



Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Instituto de Química  
Curso de Química com Atribuições Tecnológicas

**Giovanni Offrede Freitas**

**Utilização Didática de Ferramentas Virtuais  
Gratuitas no Ensino Superior de Química**

Rio de Janeiro  
2017

Giovanni Offrede Freitas

Utilização Didática de Ferramentas Virtuais Gratuitas no Ensino  
Superior de Química.

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
ao Instituto de Química da Universidade Federal  
do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos  
necessários à obtenção do grau de bacharel em  
Química com Atribuições Tecnológicas.

Orientador: Sérgio de Paula Machado

Rio de Janeiro  
2017

## **Agradecimentos**

Devo a muitos pelo suporte na conturbada jornada que me levou à conclusão deste trabalho. Primeiramente, agradeço à minha mãe, Izabel Cristina Brandão Offrede, ao meu pai, Luiz Carlos Luzia de Freitas, à minha irmã, Bianca Offrede Freitas, e à minha “boadrasta”, Alzira Ribeiro de Amorim Leite, por saber que todos me deram o melhor que puderam de si, para que eu alcançasse este objetivo.

Não posso deixar de agradecer aos muitos colegas e amigos de graduação, mas, em especial, a duas pessoas: Evelyn da Motta Frères de Souza e Yuri Hemerly Poyares Café, por nunca terem me deixado sentir mal pelas minhas dificuldades em chegar até aqui.

Mais do que especial é o agradecimento que tenho ao meu orientador, meu “avô acadêmico”, Sérgio de Paula Machado, professor que é meu modelo a seguir nas próximas etapas da minha caminhada rumo ao magistério.

Agradeço ao meu namorado, Rodrigo Rouvier Geada, por ter me apoiado durante o final desse turbulento período, e, por fim, à minha psicóloga, Ana Lúcia Queiroz, e à minha psiquiatra, Gabriela Dias.

## RESUMO

### PROJETO DE CURSO

TÍTULO UTILIZAÇÃO DIDÁTICA DE FERRAMENTAS VIRTUAIS GRATUITAS NO ENSINO SUPERIOR DE QUÍMICA

ALUNO Giovanni Offrede Freitas

ORIENTADOR Sérgio de Paula Machado, DQI-Instituto de Química-UFRJ

FREITAS, Giovanni Offrede. **Utilização didática de ferramentas virtuais gratuitas no Ensino Superior de química**. Rio de Janeiro, 2017. Trabalho de conclusão de curso (Química com Atribuições Tecnológicas) - Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017

Selecionou-se e avaliou-se três programas gratuitos acerca de suas aplicações didáticas, a saber, a simulação em HTML *Molecule Shapes*, a ferramenta online MolView e o software Avogadro. Propôs-se exemplos de tais utilizações, após se discutir as características de cada programa. Concluiu-se que a aplicação das ferramentas requer diferentes abordagens e interferências do docente, de acordo com suas funcionalidades, e que somente uma ferramenta desenvolvida com o intuito didático pode atingir um aproveitamento máximo de suas capacidades.

## Sumário

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>5</b>
<b>2 OBJETIVO .....</b>	<b>11</b>
<b>3 METODOLOGIA.....</b>	<b>13</b>
3.1 CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO .....	13
3.2 FERRAMENTAS SELECIONADAS.....	14
3.2.1 <b>Molecule Shapes</b> .....	<b>15</b>
3.2.2 <b>MolView</b> .....	<b>16</b>
3.2.3 <b>Avogadro</b> .....	<b>18</b>
<b>4 PROPOSTAS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>21</b>
4.1 AULAS EXPOSITIVAS .....	21
4.2 EXERCÍCIOS .....	24
4.3 MATERIAL CONSULTIVO .....	25
<b>5 CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>	<b>27</b>
<b>6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>30</b>
<b>APÊNDICE I - EXERCÍCIO BASEADO NO PROGRAMA MOLVIEW.....</b>	<b>31</b>
<b>APÊNDICE II - EXERCÍCIO BASEADO NA SIMULAÇÃO MOLECULE SHAPES .....</b>	<b>32</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Química é uma ciência fundamentalmente experimental, onde a capacidade de abstração e a visão espacial são necessárias sempre que se faz uso de representações gráficas do mundo microscópico. Em particular, destaca-se, em sala de aula, a geometria molecular, tópico tratado nos primeiros contatos dos alunos com o Ensino Superior, não somente nos cursos de graduação em Química, mas também na graduação em Engenharias diversas, Farmácia e Geologia, por exemplo. Sendo assim, a dificuldade em desenvolver tais competências é um obstáculo bastante relevante no aprendizado dos estudantes recém-chegados no Ensino Superior, em especial quando se observa a grande parcela do corpo discente afetada por ele.

Segundo de Farias et al (2014), é indispensável a compreensão e interpretação da linguagem utilizada pelos químicos, ao exigir a correlação entre os fenômenos em nível macroscópico, as representações em nível submicroscópico e simbólico para o entendimento das explicações dos fenômenos estudados pela química. A capacidade de abstração necessária à Química também é ilustrada por Bachelard (1971, p.85):

Da experiência primeira à experiência instruída existe a passagem da *substância* a um *substituto*. A fórmula desenvolvida é um substituto racional que dá, para a experiência, uma contabilidade clara das possibilidades.

De acordo com Gasteiger (2003, apud Neto e da Silva, 2008), a representação bidimensional é o idioma universal natural dos químicos. A representação dos átomos como símbolos e pares de elétrons ligantes como linhas forma diagramas estruturais projetados para tornar as moléculas mais concebíveis. Contudo, tais diagramas são incompletos, pois simplificam a molécula representada somente aos átomos e suas ligações. Uma representação tridimensional, por outro lado, apresenta uma quantidade maior de informações: a posição dos átomos no espaço, o ângulo e a distância entre eles, por exemplo. Wu e Shah (2004, p.4) afirmam, por sua vez, que “ser capaz de compreender e manipular mentalmente representações químicas é

crítico para que estudantes entendam o conteúdo e conduzam pesquisa científica avançada”<sup>1</sup>. As autoras exemplificam com o tópico isomeria, mostrando a necessidade dos estudantes em traduzir uma fórmula química em sua(s) estrutura(s) molecular(es), visualizar as possíveis configurações tridimensionais, compará-las e ainda girar mentalmente o modelo construído.

Tomando como exemplo a grade do curso de graduação em Química com Atribuições Tecnológicas na Universidade Federal do Rio de Janeiro, percebe-se que o obstáculo discutido nem sempre tem a sua influência devidamente considerada, uma vez que a disciplina Química Geral I, onde a visão espacial e capacidade de abstração se mostram absolutamente necessárias, permanece designada ao primeiro semestre do curso, enquanto a disciplina Desenho Técnico, que atua no desenvolvimento da visão espacial, atualmente se encontra no quinto semestre da grade idealizada, anteriormente designada ao primeiro semestre do curso.

Outro fator que reforça a relevância desse problema como obstáculo no ensino, é o avanço tecnológico, que acarreta em ementas gradualmente mais densas para diversas disciplinas, em particular nas disciplinas de base, independentemente do curso de graduação. Com uma quantidade de tópicos cada vez maior a ser estudada, no mesmo período de tempo, a velocidade de aprendizado necessária também é gradualmente aumentada. Em outras palavras, cada vez menor é o tempo disponível para lidar com os entraves no aprendizado, tanto para alunos quanto para professores.

Também é importante considerar que, ao ingressar no Ensino Superior, é frequente que estudantes tragam consigo verdades absolutas, indiscutíveis, em vez do raciocínio científico que as construiu. Nas palavras de Bachelard (1971, p.35): “Do ensino científico da escola, retemos os fatos, esquecemos as razões”. Reside

---

<sup>1</sup> Traduzido do original: “[...] being able to comprehend and mentally manipulate chemical representations is critical for students to understand the content and conduct advanced scientific research.” (WU, SHAH, 2004, p.4)

aí uma barreira ao aprendizado de quaisquer ideias novas que entrem em conflito com o conhecimento previamente adquirido. Tendo em vista que a Química, e não somente ela, depende dessa capacidade de desconstruir e aprimorar seus fatos para avançar, o aprendizado dessa ciência exige, também, essa mesma habilidade, especialmente quando observado que, muitas vezes, novas teorias contradizem suas antecessoras. Segundo Bachelard (1971, p.125): “[...] o espírito científico é essencialmente uma rectificação do saber, um alargamento dos quadros do conhecimento. [...] A sua estrutura é consciência dos seus erros históricos”.

Para que esse processo de ensino-aprendizado ocorra adequadamente, é lugar comum a utilização de modelos tridimensionais físicos de moléculas. No entanto, o uso de tais modelos é por vezes limitado a algumas configurações de geometria, pelo próprio fabricante, além de apresentar uma limitação interativa e visual para plateias de maior magnitude. Também são limitados pela durabilidade dos modelos físicos, sejam industrializados ou não. Além disso, não há só a necessidade dos estudantes compreenderem a estrutura tridimensional de uma molécula, como também de serem capazes de representá-la em duas dimensões, do mesmo modo que se espera que sejam capazes de fazer o processo inverso: entender representações bidimensionais e transpô-las mentalmente para as estruturas tridimensionais que representam.

O uso de recursos virtuais é uma alternativa valiosa por conferir escalabilidade aos modelos utilizados, seja ao expor vídeos e animações ou na utilização de recursos por alunos como material de estudo. Uma vez que grande parte dos recém-ingressos nos cursos de graduação atualmente pertence à Geração Y (1980 a 1995, aprox.) ou à Geração Z (1995 a 2010, aprox.), o uso de programas torna possível a representação de modelos em um ambiente ao alcance dos estudantes, tão íntimos do mundo virtual. É importante observar que ferramentas virtuais contribuem de forma ainda mais expressiva para o Ensino a Distância, modalidade que tem recebido grande destaque recentemente.



De acordo com Williams (2015), membros da Geração Y tiveram sua adolescência marcada por equipamentos eletrônicos como *iPods*, enquanto membros da Geração Z foram os primeiros a ser criados na era dos *smartphones*. Muitos não conheceram o mundo sem mídias sociais. Segundo Fan et al (2015), a nova geração de estudantes apresenta como característica marcante a utilização de muitos aparelhos eletrônicos aliada à conexão quase constante com a internet para fins recreativos. Os autores também afirmam que alguns pesquisadores e educadores se utilizam dos meios eletrônicos para aumentar a interação com seus estudantes, seja no ensino a distância ou não.

Não somente o meio virtual é tão familiar para estes estudantes, como também o estudo através de livros e outros recursos físicos se torna cada vez menos utilizado, funcionando muitas vezes como segunda opção de consulta, após a busca na rede. Vale ressaltar que a mesma familiaridade que a Geração Z possui com a internet é espelhada no estranhamento ao manusear um livro físico. Muitos nunca utilizaram, por exemplo, um índice remissivo. Em menor intensidade, isso também é observado em membros da Geração Y.

A utilização de ferramentas virtuais é vista por alguns como extremamente recente. No entanto, Faria (2004, p. 60) diz, sobre a utilização de recursos tecnológicos em sala de aula:

Fala-se tanto na utilização dos recursos tecnológicos nas instituições educacionais atualmente que parece novidade. No entanto, experiências educativas com o uso da informática nas escolas e universidades brasileiras surgiram na década de setenta, reforçadas nos anos oitenta e mais enfatizadas na década de noventa, com o surgimento das novas tecnologias e do apelo da mídia eletrônica. O início do novo milênio trouxe ainda maior ênfase para a utilização das tecnologias na educação, com uma abrangência maior, surgindo a educação a distância, não só com o uso do computador mas também de outros recursos, como a teleconferência e videoconferência.

Percebe-se então que ferramentas do tipo são utilizadas há décadas como recursos didáticos, no entanto, não há diretrizes específicas para avaliação ou seleção de material didático digital. Godoi e Padovani (2009) atribuem essa dificuldade na criação de

critérios para a classificação e escolha de material didático virtual à rapidez da evolução das tecnologias.

É importante ressaltar que inserir novas tecnologias no cotidiano não significa, no entanto, exigir professores adeptos incondicionais (ou de oposição total) ao ambiente eletrônico. Pelo contrário, ao nos apropriarmos de conhecimento tecnológico que permita entender profundamente os novos recursos à disposição, saber de suas vantagens e desvantagens, riscos e possibilidades, podemos transformá-los em ferramentas úteis, em alguns momentos, e dispensá-los, em outros. (KENSKI apud FARIA, 2004) Cabe ao docente discernir quando cada um desses momentos se apresenta, sempre considerando seu alunado e a resposta do mesmo às ferramentas utilizadas.

Uma questão de elevada importância na utilização didática de programas computacionais voltada para a visualização na química, contudo, é conceder ao aluno a capacidade de perceber cada tipo de representação - seja ela bi ou tridimensional - como apenas um de vários modelos para a molécula real, bem como ser capaz de relacionar os modelos entre si. Para Neto e da Silva (2008, pg 265):

Uma das metas mais importantes na utilização de softwares de modelagem é que ele deve representar as estruturas químicas e transferir os vários tipos de representação para os softwares, facilitando a visualização da estrutura.

Muitos autores têm estudado a utilização de softwares como ferramenta didática para o ensino de química. Teruya et al (2013) mostram em seu trabalho um perfil da pesquisa em visualização no ensino de química entre 2001 e 2010, que revela uma notável predominância de trabalhos oriundos de países anglófonos, a despeito de evidenciar um crescimento na produção por diferentes países. Ainda segundo os autores a produção relacionada ao papel da visualização na formação de professores, tanto inicial quanto em serviço, é incipiente.



## **2 OBJETIVO**

Neste trabalho, pretendem-se ilustrar aplicações práticas de ferramentas virtuais no estudo de Química no Ensino Superior, em temas onde a representação de modelos e visão espacial se fazem necessários, como geometria molecular, isomeria, simetria ou mecanismos de reação. Pretende-se também criar roteiros para orientar este processo, através do desenvolvimento de materiais, como listas de exercícios.



### 3 METODOLOGIA

#### 3.1 CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

A seleção de critérios para a avaliação de uma ferramenta virtual não é tarefa trivial, em especial quando se objetiva uma análise concisa e substancial. No entanto, diversos critérios para a avaliação de programas didáticos podem ser encontrados na literatura. Para Torres (apud Faria, 2004), a avaliação de programas didáticos pode ser guiada pelas seguintes questões:

[...] quanto tempo os alunos precisam para aprender os comandos? Que tipo de atividade será realizada com o uso desse software? É possível o trabalho de grupo? A interface permite o feedback com estratégias inteligentes e abertas a informações com assistência e decisões dos usuários? O software proporciona o desenvolvimento da autonomia do aluno, promovendo uma aprendizagem com graus de dificuldade controlada pelo próprio usuário?

Após detalhada discussão sobre a relevância da visualização na química e a influência de ferramentas virtuais como auxílio didático, Wu e Shah (2004) sugerem cinco quesitos para a criação de ferramentas de visualização voltadas para o ensino de química:

- Fornecer múltiplas representações e descrições;
- Tornar visíveis conexões entre representações e fenômenos;
- Apresentar a natureza dinâmica e interativa da química;
- Promover a transformação entre 2D e 3D;
- Reduzir a carga cognitiva ao tornar a informação explícita e integrar a informação entre as representações para os estudantes.

Dentre os diversos parâmetros e critérios ergonômicos, pedagógicos e comunicacionais para a avaliação e produção de programas didáticos, Godoi e Padovani (2009) adaptam os critérios de usabilidade de um programa, com base em três diferentes autores, ao ambiente didático, conforme apresentado a seguir:

- Facilidade de aprendizado – ocorre quando o aluno consegue explorar o *software* educativo e realizar suas tarefas;

- Eficiência de uso – ocorre quando o aluno, tendo aprendido a interagir com o *software* educativo, consegue atingir níveis altos de produtividade na realização de suas tarefas;
- Facilidade de memorização – ocorre quando, após um período de tempo sem utilizar o *software* educativo, o aluno consegue retornar e realizar suas tarefas sem a necessidade de reaprender a interagir com ele;
- Baixa taxa de erros – ocorre quando o aluno realiza suas tarefas, no *software* educativo, sem maiores dificuldades ou constrangimentos e é capaz de recuperar erros, caso eles ocorram;
- Satisfação subjetiva – ocorre quando o aluno considera agradável a utilização do *software* educativo e sente-se bem utilizando-o novamente.

Com base nos trabalhos referidos, foram formulados os três critérios centrais para análise do material estudado, objetivando um número reduzido de parâmetros relevantes que permitissem auxiliar o docente na escolha da ferramenta mais adequada, conforme descrito abaixo:

- Abrangência - a capacidade da ferramenta em fornecer informação para casos estudados diferentes, ou seja, quantos tópicos em química podem ser estudados com o seu uso.
- Maneabilidade - a facilidade ou dificuldade em produzir e/ou extrair a informação desejada pelo usuário.
- Aparência - o quão atrativa a ferramenta é, por recursos visuais e/ou interativos.

### 3.2 FERRAMENTAS SELECIONADAS

Objetivando uma melhor disponibilidade, tanto para docentes como discentes, foram selecionados três softwares gratuitos como exemplares de tipos distintos de programas computacionais.

### 3.2.1 Molecule Shapes

Simulação em HTML5, produzida pelo projeto PhET *Interactive Simulations* da *University of Colorado Boulder*, permite a visualização e rotação de modelos 3D de moléculas-exemplo pré-definidas, cada um dos quais representa uma diferente configuração geométrica. Outra possibilidade fornecida pela ferramenta é a de observar a geometria de um modelo 3D criado pelo usuário, ao alterar o número de ligantes e pares de elétrons não-ligantes no átomo central da molécula-modelo. Tanto as moléculas-exemplo quanto as moléculas-modelo contemplam moléculas com até seis nuvens eletrônicas ao redor do átomo central.

Disponível online em qualquer dispositivo dotado de navegador apropriado, mediante conexão com a internet. Alternativamente, o download da ferramenta pode ser realizado de forma gratuita em [https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes\\_en.html](https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_en.html).

Dotada de interface atrativa e intuitiva, *Molecule Shapes* é uma ferramenta de aparência convidativa e grande maneabilidade, de fácil utilização por novos usuários. Seus recursos, tanto na visualização de moléculas-exemplo quanto na construção de modelos são apresentados de forma clara e concisa. Conta com funcionalidade que permite a comparação dos ângulos das ligações das moléculas-exemplo entre a idealidade e a realidade, o que reforça seu detalhamento sobre o tema estudado, além de dispor de *checkboxes* que permitem ocultar ou exibir a geometria eletrônica, a geometria molecular e os pares de elétrons não-ligantes, recurso que otimiza sua utilização como material expositivo em sala de aula.

O programa adapta automaticamente a molécula visualizada à configuração energética mais favorável em resposta à manipulação de qualquer ligante ou par de elétron não-ligante ao redor do átomo central pelo usuário, em outras palavras, otimiza de forma contínua a geometria do modelo, recurso que auxilia discentes a visualizar o efeito de repulsão eletrônica. Por poder ser acessado mediante conexão de internet ou download da simulação, esta ferramenta se mostra mais



facilmente utilizável em sala de aula, bem como acessível aos possuidores de muitos dos smartphones disponíveis no mercado, reforçando sua relevância como material de estudo por tal acessibilidade.

Quanto a abrangência da ferramenta, pode-se inferir que é restrita ao estudo de geometria molecular pela teoria de repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência (VSEPR), não contemplando outros tópicos da química. Além disso, possui um limitado número de moléculas-exemplo, apenas uma para cada possível geometria com até seis nuvens eletrônicas ao redor do átomo central, o que pode criar uma perigosa zona de conforto para os estudantes que se utilizarem da simulação como único material de estudo para o tema. O uso de outros exemplos para cada geometria pode auxiliar a impedir a formação dessa zona de conforto, no entanto.

Verifica-se também que o programa limita o usuário ao permitir a criação e visualização apenas de moléculas com átomo central, ou seja, não permite a criação e visualização de modelos de cadeias carbônicas pequenas ou moléculas de maior complexidade, reforçando sua especificidade quanto ao estudo de geometria molecular.

### 3.2.2 MolView

Plataforma de visualização de dados exclusivamente online, disponível em <http://molview.org/>, permite a construção e visualização de fórmulas estruturais em bastão de diversas moléculas, sendo capaz de otimizar tais estruturas, fornecendo uma representação mais fiel aos ângulos de ligação reais. A ferramenta também é capaz de gerar uma visualização tridimensional, rotacionável, a partir da fórmula estrutural em bastão, mediante comando do usuário. Para tal, podem ser utilizados diversos renderizadores 3D, dentre eles GLmol, Jmol e ChemDoodle Web.

O programa também permite a busca em diferentes bancos de dados científicos, de compostos, proteínas e espectros, exibindo os modelos dos resultados obtidos, em 2D e 3D, utilizando WebGL e

HTML5. A busca conta com sugestões baseadas em três bancos de dados (PubChem, RCSB e *Crystallography Open Database*) fornecidas durante o preenchimento do campo, além de permitir consultas em outros idiomas além do inglês, desde que configurados como idioma primário ou secundário no navegador utilizado.

Bibliotecas JavaScript e serviços online foram utilizados para o desenvolvimento da ferramenta, que une componentes gratuitos previamente desenvolvidos como visualizadores 3D online e algoritmos.

Possuindo interface limpa e convidativa, MolView se apresenta como uma poderosa ferramenta para o estudo de virtualmente qualquer molécula. Este programa permite a representação simultânea da fórmula estrutural e do modelo tridimensional das moléculas desenhadas em 2D, ponto chave para auxiliar na compreensão da relação entre as duas formas de representação. O modelo 3D tem por padrão a rotação a partir do centro de massa, quando manipulado pelo usuário, proporcionando uma visualização mais simples e maneabilidade bastante intuitiva. É importante também destacar o recurso de otimização das fórmulas estruturais desenhadas em 2D.

Por apresentar recursos facilitadores para o desenho de fórmulas estruturais de moléculas maiores, como anéis aromáticos ou cadeias carbônicas extensíveis com o arrastar do cursor do mouse, MolView otimiza o tempo para a construção de tais fórmulas estruturais e seus correspondentes modelos 3D, seja em sala de aula ou quando utilizado como material de estudo, demonstrando que a ferramenta se presta a aplicações em temas como o estudo de mecanismos de reações, isomeria ou simetria. Além disso, a integração com os bancos de dados permite ao usuário a representação da estrutura 3D de macromoléculas conhecidas, como proteínas, reforçando a abrangência de temas aos quais o programa se presta a atuar como material didático e/ou paradidático.

O programa, apesar disso, tem um grande limitador: moléculas inorgânicas simples são muitas vezes renderizadas de forma incorreta, limitando sua abrangência, ao passo que não é uma ferramenta confiável para os estudos iniciais de geometria molecular sem

supervisão. Um relevante fato a se observar é a necessidade de uma conexão com a internet para sua utilização, o que pode se mostra um empecilho em instituições que não dispõem de conexão com a rede, seja temporária ou permanentemente. Foi também observado que a renderização 3D do propadieno é realizada incorretamente, ponto que deve ser destacado para a utilização didática do mesmo em tópicos como simetria. Não foram observados problemas similares com outras moléculas orgânicas testadas.

### 3.2.3 Avogadro

Programa multiplataforma de edição e visualização de moléculas, disponível em <<http://avogadro.cc/>>, desenvolvido para uso em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e áreas correlatas.

Capaz de construir e otimizar energeticamente estruturas moleculares em 3D para visualização ou análise, possui suporte integrado para download de informações de bancos de dados como PubChem e *Protein Data Bank*, além de ser capaz de importar dados de variados formatos de arquivo.

O programa conta também com a possibilidade de adição de novos códigos, personalizando-se às necessidades do usuário, de acordo com seu campo de estudo.

Apresentando uma vasta gama de recursos, Avogadro se mostra um programa de elevada abrangência quanto aos seus possíveis usos. A liberdade concedida ao usuário na manipulação dos átomos para a construção de modelos 3D é virtualmente total, o que ao mesmo tempo se mostra um fator positivo e negativo, por conferir uma grande complexidade para a utilização de suas funcionalidades. Em outras palavras, a ferramenta se mostra poderosa, mas exige tempo e/ou conhecimento prévio para ser utilizada eficientemente. A falta de tutoriais internos para muitos dos itens do programa prejudica ainda mais sua maneabilidade para o usuário iniciante, mas é importante salientar que a maneabilidade do programa é bastante melhorada para

o usuário experiente, isto é, a familiaridade com a ferramenta reduz de forma significativa esse empecilho ao uso.

Outro fator que influi negativamente na maneabilidade do programa é a aparência do mesmo: sua interface simples transmite uma impressão antiquada, e sua simplicidade não está associada a uma apresentação mais limpa e organizada. Há espaços não utilizados da tela do usuário, enquanto botões relevantes apresentam tamanho diminuto. Sendo assim, sua maneabilidade inconveniente o torna desfavorável para a utilização pelo corpo docente.

Para docentes, no entanto, a vasta abrangência da ferramenta permite sua utilização didática em vários temas, tais como geometria molecular, simetria, mecanismos de reação ou estudo de conformeros. Esta utilização é tornada mais eficiente por recursos de destaque como a autorrotação de modelos 3D e a capacidade de salvar arquivos de moléculas para uso posterior, ambos bastante atrativos para aulas expositivas. Outro fator atrativo é a independência do programa quanto ao acesso à internet, uma vez que é um programa do sistema operacional. Em contrapartida, isso cria o inconveniente da necessidade de instalação na máquina a ser utilizada, impossibilitando sua utilização em qualquer máquina, ponto que é possivelmente mitigado por ser compatível com quatro dos principais sistemas operacionais do mercado.

A despeito da aparência insatisfatória, o mesmo não pode ser dito sobre os modelos 3D gerados com o programa, que podem ser representados de várias maneiras, como esferas de Van der Waals ou outros estilos mais simplificados, o que deve ser salientado como funcionalidade relevante para a compreensão, por parte dos alunos, dos diferentes tipos de representação.



## 4 PROPOSTAS E DISCUSSÃO

### 4.1 AULAS EXPOSITIVAS

A utilização expositiva de modelos gerados nos programas selecionados pode-se dar, por exemplo, mediante o uso de projetor ou laboratório de informática. A simulação *Molecule Shapes* apresenta grande valor nessa situação, por ser capaz de representar visualmente a repulsão eletrônica, quando nuvens são manipuladas pelo usuário (fig.1), o que auxilia a demonstrar a tridimensionalidade do modelo, sendo esta repulsão ponto vital e de partida para a compreensão da teoria da repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência (VSEPR). A utilização desta simulação em sala de aula, portanto, é mais adequada ao início do estudo da teoria, imediatamente após a sua apresentação verbal.

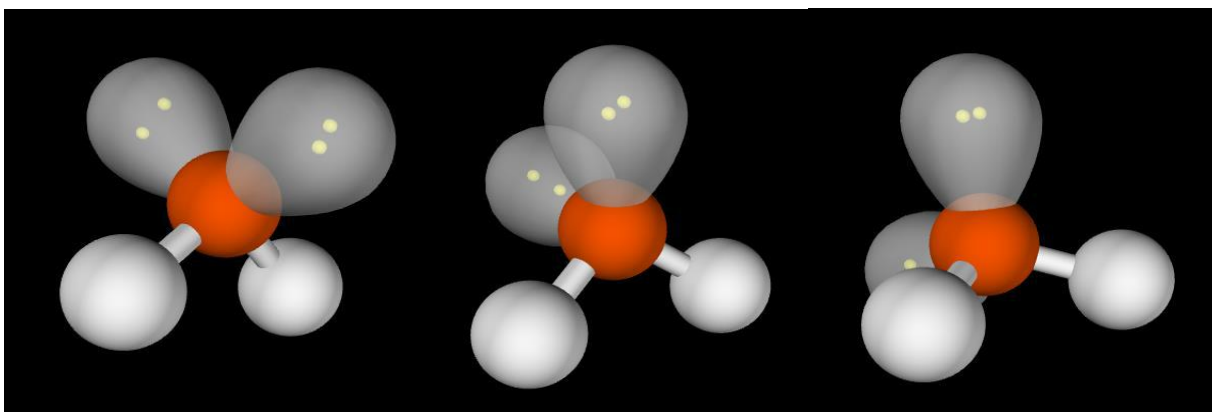


Figura 1 - Modelo da molécula de água na simulação *Molecule Shapes*, antes de, durante e depois de, respectivamente, perturbação gerada pelo usuário.

O programa MolView, por outro lado, tem sua função expositiva melhor aproveitada na representação simultânea de dois modelos para uma mesma molécula, um em 2D e seu correspondente em 3D. Essa ferramenta facilita a discussão sobre a relação entre “modelo” e “molécula”, conceitos muitas vezes absorvidos equivocadamente. Utilizar dessa funcionalidade, ou mesmo de capturas de tela realizadas anteriormente, como exemplo, é bom ponto de partida para designar atividades extraclasse, tais como a exemplificada no APÊNDICE I, além de abrir caminho para discussões acerca da representação de moléculas com isomeria óptica (fig.2).

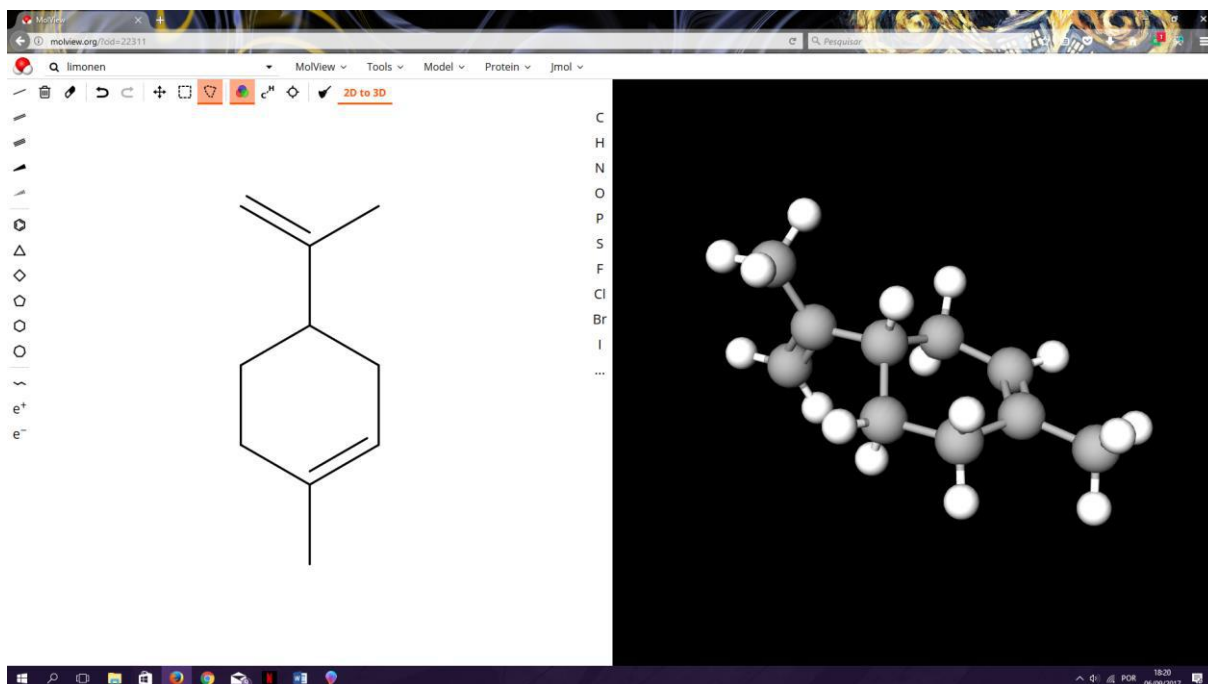


Figura 2 - Modelos 2D e 3D da molécula de (S)-limoneno no software MolView.

Quanto ao software Avogadro, destaca-se a função “Auto Rotação”, que pode ser utilizada facilmente em sala de aula. No entanto, é recomendado que os modelos que se deseja apresentar sejam salvos previamente pelo docente, caso não constem entre os já incluídos no programa. Ressalta-se aqui a relevância em tópicos como isomeria e simetria, ao permitir a rotação do modelo em torno de um eixo fixo (fig.3).

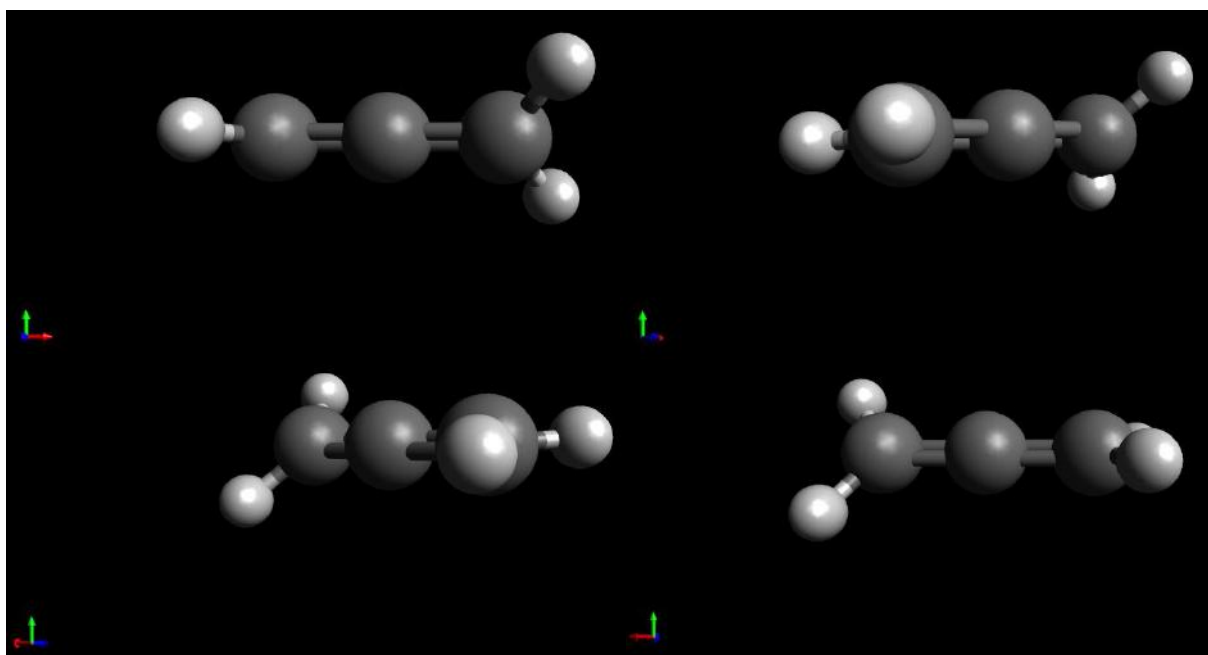


Figura 3 - Estágios de rotação em torno de um eixo fixo de modelo 3D da molécula de propadieno.

Com maior ênfase no estudo de geometria molecular, cabe ressaltar a funcionalidade “Auto Otimização”, que atua de forma semelhante à simulação Molecule Shapes, permitindo que o modelo se reorganize mediante a interação do usuário, ilustrando a repulsão eletrônica, enquanto fornece a energia da conformação ilustrada pelo modelo enquanto é adaptada. O software ainda permite fixar átomos em uma configuração para que não sejam movidos enquanto a conformação é otimizada, permitindo ilustrar matematicamente a diferença de energia entre a configuração “gangorra” comparada com a hipotética pirâmide em moléculas com cinco nuvens eletrônicas ao redor do átomo central, sendo quatro ligantes (fig.4). Essa demonstração matemática permite criar uma discussão com os estudantes acerca da justificativa de uma configuração ser mais estável do que a outra, enquanto é fixada a relação entre energia e estabilidade, discutindo a diferença na repulsão entre pares de elétrons ligantes e não ligantes.

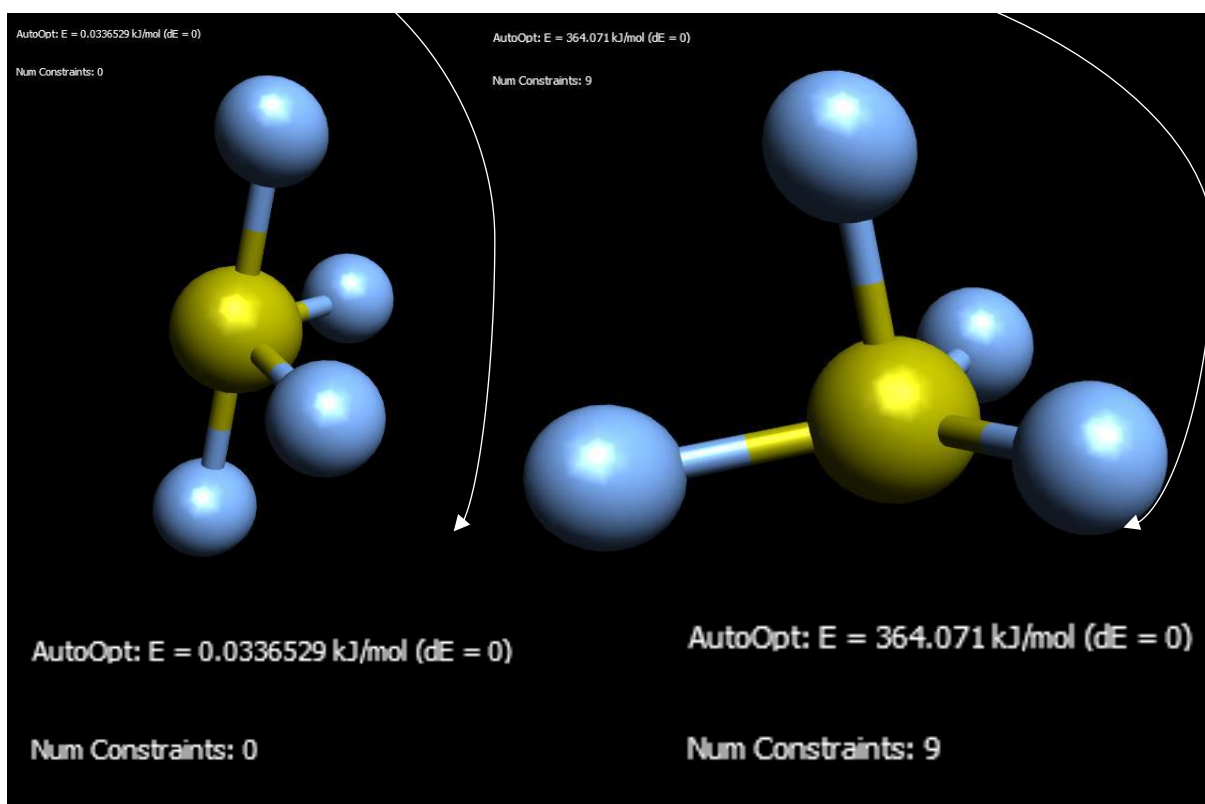


Figura 4 - Modelos 3D da molécula de SF<sub>4</sub> no software Avogadro. Em destaque, valores de energia calculados pela função “Auto Otimização”.



## 4.2 EXERCÍCIOS

Como já citado no item anterior, os programas podem ser ponto de partida tanto de discussões quanto de exercícios. Exemplificado no APÊNDICE II está uma atividade que contempla conceitos explorados na simulação *Molecule Shapes*, estimulando a dedução a partir de resultados apresentados, ilustrando um tipo de linha de raciocínio necessário ao pensamento científico. Este exercício abre caminho para discussões em aulas subsequentes, uma vez que induz a justificar a mudança nos ângulos entre ligações com a presença ou ausência de pares eletrônicos não-ligantes, mas gera outra pergunta, ao não explicar o motivo da maior repulsão dos pares não ligantes. Conforme o plano de aula de cada professor, o exercício proposto poderia se apresentar como extraclasse, ou mesmo como um guia para uma discussão em sala.

A mesma flexibilidade pode fazer do exercício presente no APÊNDICE I, baseado no programa MolView, tanto uma atividade extraclasse como intraclasse, ao induzir a discussão comparativa entre modelo e molécula, permitindo ao docente guiar tal discussão para o objetivo desejado, ao mesmo tempo em que se abordam os tópicos de isomeria plana e geométrica.

Programas mais complexos permitem, ao serem capazes de salvar arquivos, além de seu uso para produção de material visual, grande interatividade entre aluno e professor, mesmo à distância, desde que ambos estejam familiarizados com a ferramenta, como exemplificado a seguir. De posse do software Avogadro, estudantes podem receber e enviar arquivos contendo modelos 3D via internet, permitindo atividades mais imersivas, nas quais a transferência de informações não é limitada a palavras ou mesmo a imagens. Até mesmo avaliações podem se utilizar dessa capacidade de troca, concedendo maior liberdade criativa tanto aos alunos quanto aos professores.

### 4.3 MATERIAL CONSULTIVO

Esta utilização, ao passo que delega grande autonomia ao aluno, requer conhecimento detalhado do programa utilizado e pode ser aplicada ao fornecer o material digital aos alunos. A simulação *Molecule Shapes*, por exemplo, pode ser fornecida como material para revisão do tópico geometria molecular após o seu uso em aula expositiva, como ilustrado no item 4.1 deste trabalho. Ao fazê-lo, espera-se estimular os discentes a revisitar o tópico estudado, apelando, em parte, para a sua curiosidade, enquanto a continuidade da atividade é favorecida pela familiaridade com o ambiente virtual.

Programas podem, também, ser utilizados em avaliações, para consulta, tal como livros e apostilas. Para tal, é recomendado o uso de laboratório de informática para a realização da avaliação. No caso de programas dotados de um maior número de funcionalidades, como MolView e Avogadro, uma supervisão adequada se faz ainda mais necessária, uma vez que sua maior abrangência permita sua utilização de maneira pouco eficiente para usuários que não possuem melhor entendimento sobre os programas em questão.

Por fim, ainda é possível a utilização de tais programas para a produção de materiais consultivos mais tradicionais, como fontes de imagens. No entanto, essa utilização foge ligeiramente da proposta deste trabalho, onde a interatividade é tida como grande ponto positivo para a utilização de tais ferramentas.



## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os programas analisados se mostram adequados a diversas aplicações, ao ajudar a criar uma ponte entre os tópicos estudados e os estudantes através de um ambiente familiar aos últimos. Observa-se que a utilização didática de tais programas não depende somente do conteúdo potencialmente abrangido por ele, mas também do intuito com o qual o programa foi desenvolvido. Simulações como Molecule Shapes, por serem desenvolvidas especificamente com este propósito, possuem grande maneabilidade para os alunos, estimulando o estudo fora da sala de aula com maior intensidade, enquanto ferramentas mais poderosas, como o programa Avogadro, desestimulam o mesmo uso, ao permitirem a confusão de um usuário inexperiente, possivelmente frustrando-o.

O maior número de funcionalidades, contudo, não é um aspecto puramente negativo. Nas mãos de docentes capacitados e criativos, ferramentas mais abrangentes podem dar origem a diversos usos, tais como a criação de animações e comparações de energia entre estruturas. Percebe-se, portanto, que a maneabilidade de uma ferramenta está muitas vezes ligada à abrangência da mesma, comumente sendo estas duas inversamente proporcionais. Pouco dependente de ambas se coloca a aparência, que em si é forte estímulo para a utilização do programa.

Em resumo, ferramentas pouco abrangentes, isto é, especializadas, e visualmente atrativas são as mais adequadas para interação direta com os estudantes, enquanto softwares muito abrangentes, quando pouco maneáveis, apresentam grande potencial quando interagem indiretamente com os alunos, através de uso mediado por docentes.

Percebe-se também a pouca disponibilidade de programas gratuitos de alta maneabilidade e abrangência, simultaneamente, na rede. Postula-se que tal ferramenta só possa ser obtida se desenvolvida especificamente com propósito didático.





## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BERGWERF, H. **MolView v2.4**. Disponível em <<http://molview.org/>> Acesso em: 22 set. 2017.

FAN, H.-J., ELECHI, N., TRAN, D., HEADS, J. **Teaching chemistry with computers**. International Journal of Information and Education Technology, v.5, n.3, p. 184-188. mar. 2015.

FARIA, E. T. O professor e as novas tecnologias. In: ENRICONE, D. (Org.). **Ser Professor**. 4.ed. Porto Alegre: EDIPUCRS. 2004.

FARIAS, F. M. C. de, DEL-VECCHIO, R. R., CALDAS, F. R. R., GOUVEIA-MATOS, J. A. de M. **Construção de um modelo molecular: uma abordagem interdisciplinar química-matemática no ensino médio**. Revista Virtual da Química. v.7, n.3, p. 849-863, set. 2014.

GODOI, K. A., PADOVANI, S. **Avaliação de material didático digital centrada no usuário: uma investigação de instrumentos passíveis de utilização por professores**. Produção. São Paulo: v.19, n.3, p. 445-457, set./dez. 2009.

HANWELL, M. D., CURTIS D. E., LONIE, D. C., VANDERMEERSCH, T., ZUREK, E., HUTCHISON, G. R. **Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool**. v1.2.0. Disponível em <<http://avogadro.cc/>> Acesso em: 22 set. 2017.

MOORE, E. B., OLSON, J., LANCASTER, K., CHAMBERLAIN, J., PAUL, A., PERKINS, K. **Molecule Shapes ver. 1.1.10**. Disponível em <[https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes\\_en.html](https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_en.html)> Acesso em: 22 set. 2017.

NETO, J. R. F., SILVA, R. M. G. da. **Tecnologias no ensino de geometria molecular**. Publicatio UEPG Ciências Humanas, Ciências Sociais Aplicadas, Linguística, Letras e Artes. Ponta Grossa: v.16, n.2, p. 261-275, dez. 2008.

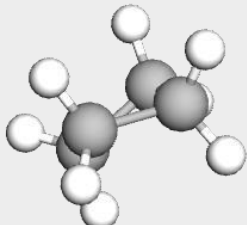


TERUYA, L. C., MARSON, G. A., FERREIRA, C. R., ARROIO, A. **Visualização no ensino de química: apontamentos para a pesquisa e desenvolvimento de recursos educacionais**. Química Nova, v.36, n.4, p. 561-569, fev. 2013.

WILLIAMS, A. **Move Over, Millennials: Here Comes Generation Z**. *The New York Times*, New York, 20 setembro. 2015. <<https://www.nytimes.com/2015/09/20/fashion/move-over-millennials-here-comes-generation-z.html>> Acesso em: 18 jul. 2017.

WU, H.-K., SHAH, P. **Exploring visuospatial thinking in chemistry learning**. Science Education, v.88, n.3, p. 465-492, mai. 2004.

## APÊNDICE I - EXERCÍCIO BASEADO NO PROGRAMA MOLVIEW

1. Complete a tabela abaixo sobre compostos isômeros:

Nome Oficial	Fórmula Molecular	Fórmula Estrutural	Modelo 3D
			
	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>		
			
			

2. Elabore acerca das vantagens de cada uma das quatro representações já presentes na tabela, comparando-as entre si.

3. Qual a diferença entre “modelo” e “molécula”?



## **APÊNDICE II - EXERCÍCIO BASEADO NA SIMULAÇÃO *MOLECULE SHAPES***

1. Dentre as substâncias escolhidas pela simulação para exemplificar cada tipo de geometria molecular, algumas sofrem uma pequena mudança quando se alterna entre o modelo genérico e o modelo “real”. Separe as substâncias em dois grupos, identificando se essa mudança ocorre ou não em seus modelos.

2. Qual a mudança citada na questão anterior? Que diferenças são observadas entre as substâncias presentes em cada grupo?

3. Com base na resposta anterior, explique o motivo da mudança observada entre os modelos genéricos e “reais”.