do computador e das novas tecnologias no ensino, pode ser um importante recurso para promover a passagem da informação ao usuário ou facilitar o processo de construção de conhecimento. O advento da informática no meio escolar é reflexo de uma sociedade baseada na informação e no conhecimento. Pesquisadores em ensino, buscam por meios que possam otimizar a compreensão dos alunos sobre conceitos de Química ou de Ciências em geral. Dentre os novos meios ou tecnologias, podemos destacar os Objetos de Aprendizagem (OA), que são recursos como softwares, vídeos, imagens. O *Avogadro*[®] é um dos diversos softwares educacionais disponibilizados para o exercício do ensino-aprendizado, programa que permite desenhar estruturas químicas, obtendo suas propriedades moleculares, dentre outras funções, é um programa gratuito que pode ser utilizado livremente, contendo interface compatível com a maioria dos editores de texto e com a Internet, é um programa de fácil manipulação e usabilidade, sendo empregado na realização de diversas tarefas. O objetivo do presente trabalho foi apresentar o software *Avogadro*[®], mostrando sua potencialidade para o ensino de química. A metodologia desenvolveu-se, inicialmente, pelo download do *software* gratuito *Avogadro*[®], apresentando-o em um caráter avaliativo, mostrando seus aspectos funcionais. As funções do *ArgusLab*[®] colaboram muito para a mediação do conteúdo e compreensão por parte do aluno em termos de visualização, mostrando por exemplo, os tipos de ligação e geometria das moléculas de forma mais dinâmica. Concluímos, que o uso do *software Avogadro*[®] no ensino de química, pode servir como ferramenta de apoio e recurso didático auxiliar à assimilação do conteúdo, facilitando o entendimento dos alunos em conteúdos que são considerados abstratos e de difícil compreensão.

Palavras-chave: Ensino de Química. Objeto de aprendizagem. Software. Avogadro.

¹ Acadêmica do Curso de Licenciatura em Química pela Universidade Estadual do Ceará - UECE.

E-mail: gerliane.batista@aluno.uece.br

² Acadêmica do Curso de Licenciatura em Computação pela Universidade Estadual do Ceará - UECE.

E-mail:

³ Mestre e, Biotecnologia(UFC), licenciada em Química pela Universidade Estadual do Ceará - UECE.

Email: marinho.marcia@gmail.com

⁶ Professor Adjunto da Universidade Estadual do Ceará – UECE. E-mail: emmanuel.marinho@uece.br

Abstract

With the increasing evolution of computing resources, the use of new technologies has provoked a transformation in society, have provided a quick access to the knowledge built by humanity. In Chemistry, as in other sciences, the exemption of computers and new technologies in teaching can be an important resource to promote the passage of information to the user or facilitate the process of knowledge construction. The advent of information technology in schools is a reflection of a society based on information and knowledge. Researchers in education, seek by means that can optimize students' understanding of chemistry or science concepts in general. Among the new media or technologies, we can highlight Learning Objects (OA), which are resources such as softwares, videos, images. Avogadro® is one of several educational software available for teaching-learning, a program that allows the design of chemical structures, obtaining its molecular properties, among other functions, is a free program that can be used freely, containing interface compatible with most text editors and the Internet, is a program that is easy to manipulate and usability, and is used to perform various tasks. The objective of this work was to present Avogadro® software, showing its potential for teaching chemistry. The methodology was initially developed by downloading Avogadro® free software, presenting it in an evaluative character, showing its functional aspects. The functions of ArgusLab® collaborate a great deal on the mediation of content and student comprehension in terms of visualization, showing, for example, the types of bonding and geometry of the molecules more dynamically. We conclude that the use of Avogadro® software in chemistry teaching can serve as a support tool and a didactic resource to help assimilate content, facilitating the understanding of students in contents that are considered abstract and difficult to understand.

Keywords: *Avogadro. Chemistry teaching. Learning object. Software.*

Introdução

Com a crescente evolução dos recursos computacionais, a utilização de novas tecnologias tem provocado uma transformação na sociedade, têm proporcionado um acesso rápido aos conhecimentos construídos pela humanidade. De acordo com Batista et al (2017) o advento da informática no meio escolar é um reflexo desta transformação.

Na Química, assim como nas outras ciências, a isenção do computador e das novas tecnologias no ensino, pode ser um importante recurso para promover a passagem da informação ao usuário ou facilitar o processo de construção de conhecimento. Valente (1999) afirma que a utilização da tecnologia aliada à educação contribui significativamente para construção do conhecimento, o que torna

possível automatizar métodos tradicionais de ensino e aprendizagem que tem também ajudado a criar novos métodos e a redefinir vigentes objetivos educacionais.

As tecnologias de informação e comunicação (TICs), trazem novas perspectivas e estratégias, já que de acordo com Lobo e Maia (2015) “são classificadas como tecnologias usadas para reunir, distribuir e compartilhar informações, ultrapassando os limites estabelecidos pelas velhas tecnologias”. Como exemplos dessas tecnologias, podemos citar os Softwares Educacionais (SE), que se caracterizam como sendo recursos digitais que podem ser usados e reutilizados como auxílio no processo de aprendizado. Segundo Jucá (2006), o que confere a um *software* o caráter educacional é a sua aplicação no processo ensino-aprendizagem, onde seu caráter didático, possibilita a construção do conhecimento em uma determinada área com ou sem a mediação de um professor. Borges (1999) defende que os *softwares* educativos podem estimular o desenvolvimento do raciocínio lógico e, conseqüentemente, da autonomia do indivíduo, a medida em que podem levantar hipóteses, fazer interferências e tirar conclusões a partir dos resultados apresentados.

Dentre os diversos softwares educacionais disponibilizados para o exercício do ensino-aprendizado, encontram-se o software Avogadro®. Este é um programa gratuito que pode ser utilizado livremente, contendo interface compatível com a maioria dos editores de texto e com a Internet (FLORES e MÓL, 2006), é um programa de fácil manipulação e usabilidade, sendo empregado na realização de diversas tarefas (GOMES e FILHO, 2012). Nesse contexto o presente trabalho teve como objetivo apresentar o software Avogadro®, mostrando sua potencialidade para o ensino de química.

Metodologia

Esta pesquisa foi realizada utilizando-se o software gratuito Avogadro®, sendo desenvolvida em três etapas: no primeiro momento, foi realizado o download do software no site (<https://avogadro.cc/>). No segundo momento, foi realizada uma análise das funções disponibilizadas pelo mesmo, apresentando-o em um caráter avaliativo, mostrando seus aspectos funcionais, que podem auxiliar na concretização do conteúdo por parte do aluno.

Resultados e discussão

Um dos recursos que vem sendo utilizado é o uso das ferramentas providas das novas tecnologias, um exemplo disso, são softwares educacionais, que estão sendo a cada vez mais incrementados e utilizados na área de ensino, muitos campos, como química, ciência dos materiais, física e biologia, precisam de programas de computador eficientes para construir e visualizar estruturas moleculares, e o software Avogadro® é um programa que atende essas necessidades (Figura 8).

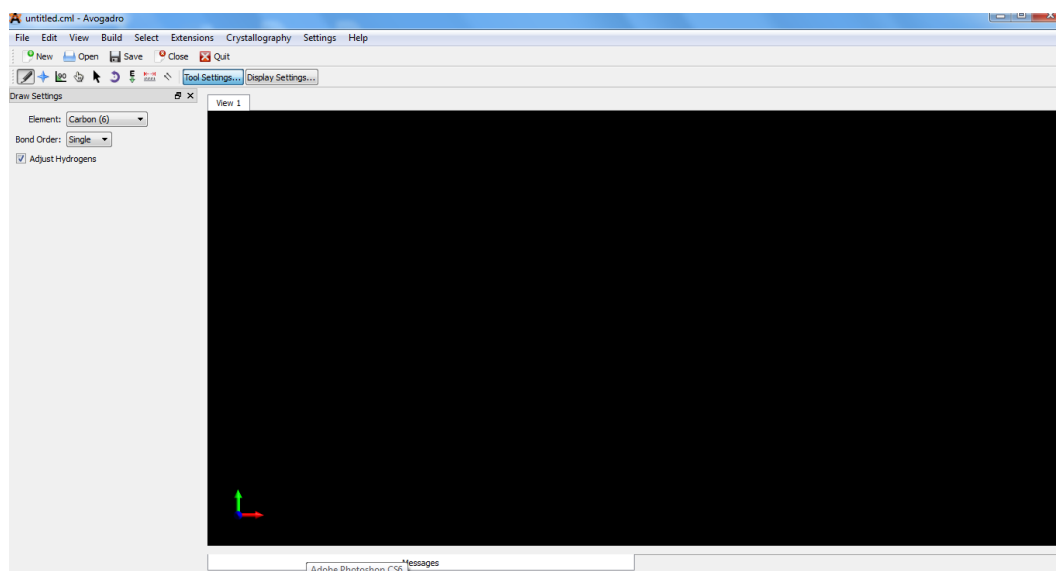


Figura 8 – Interface principal do Avogadro

O Avogadro é uma avançada ferramenta de visualização e edição molecular gratuita e de código aberto projetado para uso entre plataformas em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e áreas relacionadas. Oferece renderização flexível de alta qualidade e uma poderosa arquitetura de plug-ins. Oferece processamento flexível de alta qualidade e uma poderosa arquitetura de plugins. Dentre suas ferramentas, se destacam a possibilidade de:

- Multiplataforma: construtor / editor molecular;
- Manipular estruturas 3D;
- Fácil de instalar e edição gratuita;
- Internacional: Traduções para chinês, francês, alemão, italiano, russo, espanhol entre outras línguas.

- Intuitivo: construído para trabalhar com facilidade tanto para estudantes avançados quanto para pesquisadores.
- Determina diversas propriedades dos compostos desenhados, tais como: cálculo de energia e massa molecular;
- Flexível: Os recursos incluem a importação aberta de arquivos químicos do Babel, a geração de entrada para vários pacotes de química computacional, cristalografia e biomoléculas.

O software também permite que as moléculas criadas em 3D (figura 9) possam ser vistas sob vários ângulos, como uma animação, função esta que colabora muito para a transmissão do conteúdo e compreensão por parte do aluno em termos de visualização, é uma alternativa que permite que o professor faça a interação com os alunos, mostrando os tipos de ligação e geometria das moléculas, o que é complicado quando se usa apenas o livro didático e figuras em duas dimensões (SANTOS et al., 2010).

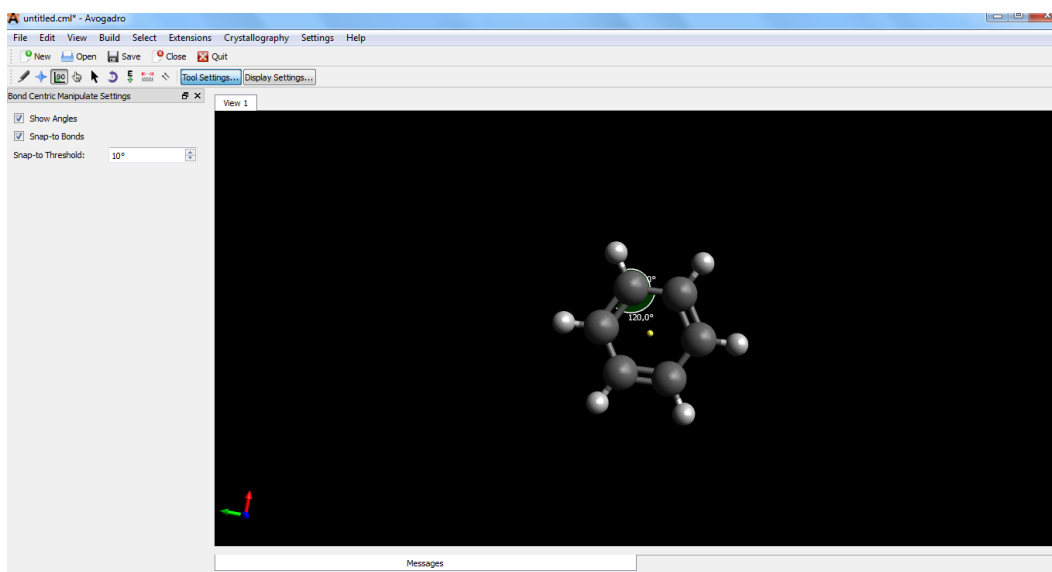


Figura 9 – visualização em 3D de uma molécula

Por ter uma interface de fácil entendimento e manuseio, pode ser utilizado como recurso na compreensão de conceitos como: geometria molecular, identificação dos ângulos de ligação (figura 10), torção dos ângulos (figura 11), hibridações, cálculo de energia (figura 12) e massa molecular, arranjo cristalino em aglomerados moleculares entre outros. Determina comprimentos de ligação, ângulos e diédricos.

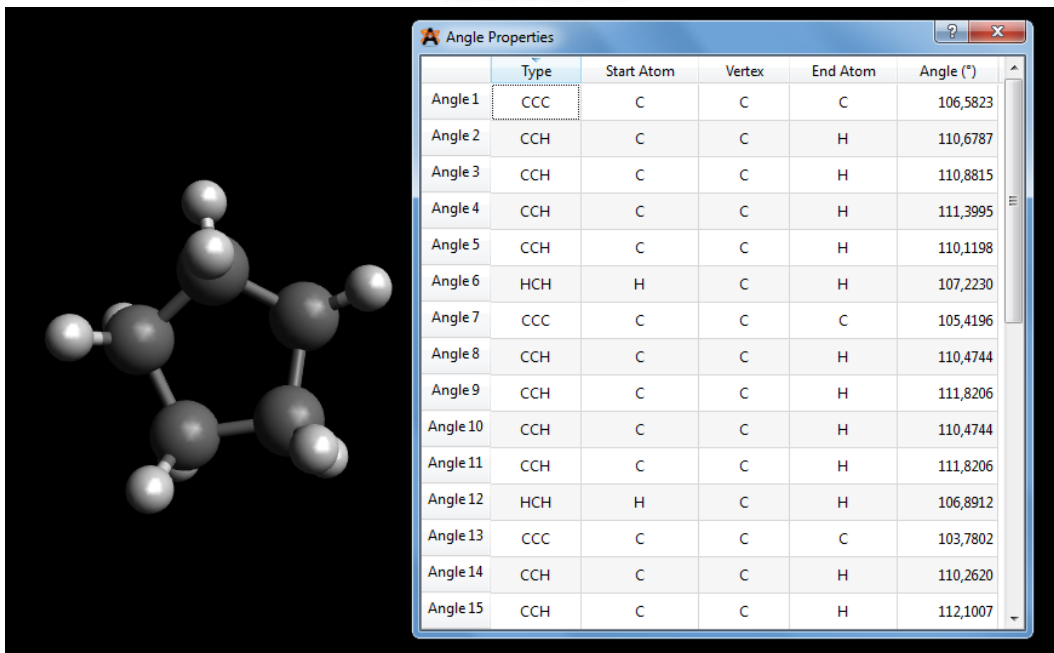


Figura 10 – Identificação dos ângulos de ligação

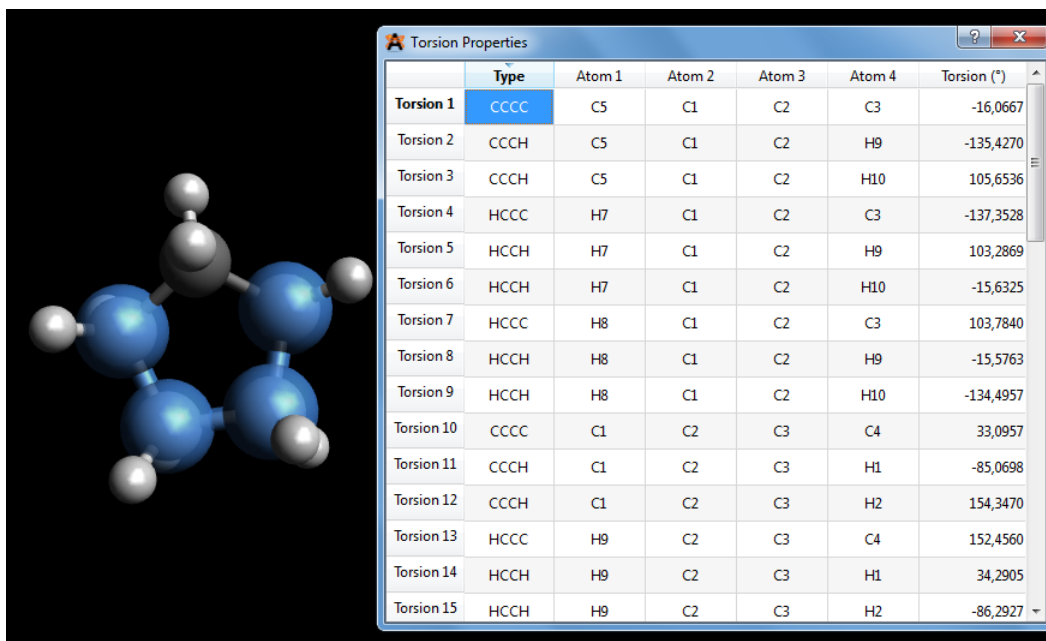


Figura 11 – Identificação de torção dos ângulos

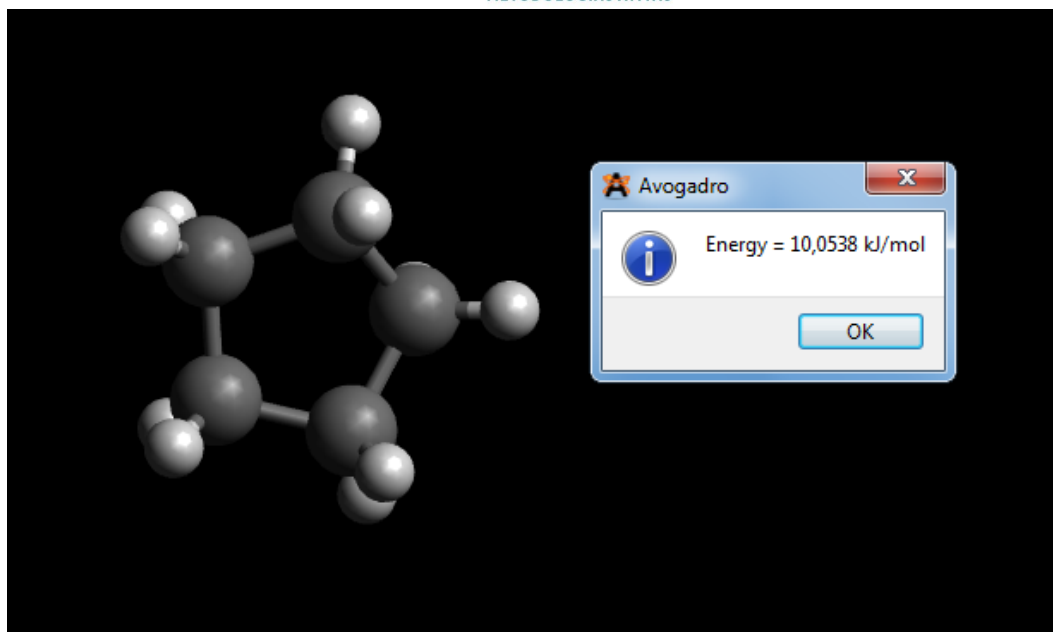


Figura 12 - cálculo de energia

O programa apresenta também propriedades moleculares, tais como: (nomeação das moléculas conforme a IUPAC, peso molecular, fórmula química e número de átomos) (figura 13).

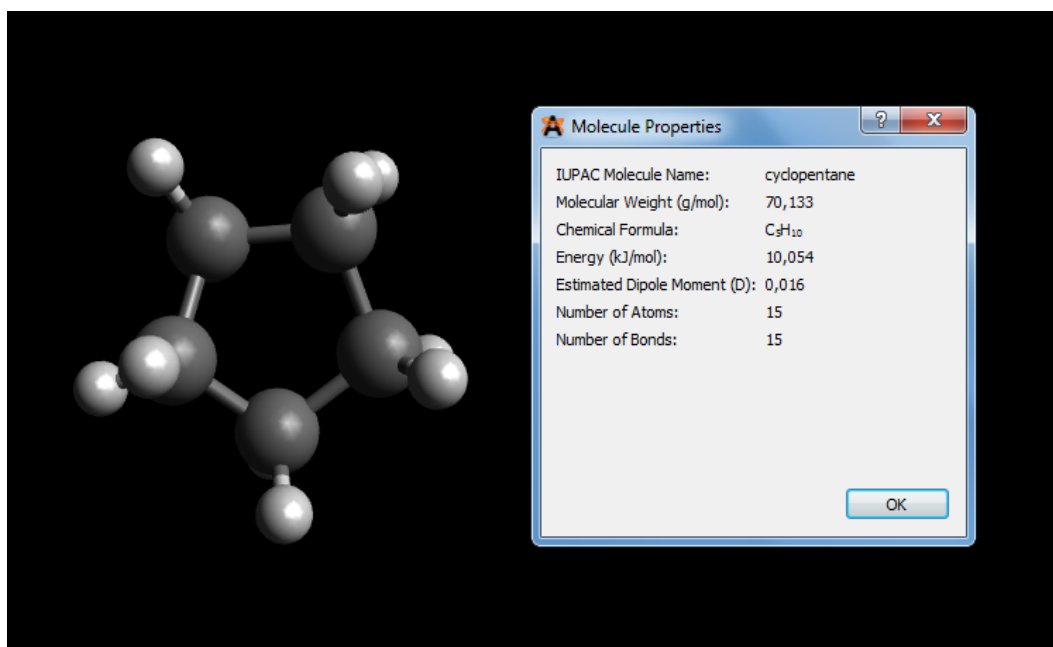


Figura 13 – propriedades moleculares

O software Avogadro também faz cálculos de mecânica molecular, voltados para simulação computacional em química, sendo um excelente recurso para alunos e professores. As extensões representam uma variedade bastante

diversificada de plugins, incluindo diálogos de geração de entrada para vários códigos de química quântica (figura 14), como GAMESS, Molpro, Mopac, NWChem, etc., animação da molécula e visualização de orbitais moleculares e densidade eletrônica, visualização de Espectros (visualiza os espectros dos arquivos de saída) (figura 15).

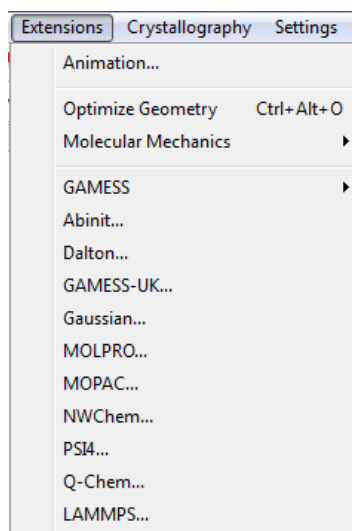


Figura 14 - Diálogos de geração de entrada para vários códigos de química quântica

O programa Além de construir moléculas átomo-a-átomo, também permite construir uma molécula: de fragmentos, os usuários podem inserir fragmentos pré-construídos de moléculas, ligantes ou seqüências de aminoácidos comuns, como mostrado na (Figura 16), ele inclui mais de 300 moléculas comuns e fragmentos moleculares para facilitar a construção de estruturas maiores. Em todos os casos, após a inserção do fragmento, a ferramenta de manipulação centralizada no átomo é selecionada, permitindo que o fragmento seja movido ou girado na posição facilmente.

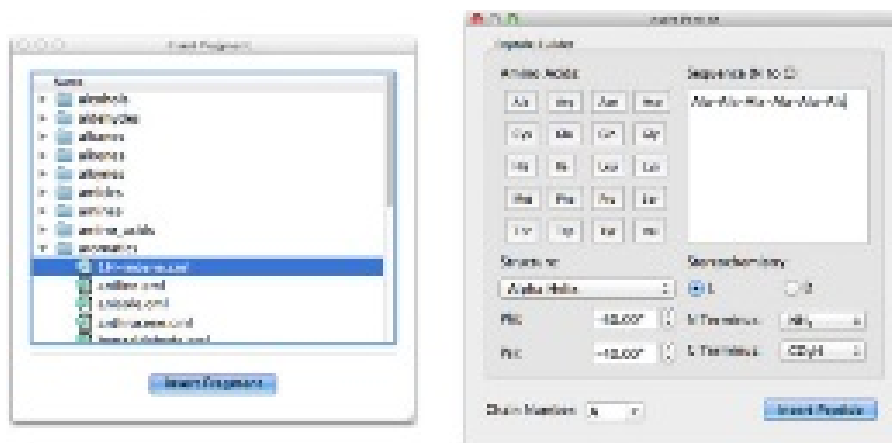




Figura 16 - Diálogos para inserir fragmentos pré-construídos. A esquerda mostra moléculas e as seqüências de aminoácidos certas.

O programa também apresenta a possibilidade da visualização dos Mapas Potenciais Eletrostáticos (Os mapas de potencial eletrostático ajudam a visualizar a distribuição de carga e outras propriedades relacionadas às cargas das moléculas) (Figura 17), que fornece a informação sobre os possíveis sítios de ligação entre as moléculas e seus receptores. Essas superfícies podem ser utilizadas para comparar com inibidores de diferentes substratos ou de estados de transições reacionais, incrementando assim, a descoberta de novos fármacos (RODRIGUES, 2001).

Considerações finais

É notável nos dias atuais a presença das novas tecnologias em nossa sociedade, e é de suma importância, principalmente na área da informática, sendo que essa nova configuração tem seus reflexos também na área educacional, pois atualmente há um avanço quanto a utilização das tecnologias como forma de facilitar o processo ensino-aprendizagem, o uso destas novas tecnologias, tem provocado na sociedade importantes e grandes avanços, proporcionando oportunidades para a utilização de ambientes de aprendizagem, que ultrapassam as possibilidades das tecnologias mais tradicionais. Este desenvolvimento tecnológico, permite o uso de recursos didáticos que incrementam o processo ensino-aprendizagem, recursos, como os *softwares*, estão cada vez mais inseridos e utilizados no processo de ensino-aprendizagem, como um recurso que pode subsidiar e auxiliar o referido processo.

O uso do software proposto Avogadro®, tem um grande potencial pedagógico no ensino de química, podendo ser utilizado como ferramenta auxiliar de apoio, pois a partir de suas funções apresentadas, ele pode ser utilizado como recurso didático para facilitação da compreensão dos alunos em conteúdos abstratos e de difícil compreensão e visualização.

Agradecimentos

A Universidade Estadual do Ceará (UECE), em especial Pró-Reitoria de Pós-Graduação e Pesquisa (Proppq) pelo apoio a realização deste trabalho. À Fundação Cearense de Amparo à pesquisa (FUNCAP) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes), fundação do Ministério da Educação (MEC) pela concessão de bolsa de estudo como apoio financeiro ao desenvolvimento científico.

Referências

- BATISTA, G.C., MARINHO, M. M., & MARINHO, E. S. Software Arguslab®: Um Recurso Didático Para O Ensino De Química. Revista Educacional Interdisciplinar (Redin). v. 6 Nº 1. Outubro, 2017.
- BORGES, H. (1999). Uma classificação sobre a utilização do computador pela escola. Fortaleza, Revista Educação em Debate, 1 (27): 135-138.
- FLORES, K. K. A.; MÓL, G. S. O uso do Software Educacional ACD/ChemSketch® como ferramenta dinâmica no Ensino de Química Orgânica. 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química. São Paulo, 19 à 25 de maio de 2016. Disponível em :< <https://sec.sbq.org.br/cd29ra/resumos/T0005-1.pdf>> Acesso em: 07/04/2018.
- GOMES, M. S. S. O.; FILHO, J. D. M. L. Simulações e modelos computacionais aplicados ao ensino de química. VII Congresso Norte Nordeste de Pesquisa e Inovação, 19 à 21 de outubro de 2012.
- JUCÁ, S. C. S. A relevância dos softwares educativos na educação profissional. Ciênc. cogn., Rio de Janeiro , v. 8, p. 22-28, ago. 2006 . Disponível em <http://pepsic.bvsalud.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-58212006000200004&lng=pt&nrm=iso>. Acesso em 03 abr. 2018.
- RODRIGUES, C. R. Processos modernos no desenvolvimento de fármacos: modelagem molecular. Caderno temático de Química nova na escola. N. 3, , pp. 43-49, 2001.
- SANTOS, D. O.; WARTHA, E. J.; FILHO, J. C. S. Softwares educativos livres para o Ensino de Química: Análise e Categorização. XV Encontro Nacional de Ensino de Química (XV ENEQ). Brasília, DF, 21 à 24 de julho de 2010.