

SOFTWARE ARGUSLAB®: UM RECURSO DIDÁTICO PARA O ENSINO DE QUÍMICA

Gerliane da Costa Batista¹

Márcia Machado Marinho²

Emmanuel Silva Marinho³

RESUMO

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 *ArgusLab*® 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. O objetivo do presente trabalho foi apresentar e avaliar o *software ArgusLab*®, comparando-o com outros softwares com funções semelhantes. A metodologia desenvolveu-se, inicialmente, pelo download do *software* gratuito *ArgusLab*®, apresentando-o em um caráter avaliativo, mostrando seus aspectos funcionais. Foi realizada uma entrevista com professor do curso de licenciatura em Química, da Faculdade de Filosofia Dom Aureliano Mattos, sobre a utilização do *software ArgusLab*® na sua prática docente. Em seguida, foi feita uma comparação com *softwares* educacionais que possuem funções semelhantes ao *ArgusLab*®. 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 ArgusLab*® 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-chaves: Ensino de Química. Objeto de Aprendizagem. *ArgusLab*®.

ABSTRACT

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

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

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

2. Doutoranda (Bolsista Capes) em Ciências Farmacêuticas pela Universidade Federal do Ceará - UFC. Email: marinho.marcia@gmail.com

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

Media or technologies, we can highlight the Learning Objects (OA), which are resources such as *software's*, videos, images. ArgusLab® is one of several educational software available for the teaching-learning exercise, a program that allows the design of chemical structures, obtaining their molecular properties, among other functions. The objective of the present work was to present and evaluate ArgusLab® software, comparing it with other software with similar functions. The methodology was initially developed by downloading the free ArgusLab® software, presenting it in an evaluative character, showing its functional aspects. An interview was conducted with professor of the licentiate course in Chemistry, Faculty of Philosophy Dom Aureliano Mattos, about the use of ArgusLab® software in his teaching practice. Then, a comparison was made with educational software that has functions similar to ArgusLab®. 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 ArgusLab® software in chemistry teaching can serve as a support tool and didactic resource to help assimilate content, facilitating students' understanding of contents that are considered abstract and difficult to understand.

Keywords: Teaching Chemistry. Learning Object. ArgusLab®.

1 INTRODUÇÃO

Com a crescente evolução dos recursos computacionais, a utilização de novas tecnologias têm provocado uma transformação na sociedade, que está cada vez mais se tornando uma sociedade baseada na informação e no conhecimento. O advento da informática no meio escolar é um reflexo desta transformação. Atualmente, a potencialidade do computador como instrumento didático para o ensino é muito valorizada e pode ser observada através da: grande quantidade de softwares didáticos produzidos e disponíveis no mercado, da procura, cada vez maior por softwares educacionais e, principalmente, o crescente número de usuários conectados à internet com a finalidade de buscar informações (BERTOLETTI, 2003).

A isenção do computador no ensino, pode ser um importante recurso para promover a passagem da informação ao usuário ou facilitar o processo de construção de conhecimento. No entanto, por intermédio da análise dos softwares, é possível entender que o aprender não deve estar restrito ao software, mas à interação do aluno-software. O uso de computadores para auxiliar o aprendiz a realizar tarefas, sem compreender o que está fazendo, é uma mera informatização do atual processo pedagógico. Já a

possibilidade que o computador oferece como ferramenta, para ajudar o aprendiz a construir conhecimento e a compreender o que faz, constitui uma verdadeira revolução do processo de aprendizagem e uma chance para transformar a escola (VALENTE, 1999).

Por ser uma disciplina essencialmente experimental (SANTOS et al., 2010), a Química exige uma aula dinâmica e variada, mas a maneira como a Ciência é ensinada, pode influenciar a assimilação dos alunos, sendo possível ser vistos como uma disciplina abstrata e de difícil compreensão. Um dos principais objetivos dos pesquisadores na área de ensino, é a busca por métodos ou ferramentas para otimizar a compreensão de Química pelos alunos (RAUPP; SERRANO e MARTINS, 2008).

Para uma melhoria no processo de ensino e aprendizagem no ensino de Química, se faz necessário a utilização de novas tecnologias ou métodos, possibilitando aos estudantes, uma melhor visualização e compreensão da disciplina (OLIVEIRA e SILVA 2015).

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 objetos de aprendizagem (OA), que são definidos como qualquer recurso digital que possa ser reutilizado para auxiliar no processo de ensino e aprendizagem (WILEY, 2002).

É preciso destacarmos a importância do aspecto lúdico dos objetos de aprendizagem, tornando o processo de aprendizagem mais participativo e dinâmica, despertando nos alunos a satisfação de realizar a atividade num software educativo, por exemplo (SALES, 2005).

Os objetos de aprendizagem têm um conceito de formar blocos de informações e de estar inserido em um ambiente de aprendizagem, devendo apresentar características como adaptabilidade, reusabilidade, acessibilidade, durabilidade dentre outras (HOFFMANN, 2007).

Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo apresentar o *software* ArgusLab® de forma demonstrativa e avaliativa, mostrando-o como uma ferramenta didática, que pode ser eficaz e capaz de auxiliar o professor na transmissão do

conhecimento, colaborando com o aprendiz quanto à compreensão dos conteúdos a ele transmitidos.

2 METODOLOGIA

Esta pesquisa foi realizada utilizando-se o *software* gratuito ArgusLab®, sendo desenvolvida em três etapas: no primeiro momento, foi realizado o download do *software* no site <http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html>, seguido de 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.

No segundo momento, foi realizada uma entrevista com um professor do curso de Licenciatura em Química, da Faculdade de Filosofia Dom Aureliano Mattos FAFIDAM/UECE, sobre a utilização do *software* ArgusLab® na sua prática docente.

E no terceiro momento, foi feita uma comparação com outros *softwares* educacionais que objetivam exercer as mesmas funções.

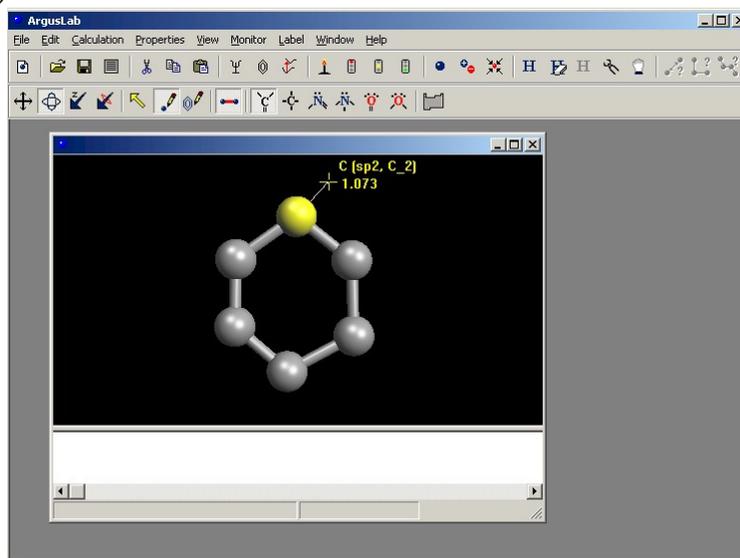
3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

De acordo com Batista (2016), alguns dos recursos que vem sendo utilizados, são as ferramentas provindas das novas tecnologias, como os *softwares* educacionais, que estão sendo cada vez mais incrementados e utilizados. Na área da Química não é diferente, como é o caso do *software* ArgusLab®, que é uma ferramenta indicada a princípio, para quem trabalha em um laboratório de pesquisa, estudantes ou trabalhadores da indústria farmacêutica e para estudantes da universidade. O programa permite desenhar, por exemplo, configurações moleculares muito complexas como as proteínas, obter cadeias helicoidais de aminoácidos etc. O ArgusLab® é distribuído livremente para plataformas Windows pela Planaria Software®, que é um sistema *tree* para organizar todos os elementos, para adicionar a qualquer estrutura antes de representar esses dados como um desenho, permitindo que você analise de maneira visual. Em particular, o uso do *software* leva a desenhar e modificar estruturas em 3D, conhecer todas as características químicas sobre o carbono e sua ligação covalente e sobre grupos reativos, medir as distâncias de ligação, os ângulos de ligação. O *software* ajuda os alunos a se familiarizarem com moléculas orgânicas e como moléculas

pertencentes à bioquímica. O aluno pode combinar o estudo comum da química, com a observação das moléculas 3D tomadas em consideração.

O *ArgusLab*® apresenta sua interface na língua inglesa, onde seus menus são disponibilizados na parte superior e possui a opção de disponibilizar os comandos na forma de pictogramas, facilitando assim, a sua utilização (Figura 1). Trata-se de software avançado, que permite realizar modelagem molecular, a nível de teoria quântica, que pode ser empregado para realizar cálculos teóricos (otimização de geometria, energia e propriedades) no nível de teoria MM, EHT, AM1 / PM3 e MNDO / ZINDO e ainda, para cálculos de ancoragem, obtenção do MESP, as energias dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), docking molecular, sua otimização e visualização 3D. Estas funções colaboram 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 1. Interface principal do *ArgusLab*® (Visualização 3D da molécula do benzeno em construção)

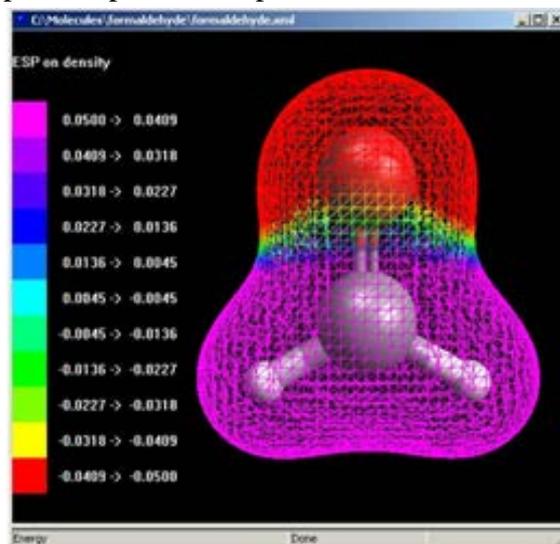


Fonte: Dados fornecidos pelo *software ArgusLab*®

O programa também apresenta a possibilidade de plotar o mapa de superfície de potencial eletrostático (MESP) (Figura 2), 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).

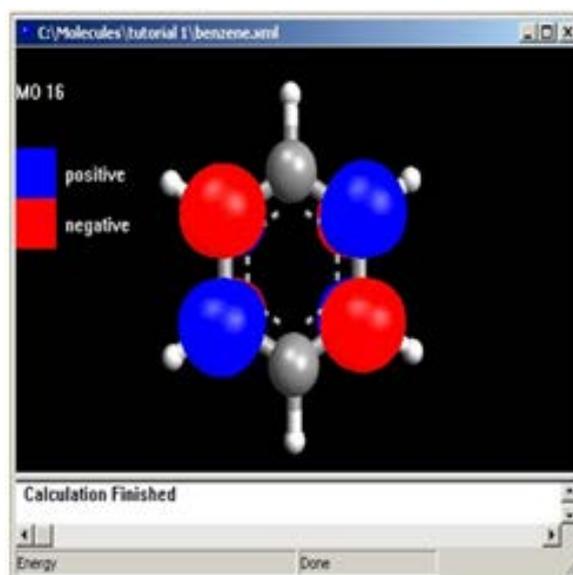
Figura 2. Mapa de superfície do potencial eletrostático do formaldeído



Fonte: Dados fornecidos pelo *software ArgusLab®*

Outra possibilidade, é plotar os orbitais moleculares (Figura 3), que tem um papel crucial no entendimento da reatividade química em nível atômico e são importantes descritores para a racionalização de várias reações químicas. Neste contexto, o conceito de orbital de fronteira refere-se ao uso da densidade eletrônica dos orbitais de fronteira, HOMO e LUMO, para prever a posição mais reativa sobre espécies químicas: HOMO (Orbital Molecular Ocupado de maior energia) e LUMO (Orbital Molecular desocupado de menor energia).

Figura 3: Orbitais moleculares de fronteira do benzeno



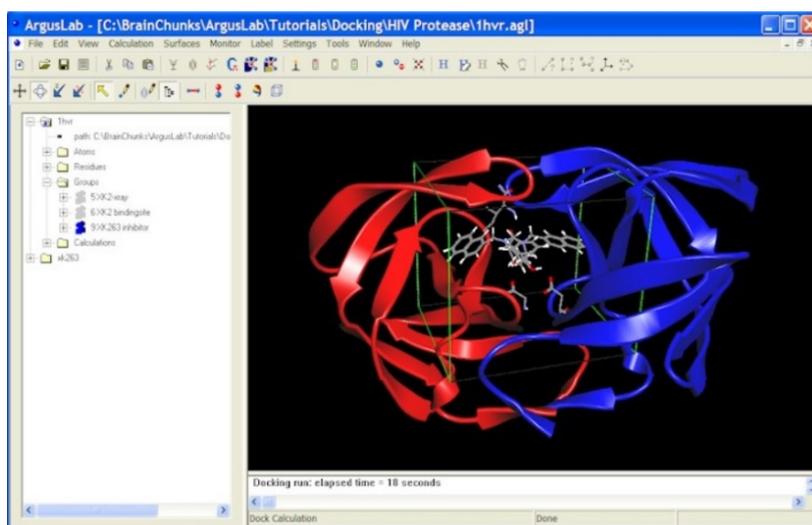
Fonte: Dados fornecidos pelo *software ArgusLab®*

No entanto, a abordagem HOMO-LUMO tem algumas limitações e outros conceitos são necessários para complementar os argumentos HOMO e LUMO (PEREIRA et al., 2016). As energias do HOMO e do LUMO, têm sido usadas há algumas décadas como índices de reatividade química e são comumente correlacionadas com outros índices, tais como afinidade eletrônica e potencial de ionização (HEATON, MILLER, POWELL, 2001; CONTRERAS et al, 1999).

Observando a necessidade de apresentar a química de forma interdisciplinar, o ArgusLab® permite relacionar o comportamento de moléculas com os seus receptores biológicos (JOY, 2006), através da simulação de acoplamento molecular (Figura 4), onde o aluno pode trabalhar conceitos químicos como forças intermoleculares, relacionando sua ação biológica, podendo inferir sobre o potencial dessas forças no tratamento de doenças, transmissão de informações genéticas, entre outros.

Figura 4. Docking molecular entre a molécula XK263 e a protease do vírus HIV

22º Seminário de Educação, Tecnologia e Sociedade
De 10 a 16 de outubro
Núcleo de Educação On-line/ NEO; FACCAT, RS



Fonte: Dados fornecidos pelo *software ArgusLab*®

Com relação a sua utilização em sala de aula, como ferramenta, para auxiliar na formação de professores, podemos observar o alto potencial deste software de acordo com a fala do professor entrevistado:

“Uso o Argus constantemente nas minhas disciplinas, pois ele ajuda o aluno a visualizar bi e tridimensionalmente moléculas, diminuindo a abstração do mundo quântico, além de que, em algumas situações, consigo relacionar a estrutura à atividade biológica, fomentando assim, a formação mais ampla e interdisciplinar do meu aluno, abrangendo não somente aspectos químicos, mas bioquímicos. “

Quanto às limitações de uso do software, o professor refere apenas a indisponibilidade deste *software* para dispositivos móveis, já que a maioria absoluta dos alunos, possui algum tipo de dispositivo em ambiente Android®.

Visando uma formação mais interdisciplinar e a formação do futuro licenciando, o professor ressalta a importância do uso dessas ferramentas:

“Com o avanço das computação, vejo um leque infinito de possibilidades, onde podemos trazer ferramentas que antes eram de custos elevados, para a sala de aula, ou seja, podemos fomentar a formação do aluno, sem a necessidade de grandes investimentos em equipamentos e laboratórios, pois vivemos uma realidade de baixo investimento, onde não temos recursos para construirmos e mantermos grandes laboratórios, com equipamentos de ponta. Hoje, podemos simular quase todas os equipamentos e práticas, temos laboratórios virtuais, que vão desde práticas simples, como uma destilação, à realização de estudos a nível quântico como é o caso do Arguslab.”

Além do ArgusLab®, existem outros softwares educativos que exercem funções similares, permitindo também, a realização de desenhos moleculares. O quadro 1 mostra alguns *softwares* disponibilizados gratuitamente e a descrição de suas funções. Dentre os *softwares* comentados, o Avogadro® é o que mais se assemelha em suas funções

com o ArgusLab®, porém, o Avogadro® não realiza docking molecular, o que o deixa em desvantagem.

Quadro 1: *Softwares* educacionais gratuitos de desenho molecular e suas funções

SOFTWARE	DESCRIÇÃO	IDIOMA
Arguslab®	Ferramenta de desenho que permite realizar modelagem molecular, podem obter o MEP, as energias dos orbitais de fronteira e o docking molecular	Inglês
Avogadro®	Realiza modelagem molecular: edição de moléculas e montagem de suas ligações 3D	Português
ACD/ChemSketch®	Permite realizar desenhos químicos fornecendo suas propriedades moleculares, sua otimização e visualização 3D. Cria estruturas estereoquimicamente corretas dos nomes químicos, obtendo os nomes IUPAC precisos de estruturas. Estima espectro RMN, contém um grande banco de dados com estruturas químicas e materiais de laboratório	Inglês
Marvin® 5.2.04	Ferramenta de construção de moléculas 2D e 3D em Java	Inglês
ChemDraw® Ultra 12.0 Trial	Cria estruturas estereoquimicamente corretas dos nomes químicos, obtendo os nomes IUPAC precisos de estruturas. Estima espectro RMN a partir de uma estrutura ChemDraw diretamente com o átomo de correlação espectral.	Inglês

Fonte: Dados da pesquisa.

Professores e alunos podem utilizar o software ArgusLab® de muitas maneiras, sendo de suma importância o conhecimento e domínio sobre suas ferramentas para que possa ser utilizado da melhor forma possível. O referido programa pode ser utilizado como ferramenta de auxílio para a elaboração de relatórios, estudos, trabalhos e artigos científicos e também, para estudos de modelagem molecular computacional, permite abordar e conhecer melhor a estrutura molecular, com descrição muito realista das moléculas, com medidas exatas de dados elaborados.

4 CONCLUSÕES

O uso de novas tecnologias é de suma importância na sociedade atual, principalmente na área da informática, sendo que essa nova configuração tem seus reflexos também na área educacional, pois diversos 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 ArgusLab®, 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. Considera-se muito útil também, para quem trabalha em um laboratório de pesquisa, estudando ou trabalhando na indústria farmacêutica.

REFERÊNCIAS

BATISTA, G.C., Lima, A. R., Crisóstomo, L. C.S, Marinho, M. M., & Marinho, E. S. SOFTWARES PARA O ENSINO DE QUÍMICA: CHEMSKETCH® UM PODEROSO RECURSO DIDÁTICO. **Revista Educacional Interdisciplinar**, v. 5, n. 1, 2016.

BERTOLETTI, A.C.; MORAES, M.C.; MORAES, R.; COSTA, A.C.R. Educar pela Pesquisa – uma abordagem para o desenvolvimento e utilização de Softwares Educacionais. *Novas Tecnologias na Educação*. CINTED-UFRGS. V. 1 Nº 2, Setembro, 2003.

CONTRERAS, R.; DOMINGO, L. R.; ANDRÉS, J.; PÉREZ, P.; TAPIA, O.; J. **Phys. Chem.** 103, 1367, 1999.

HEATON, C.A.; MILLER, A. K.; POWELL, R. L.; J. **Fluorine Chem.** 2001, 107, 1.

JOY, S; NAIR, P. S; HARIHARAN, R; PILLAI, M. R. Comparação detalhada das eficiências de acoplamento proteína-ligando de GOLD, um pacote comercial e ArgusLab, um freeware licenciável. *Em Silico Biology* 6, 2006.

MIRANDA, D. G. P; COSTA, N. S. **Professor de Química: Formação, competências/habilidades e posturas.** 2007

PEREIRA, D. H.; LA PORTA, F. A.; SANTIAGO, R. T.; GARCIA, D. R.; RAMALHO, T. C.*. Novas Perspectivas sobre o Papel dos Orbitais Moleculares de Fronteira no Estudo Da Reatividade Química: Uma Revisão. *Rev. Virtual Quim*, v. 8, No. 2, p. 425-453, 2016.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em química. **Rev. Liberato**, Novo Hamburgo, v. 9, n. 12, p. 13-22, jul/dez, 2008.

RODRIGUES, C. R. Processos modernos no desenvolvimento de fármacos: modelagem molecular. Caderno temático de **Química nova na escola**. N. 3, , pp. 43-49, 2001.

SALES, Gilvandenys Leite. **QUANTUM: UM SOFTWARE PARA APRENDIZAGEM DOS CONCEITOS DA FÍSICA MODERNA E CONTEMPORÂNEA**. 105 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Computação, Centro Federal de Educação Tecnológica, Universidade Estadual do Ceará, Fortaleza, 2005.

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.

VALENTE, José Armando et al. O computador na sociedade do conhecimento. **Campinas: Unicamp/NIED**, p. 11-18, 1999.