



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

CARLA CRISTINA ALVES MENDES

USO DE SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA O ENSINO DE QUÍMICA EM
DISCIPLINAS DO ENSINO SUPERIOR

UBERLÂNDIA
2025

CARLA CRISTINA ALVES MENDES

USO DE SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA O ENSINO DE QUÍMICA EM
DISCIPLINAS DO ENSINO SUPERIOR

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Química da Universidade Federal de Uberlândia-MG, como requisito parcial para obtenção do título de Doutora em Química.

Área de concentração: Química

Orientador: Prof. Dr. Guedmiller Souza de Oliveira

UBERLÂNDIA
2025

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

M538
2025 Mendes, Carla Cristina Alves, 1988-
USO DE SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA O ENSINO DE
QUÍMICA EM DISCIPLINAS DO ENSINO SUPERIOR [recurso
eletrônico] / Carla Cristina Alves Mendes. - 2025.

Orientador: Guedmiller Souza de Oliveira.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Pós-graduação em Química.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2025.52>
Inclui bibliografia.
Inclui ilustrações.

1. Química. I. Oliveira, Guedmiller Souza de, 1980-,
(Orient.). II. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-
graduação em Química. III. Título.

CDU: 54

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
 Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Química
 Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 5I - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
 Telefone: (34) 3239-4385 - www.cpgquimica.iq.ufu.br - cpgquimica@ufu.br



ATA

Programa de Pós-Graduação em:	Química				
Defesa de:	Tese de Doutorado Acadêmico, 163, PPGQUI				
Data:	Oito de janeiro de dois mil e vinte e cinco	Hora de início:	8h	Hora de encerramento:	10h
Matrícula do Discente:	12023QMI002				
Nome do Discente:	Carla Cristina Alves Mendes				
Título do Trabalho:	"USO DE SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA O ENSINO DE QUÍMICA EM DISCIPLINAS DO ENSINO SUPERIOR"				
Área de concentração:	Química				
Linha de pesquisa:	Química Teórica e Físico-Química de Macromoléculas e Coloides				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	"Desenvolvimento de ferramentas computacionais para o auxílio ao aprendizado de Química no Ensino Superior"				
ODS 4	Educação de qualidade: assegurar a educação inclusiva, equitativa e de qualidade, e promover oportunidades de aprendizagem ao longo da vida para todos.				

Reuniu-se, por webconferência, no *link*: <https://meet.google.com/woa-mmfz-wmd>, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Química, assim composta: Professores Doutores: **Gláucia Aparecida Andrade Rezende**, do Instituto Federal de Goiás; **Ingrid Nunes Derossi**, da Universidade Federal do Triângulo Mineiro (UFTM) - Campus Iturama; **Nyara Araújo da Silva Mesquita**, da Universidade Federal de Goiás; **Wesley Fernandes Vaz**, da Universidade Federal de Jataí; e **Guedmiller Souza de Oliveira**, orientador(a) do(a) candidato(a).

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, **Dr. Guedmiller Souza de Oliveira**, apresentou a Comissão Examinadora e o(a) candidato(a), agradeceu a presença do público, e concedeu ao(à) Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do(a) Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovada.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.



Documento assinado eletronicamente por **Guedmiller Souza de Oliveira, Professor(a) do Magistério Superior**, em 08/01/2025, às 10:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Glaucia Aparecida Andrade Rezende, Usuário Externo**, em 08/01/2025, às 10:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Nyara Araújo da Silva Mesquita, Usuário Externo**, em 08/01/2025, às 10:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ingrid Nunes Derossi, Usuário Externo**, em 08/01/2025, às 10:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Wesley Fernandes Vaz, Usuário Externo**, em 08/01/2025, às 10:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **5885743** e o código CRC **720781DA**.

À minha mãe Maria de Fátima e ao meu pai Carmelito.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Instituto de Química da Universidade Federal de Uberlândia pela oportunidade de cursar o doutorado. Agradeço ao professor Eduardo de Faria Franca pela orientação, pela paciência, pelos conhecimentos ensinados, pelo incentivo e por acreditar em mim. Ao professor Guedmiller Souza de Oliveira, pela orientação e pelos conhecimentos proporcionados na disciplina cursada como ouvinte. Agradeço também à professora Nicea Quintino Amauro (*in memoriam*), uma pessoa incrível que tive o prazer de conhecer a partir da disciplina que com ela cursei no semestre de 2020/1, ainda na pandemia. Com ela, tive também a oportunidade de aprendizado e de participar de seu grupo de estudos junto com meus amigos Gustavo e Mariana.

À professora Viviani Alves de Lima pela paciência em me explicar mais sobre o Ensino de Química e por todo conhecimento proporcionado. A todos os professores com quem cursei as disciplinas durante o doutorado, obrigada pelo aprendizado. A todos os amigos e amigas, obrigada pelo incentivo e apoio, em especial, ao Gustavo, que sempre me deu força nos momentos de pensar em desistir e nos momentos em que eu achava que não iria conseguir, ele sempre me incentivou e apoiou. À minha amiga Franscinely, por acreditar em mim e por seu bom humor, que me ajudou a enfrentar os momentos de ansiedade com mais leveza. À Mayta e Zeila do Instituto de Química, aos coordenadores Jefferson Luis Ferrari e Rodrigo Alejandro Abarza Munoz e à CAPES.

Agradeço à minha família, minha mãe Maria de Fátima, meu pai Carmelito, meu irmão Carlos Eduardo e meu namorado Samuel, pela paciência, compreensão e carinho. Agradeço, por fim, a todos os meus alunos que me permitiram poder executar este projeto, dando-me suas opiniões, sugestões, agradecimentos e com os quais eu posso aprender ensinando.

“Eu sou estranho, eu sou novo
Eu gostaria de saber se você é também
Eu ouço vozes no ar
Eu vejo que você não, e isso não parece justo
Eu gostaria de não me sentir triste
Eu sou estranho, eu sou novo
Eu finjo que você também é
Eu me sinto como um menino no espaço sideral
Eu toco as estrelas e me sinto fora de lugar
Eu me preocupo com o que os outros podem pensar
Eu choro quando as pessoas riem, isso me faz encolher
Eu sou estranho, eu sou novo
Eu entendo agora que você também é
Eu digo ‘Eu me sinto como um náufrago’
Eu sonho com o dia em que isso será ok
Eu tento me encaixar
Eu espero conseguir um dia
Eu sou estranho, eu sou novo.”
Benjamin Giroux

RESUMO

Conceitos abstratos na disciplina de Química podem ser de difícil entendimento para os estudantes, pois não é possível percebê-los visualmente a partir de algo comumente vivenciado. Nesse sentido, o uso da simulação computacional no ensino auxilia na compreensão desses conceitos, porque propicia ao aluno a visualização do que não pode ser observado macroscopicamente. O presente estudo realizou o uso de simulações por meio de *softwares* específicos da Química Computacional com os discentes realizando todas as etapas da simulação até gerar as representações visuais. Foi utilizado o aplicativo do *software* WebMO com método quântico semiempírico para realização dos cálculos e o *software* AutoDock para realizar ancoramento com metodologia da mecânica molecular. Um total de 14 alunos de Engenharia Civil do primeiro período e 157 alunos de Agronomia do primeiro e segundo períodos dos semestres 2021/1, 2021/2 e 2023/1 realizaram as simulações computacionais. O aplicativo e o *software* atuaram como um recurso didático para apropriação de conhecimentos sobre ligações químicas, geometria molecular, orbitais moleculares de fronteira e interações intermoleculares. Inicialmente, os conteúdos foram explicados e, em seguida, foram propostas duas atividades a serem desenvolvidas no *software* WebMO e dois ancoramentos moleculares no AutoDock4 entre a enzima ACCase e os herbicidas clefoxidim e glifosato para, na sequência, a realização de uma atividade sobre o ancoramento molecular. No final do semestre, um questionário foi respondido pelos alunos sobre o uso do WebMO. O aplicativo WebMO e o *software* AutoDock permitiram interação dos alunos com o conteúdo, ao passo que eles mesmos realizaram a simulação, contudo a dificuldade encontrada nesse processo é o fato de que a maioria dos *softwares* específicos de Química Computacional são em inglês. Geralmente, os *softwares* da Química Computacional são utilizados para descobrir novos compostos, novos fármacos, novas metodologias de análises de detecção, de funcionamento de biomoléculas, descobertas de novos tipos de ligações e interações moleculares. Por meio deles, são desenvolvidos trabalhos inéditos que são realizados por pesquisadores do mundo todo e, de modo geral, a maioria desses *softwares* são em inglês para que haja uma universalização do idioma desses programas, e foi justamente o idioma a maior dificuldade encontrada pelos alunos para realizarem as simulações. Tanto no WebMO quanto no AutoDock4, a visualização de conceitos químicos auxiliou no entendimento dos conceitos de química. Quanto ao ancoramento molecular, os alunos puderam entender a teoria química relacionada à prática que veem no campo quando da aplicação de herbicida para combater plantas daninhas. O presente estudo mostrou que os alunos também podem realizar simulações computacionais e conhecer as equações que as regem, eles possuem capacidade de aprender e facilidade de realizar as simulações, sem contar o interesse e motivação deles mesmos desenharem e participarem de todo o processo. Para os professores, os *softwares* de Química Computacional podem atuar como um recurso didático digital para ensinar conceitos abstratos de Química.

Palavras-chave: recurso didático; *software* de química computacional; visualização; química quântica; ancoramento molecular.

ABSTRACT

Abstract concepts in the subject of chemistry can be difficult for students to understand, as they cannot be visually perceived from something that is commonly experienced. Thus, the use of computer simulations in teaching can contribute for the understanding of these concepts, because it allows students to visualize what cannot be observed macroscopically. This study used molecular modeling simulations specifically computational chemistry software with students in order to generate visual representations of molecules. The use of WebMO software with semi-empirical quantum methodology was used to carry out the calculations and the AutoDock software to carry out with molecular docking mechanics methodology. A total of 14 Civil Engineering students from the first period and 157 Agronomy students from the first and second period of the 2021/1, 2021/2 and 2023/1 semesters carried out the computer simulations. The software served as a didactic resource to appropriate knowledge about chemical bonds, molecular geometry, frontier molecular orbitals and intermolecular interactions. Initially, the content was explained and then two activities were proposed to be developed in the WebMO software and two molecular docking in AutoDock4 between the enzyme ACCase and the herbicides clefoxidim and glyphosate. At the end of the semester, students answered a questionnaire about their use of WebMO. The WebMO mobile app and AutoDock4 software allowed the students to interact with the content as they carried out the simulation themselves. However, the difficulty encountered in this process is the fact that most of the specific software for computational chemistry is in English. Generally, specific software for computational chemistry is used to discover new compounds, new drugs, new methodologies for analyzing detection, the functioning of biomolecules, discoveries of new types of bonds and molecular interactions. They are used to develop groundbreaking work carried out by researchers from all over the world, and generally, most of this software is in English so that the language of these programs can be universalized, and it was precisely the language that was the greatest difficulty the students encountered in carrying out the simulations done by the Brazilian students. In both WebMO and AutoDock4 softwares, the visualization of chemical concepts helped the understanding of chemistry concepts. On the other hand, for the molecular docking, the students were able to understand the theory of chemistry in relation to the practice when they study or practice the use of herbicide to combat weeds in the planting field. This study showed that students can use computer simulations and learn about the equations that govern them and learn with more easily chemical informations, and it created more interest and motivation in this chemical field. For teachers, computational chemistry software can act as a digital teaching resource to teach abstract chemistry concepts.

Keywords: didactic resource; computational chemistry software; visualization; quantum chemistry; molecular docking.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Aplicativo do <i>software</i> WebMO.	59
Figura 2 - Imagem da etapa 1 do aplicativo do <i>software</i> WebMO.	60
Figura 3 - Imagem da etapa 2 e 3 do aplicativo do <i>software</i> WebMO.	61
Figura 4 - Imagem das etapas 4 (acima) e 3 (abaixo) do aplicativo do <i>software</i> WebMO.	62
Figura 5 - Interface AutoDockTools.	74
Figura 6 - Estrutura do herbicida clefoxidim ($C_{24}H_{32}ClNO_4S$).	75
Figura 7 - Estrutura da enzima ACCase sob o código 1UYR aberta no AutoDockTools.	77
Figura 8 - Processo do desenho da estrutura do herbicida clefoxidim.	78
Figura 9 - Caixa de grade no AutoDockTools que pode ser movida até a posição do sítio ativo da enzima.	79
Figura 10 - Esquema de um mapa de grid, espaçamento de grid foi de 0,375Å.	79
Figura 11 - Caixa de grade de 56x56x126 Å, já localizada na região do sítio ativo da enzima ACCase.	80
Figura 12 - Run AutoGrid e o Run AutoDock no AutoDockTools para realizar o ancoramento molecular.	80
Figura 13 - Uma das dez conformações do herbicida clefoxidim ancorado no sítio ativo da enzima ACCase, cada conformação, apresenta determinado valor e energia de interação.	82
Figura 14 - Representação das interações intra e intermoleculares do receptor e o ligante.	88
Figura 15 - Algoritmo genético convencional.	90
Figura 16 - cores dos átomos de cima para baixo no aplicativo do <i>software</i> WebMO: C (preto), oxigênio (vermelho), hidrogênio (branco), enxofre (amarelo), selênio (laranja-claro), fósforo (laranja-escuro), flúor (verde-lima), cloro (verde-claro) e zinco (lilás).	93
Figura 17 - Resposta a Atividade 1 enviada no semestre 2021/1.	95
Figura 18 - Resposta a Atividade 1 enviada no semestre 2021/2.	95
Figura 19 - Ângulos formados entre os átomos C-O-C (a) e C-C-O (b). Em preto: carbono; em vermelho: oxigênio e em branco: hidrogênio. Ambos os valores	

foram obtidos com a metodologia PM6. Os átomos de carbono e de oxigênio que estão selecionados ficam destacados em cor azul-claro translúcido.	96
Figura 20 - Vídeos gravados e disponibilizados no <i>Google Classroom</i> , sobre o aplicativo WebMO.	97
Figura 21 - Resultado para o cálculo de orbitais moleculares da molécula CH ₃ OCH ₃ . Na tabela, a coluna da esquerda indica os orbitais ocupados e não ocupados, com a quantidade de elétrons em cada um. Na coluna à direita, a energia de cada orbital em elétron-volt.	106
Figura 22 - Representação do orbital HOMO (a) e orbital LUMO (b) visualizado no aplicativo do <i>software</i> WebMO após os resultados do cálculo para orbitais moleculares.	108
Figura 23 - Resposta dos discentes (2021/1) de Agronomia e Engenharia Civil ao item: Achei muito difícil a utilização do aplicativo do <i>software</i> WebMO. (Q1).	111
Figura 24 - Resposta dos discentes de Agronomia (2021/2) ao item: Achei muito difícil a utilização do aplicativo do <i>software</i> WebMO. (Q1).	112
Figura 25 - Resposta dos ingressantes da Agronomia e da Engenharia Civil (2021/1) ao item: Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador durante as aulas. (Q2).	113
Figura 26 - Respostas dos ingressantes da Agronomia (2021/2) ao item: Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador durante as aulas. (Q2).	114
Figura 27 - Resposta à Atividade 1 enviada pelo um aluno A72.	130
Figura 28 - Arquivo da estrutura da enzima aberto no editor de texto bloco de notas, pode-se ver o nome do átomo e em qual resíduo de aminoácido está localizado.	136
Figura 29 - Representação dos herbicidas clefoxidim (a) e o glifosato (b) no sítio ativo da enzima ACCase. Acima: complexo ACCase-clefoxidim. Abaixo: complexo ACCase-glifosato. Em laranja, destaque para a região hidrofóbica do sítio ativo da enzima na qual o grupo propil do clefoxidim interage. Para o glifosato, não há interação nessa região.	143
Figura 30 - Enzima ACCase com o herbicida clefoxidim (-9,22 kcal/mol) em seu sítio ativo.	148
Figura 31 - Desenho do empilhamento π - π feito pelo aluno D4.	153

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Questionário.....	71
Quadro 2 - Respostas dos alunos A37, A38, C4, A5, A14, A23 e A26 ao item Q3 do questionário (2021/1).....	115
Quadro 3 - Respostas dos alunos A55, A57, e A60 ao item Q3 do questionário (2021/2).	116
Quadro 4 - Respostas dos alunos C1, C3, C7 e A8 ao item Q3 do questionário.....	116
Quadro 5 - Respostas dos estudantes de Agronomia (2021/1) sobre o uso do <i>software</i> WebMo, no aplicativo do celular.	117
Quadro 6 - Respostas dos estudantes de Engenharia Civil (2021/1) sobre o uso do <i>software</i> WebMo, no aplicativo do celular.	118
Quadro 7 - Respostas dos estudantes de Agronomia (2021/2) sobre o uso do <i>software</i> WebMO, no aplicativo do celular.	118
Quadro 8 - Respostas dos alunos C7, C10, A7, C4 e C8 ao item Q8 do questionário. (2021/1).....	122
Quadro 9 - Respostas dos alunos C2, A22, A27, A31, C8, A3 e C10 ao item Q8 do questionário.	123
Quadro 10 - Respostas dos alunos C3, A4, A11, A14, A15, A22, A27, A31 e A32 ao item Q8 do questionário.	124
Quadro 11 - Respostas dos alunos A48, A49, e A64 ao item Q8 do questionário (2021/2).....	125
Quadro 12 - Respostas dos alunos A17, A18, C13, A33, C11, A30, e A31 ao item Q8 do questionário.	126
Quadro 13 - Respostas dos alunos A67, A71, A72, A77, A79, A92, A97, A110, A111 e A117 ao item Q3 do questionário.	131
Quadro 14 - Respostas dos estudantes de Agronomia (2023/1) sobre o uso do <i>software</i> WebMO, em aplicativo do celular.	133
Quadro 15 - Respostas dos alunos A68, A72, A73, A80, A92, A102, A105 e A110 ao item Q8 do questionário.	134
Quadro 16 - Respostas dos alunos D3 e D15 à questão 1).....	146
Quadro 17 - Respostas dos alunos D1, D11, D13, D28, D33 e D35 à questão 1.....	149
Quadro 18 - Respostas dos alunos D8, D24 e D34 à questão 2).....	151
Quadro 19 - Respostas dos alunos D6 e D14 à questão 2.....	151

Quadro 20 - Respostas dos alunos D2, D4, D10, D18 e D39 à questão 2.	152
Quadro 21 - Respostas dos alunos D22 e D32 à questão 2.	156

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Moléculas e informações estruturais obtidas nos cálculos teóricos.	68
Tabela 2 - Energia de Ionização em eV (compute → orbitals).	70
Tabela 3 - Resultados das estimativas de energia de ligação livre de interação para os complexos ACCase-clefoxidim e ACCase-glifosato após o ancoramento molecular.	138
Tabela 4 - Estimativas de energia de ligação para os complexos formados com a ACCase, a partir da estrutura cristalográfica.	141

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

3D *three-dimensional*

4G *4th-Generation Wireless*

ABNT Associação Brasileira de Normas Técnicas

ACCase acetil-coenzima A carboxilase

ADT AutoDockTools

ALA aminoácido alanina

AM1 *Austin Model 1*

CNDO *Complete Neglect of Differential Overlap*

COVID-19 *corona virus disease 2019*

dims ciclohexanodionas

EIS Ensino no Isolamento Social

DNA ácido desoxirribonucleico

EPSPs 5-enolpiruvilshiquimato-3- fosfato sintase

eV elétron-volt

fops ariloxifenoxipropionatos

G energia de Gibbs

GLY aminoácido glicina

H entalpia

HOMO *Highest Occupied Molecular Orbital* (orbital molecular ocupado de mais alta energia)

IBGE Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística

IES Instituição de Ensino Superior

INDO *Intermediate Neglect of differential Overlap*

IUPAC *International Union of Pure and Applied Chemistry* (União Internacional de Química pura e Aplicada)

I energia de ionização

ILE aminoácido isoleucina

L ligante

LED *Light Emiting Diode*

LEU aminoácido leucina

ln logaritmo natural

LUMO *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (orbital molecular não ocupado de mais baixa energia)

mmol concentração em milimolar

MNDO *Modified Neglect of Diatomic Overlap*

nmol concentração em nanomolar

NDDO *Neglect Diatomic differential overlap*

NDO *Neglect of Differential Overlap*

OM orbitais moleculares

P pressão

P receptor

PDB estrutura tridimensional no formato *Protein Data Bank*

PDBQT estrutura tridimensional no formato *Protein Data Bank* com informações de carga pontual atômica e raio atômico

PET polietileno tereftalato

pH potencial hidrogeniônico

PhET Physics Education Technology

PM3 *Parametric Method 3*

PM6 *Parametric Method 6*

PM7 *Parametric Method 7*

Q1 Questão 1

Q2 Questão 2

Q3 Questão 3

Q4 Questão 4

Q5 Questão 5

Q6 Questão 6

Q7 Questão 7

Q8 Questão 8

Q9 Questão 9

Q10 Questão 10

QM/MM Mecânica Quântica/Mecânica Molecular

R constante universal dos gases perfeitos

RDD Recursos Didáticos Digitais

RM1 *Recife Model 1*

RNA ácido ribonucleico

S entropia

SARS-Cov-2 coronavírus da síndrome respiratória aguda grave 2

SER aminoácido serina

TIC Tecnologias da Informação e Comunicação

TDIC Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação

TLV Teoria da Ligação de Valência

TOM Teoria do Orbital Molecular

TYR aminoácido tirosina

V volume

VAL aminoácido valina

VSEPR *Valence Shell Electron Pair Repulsion*

ZDO *Zero Differential Overlap*

Wi-fi wireless field, área sem fio

K_i constante de inibição

Δ letra delta do alfabeto grego, significa variação

μmol concentração em micromolar

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	19
1.1 TECNOLOGIAS DIGITAIS DA INFORMAÇÃO E COMUNICAÇÃO	19
1.1.1 TDIC e imagens no ensino	26
1.1.2 Alfabetização Midiática e Alfabetização Transmídia	30
1.2 TDIC, <i>MOBILE LEARNING</i> . ENSINO E VISUALIZAÇÃO, TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA E SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS	32
1.3 OBJETIVO GERAL	53
1.3.1 Objetivos Específicos	54
2 PERCURSO METODOLÓGICO	55
2.1 TIPO DA PESQUISA	55
2.2 O CONTEXTO DA PESQUISA	57
2.3 O APLICATIVO DO SOFTWARE WEBMO	58
2.3.1 O procedimento com o aplicativo do software WebMO	63
2.4 O ANCORAMENTO MOLECULAR (<i>MOLECULAR DOCKING</i>) E PROCEDIMENTO EM SALA DE AULA	73
3 REFERENCIAL TEÓRICO SOBRE OS SOFTWARES UTILIZADOS	84
3.1 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO APLICATIVO DO SOFTWARE WEBMO	84
3.2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO ANCORAMENTO MOLECULAR	87
4 RESULTADOS	92
4.1 RESULTADOS APÓS USO DO APLICATIVO DO SOFTWARE WEBMO	92
4.2 RESULTADOS E DISCUSSÕES SOBRE O USO DO ANCORAMENTO MOLECULAR	135
CONSIDERAÇÕES FINAIS	159
REFERÊNCIAS	162
ANEXO	177

1 INTRODUÇÃO

1.1 TECNOLOGIAS DIGITAIS DA INFORMAÇÃO E COMUNICAÇÃO

Desde o início da humanidade, a comunicação é essencial para os seres humanos. Essa comunicação evoluiu no decorrer do tempo e passou dos símbolos desenhados nas cavernas para as tecnologias digitais que são usadas hoje. Assim, com a evolução na comunicação, as trocas de conhecimento, os registros de eventos e a expressão de ideias e sentimentos foram também transformados, com as tecnologias digitais sendo utilizadas para conectar e compartilhar informações (Rodrigues, 2016).

E o que se entende por tecnologias? De forma geral, existe um entendimento de que tecnologia está relacionada a objetos que são fabricados na indústria, como carros, computadores, celulares, eletrodomésticos, dentre outros acessórios (Abreu; Claudino, 2020). Essa é uma conceituação que compreende a tecnologia como sinônimo de “objetos tecnológicos” que são feitos industrialmente.

Teoricamente, a definição de tecnologia diz respeito ao conjunto de conhecimentos que foram desenvolvidos pela Ciência para se produzir equipamentos e produtos, tecnologia também é o conjunto das técnicas que estão relacionadas a alguma área de produção. Outra definição compreende que a tecnologia sempre existiu em todas as sociedades e servia às ações guerreiras contra demais grupos, alguns exemplos incluem: a invenção do arco e flecha até a produção da bomba atômica. Sendo assim, tecnologia também pode ser entendida como a ciência das técnicas (Abreu; Claudino, 2020).

O uso de Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDIC), faz-se um adendo de que alguns autores utilizam a expressão Tecnologias da Informação e Comunicação, abreviada pela sigla TIC, teve um histórico que perpassou pelo início da escrita, da imprensa, do telefone e do telégrafo. Posteriormente, teve-se a criação dos cartões perfurados que armazenavam dados digitais e que serviu para automatizar o tratamento de informações e dados pessoais. Com isso, ações como o censo nos Estados Unidos puderam ser realizadas em menor tempo, de modo a auxiliar em um serviço que antes demoraria muito mais. Posteriormente, o criador dos cartões perfurados, Herman Hollerith, veio a fundar uma empresa que mais tarde se tornou a IBM (*International Business Corporation*) (Ruaro; Mañas; Molinaro, 2017).

No entanto, cabe dizer que não são só esses aspectos benéficos que as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação trouxeram. Um exemplo pode ser dado com esses mesmos cartões que auxiliaram em um menor tempo de realização do censo, já que essa mesma tecnologia foi utilizada para atribuição de códigos de identificação das pessoas que se encontravam em campos de concentração (Ruaro; Mañas; Molinaro, 2017).

Esse cenário traz uma reflexão acerca do fato de que as tecnologias, mesmo que utilizadas como uma ferramenta para a informação e comunicação, podem atuar servindo a sociedade tanto para facilitar ações que gerem algum benefício, bem como podem facilitar ações e comportamentos que façam mal. Como na situação mencionada anteriormente, depende do entendimento e da forma são usadas.

Uma das ferramentas que é originada a partir do conhecimento das tecnologias e que até hoje é utilizada em diversas áreas da sociedade é o computador, cuja ideia inicial estava nos cartões perfurados que guardavam dados. Em relação aos primeiros computadores, esses não tinham a possibilidade de interatividade da forma como se tem hoje. O computador era visto como uma “máquina colossal” pela sociedade, algo difícil de ser usado e manejado, algo distante da nossa realidade (Ruaro; Mañas; Molinaro, 2017).

Gillmor (2004) discorre que os primeiros computadores eram como caixas pretas para os usuários e que, posteriormente, lançaram-se as interfaces e os sistemas operacionais livres com o objetivo de garantir *softwares* gratuitos e com o código fonte aberto, o qual permite que qualquer pessoa o acesse e possa fazer modificações. O autor faz uma analogia entre as vantagens dos códigos abertos dos computadores com as capacidades de comunicação, no sentido de não serem concentradas, de modo que o conhecimento é distribuído e não monopolizado. (Gillmor, 2004).

O computador, inicialmente, era visto como algo longe da realidade das pessoas, porque o ser humano utiliza palavras, conceitos, imagens e sons para raciocinar, enquanto o computador, ao manipular apenas sequências de zeros e uns sem a presença do ser humano, seria apenas uma máquina de cálculos sem eficiência. Para fazer uma representação desses zeros e uns que fizesse sentido para o usuário, foi elaborada uma “interface gráfica do usuário” (GUI - *graphical user interface*), que tornou a linguagem binária compreensível aos indivíduos. Em conjunto a essa interface gráfica, com a inclusão do *mouse*, qualquer movimento

que se fizesse refletia na tela. Isso criou um vínculo entre o usuário e o computador e foi possível manipular e interagir com os elementos dentro do computador, em vez de apenas visualizá-los (Johnson, 2001).

Com essa introdução da GUI e do *mouse*, houve uma mudança significativa na interação entre humanos e computadores, ampliando o uso por aqueles que não compreendiam as interfaces baseadas apenas em linhas de comando. A GUI tornou os zeros e uns visíveis e compreensíveis, permitindo que os usuários pudessem interagir com a máquina de forma intuitiva, apontando para elementos na tela e manipulando-os diretamente em vez de ter que escrever um comando para o computador abrir um arquivo. Essa mudança gerou consequências sociais e as novas ferramentas evidenciaram a relação entre o computador e seu papel na sociedade, gerando até mesmo um novo espaço digital que vai além das ferramentas (Johnson, 2021).

Nesse contexto de computadores e comunicação, a *internet* é o meio de comunicação mais importante já criado, desde a impressora, porque transformou fundamentalmente a maneira de comunicar, permitindo que qualquer pessoa se torne um escritor para um público global. De modo que se desenvolve uma mudança de algo hierárquico para algo mais democrático, os *blogs* e outros tipos de mídia já vêm mostrando essa mudança, que está sendo ocasionada pela junção da tecnologia, o jornalismo e a comunicação. Os antigos consumidores de notícias são agora também usuários ativos (Gillmor, 2004).

Assim, a *internet* deve ser a aliada da promoção do pensamento e não ser usada para reações impulsivas, de modo que a pessoa informada não deve se contentar com mais do mesmo, mas sim buscar e contribuir para debates mais amplos (Gillmor, 2004). Desse modo, os computadores pessoais e a *internet* modificaram o cenário dos computadores como caixas pretas com linguagem de zeros e uns, distante da realidade das pessoas, passando a ser tecnologias que possuem mobilidade para serem utilizadas em diferentes espaços. Isso pode ser feito com ferramentas de mensagens instantâneas como *WhatsApp*, *Skype*, *Messenger*, *Telegram* e *Twitter* com as quais as informações chegam mais rápidas ainda (Ruaro, Mañas, Molinaro, 2017).

Essa mobilidade de utilizar as tecnologias começou a partir da década de 1990 com o surgimento da *Web*, pois iniciou-se, assim, um sistema de interação e conectividades *online*, de modo que a sociedade deixou de apenas ser receptora e

passou também a interagir no ciberespaço, que é o local onde se habita na *internet*. Ciberespaço é, portanto, “a *internet* habitada por seres humanos, que produzem, se autorizam e constituem comunidades e redes sociais por e com as mediações das tecnologias digitais em rede” (Santos, 2019, p. 30). Nessa perspectiva, a cibercultura compreende e é caracterizada por todas as formas de produção cultural e fenômenos sociotécnicos que se originaram a partir da interação do ser humano com os objetos digitalizados e que estão conectados à *internet* (Santos, 2019).

Esse local onde se habita na *internet*, o ciberespaço, vem proporcionando contextos e práticas inovadoras e diferenciadas, principalmente após a evolução da *web* 1.0 e após a inclusão de redes sociais que permitiram maior participação autoral daqueles que utilizam a *internet*. Esse cenário se tornou favorável à educação democrática, devido justamente ao fato dessa possibilidade de conteúdo autoral na *internet* e, com isso, emerge a possibilidade de compartilhamento, colaboração e interatividade que “potencializa as práticas pedagógicas baseadas em fundamentos valorizados como autonomia, diversidade, dialógica e democracia.” (Santos, 2019, p. 33).

Cabe ressaltar que, nas práticas pedagógicas, inicialmente, a *internet* era utilizada principalmente para professores e alunos acessarem um repositório de informações para consultá-las (Santos, 2019). Seguidamente, o que se vê na *internet*, em relação à educação, é que os professores podem criar conteúdos em redes sociais, propor aulas com utilização da *internet* usando o celular, já que que o *Wi-fi* (*wireless field*, área sem fio) permite a mobilidade e acesso a informações em vários locais. Acentua-se que um dos aspectos que o professor precisa considerar na prática docente, de modo a abranger essas possibilidades de mobilidade de acesso à informação de diferentes locais, é se preocupar também em elaborar práticas por meio das quais o aluno possa interagir e participar e não apenas pesquisar sobre os conteúdos estudados (Santos, 2019).

Além da preocupação com as práticas elaboradas para o ensino utilizando tecnologias digitais, há outro aspecto a se considerar, que é o risco de ter dados pessoais acessados por terceiros. O uso da *internet* por meio das tecnologias agrega um risco de exposição pessoal que pode permitir que outros consigam obter dados e informações indiscriminadamente. Isso causa insegurança aos usuários quanto à sua privacidade e intimidade. Sendo assim, é necessário conciliar o

desenvolvimento e avanço das TDIC também com a segurança das pessoas (Ruaro; Mañas; Molinaro, 2017).

No Brasil, o direito à proteção de dados se baseia em um princípio básico previsto na Constituição Federal que é a dignidade humana, sendo que a proteção dos dados pessoais, os direitos de liberdade, de intimidade e de privacidade são direitos que estão vinculados a esse princípio (Ruaro; Mañas; Molinaro, 2017).

Indo ao encontro da necessidade de proteção desses direitos, a Lei Geral de Proteção de Dados Pessoais, que foi publicada em 14 de agosto de 2018 (Brasil, 2018), tem o objetivo de proteger os direitos fundamentais de liberdade, de privacidade e de livre formação da personalidade do indivíduo. E versa sobre a proteção de dados pessoais, estejam estes em meio físico ou digital de pessoa jurídica ou de pessoa física, seja de direito público ou privado. Para isso, inclui operações que devem ser feitas manualmente ou digitalmente para a proteção desses dados pessoais. A lei ainda prevê quais as sanções em virtude das infrações cometidas pelos agentes que devem tratar e proteger esses dados.

Outra questão, que causa apreensão quanto ao uso das TDIC, é a necessidade de atentar a aspectos como o fato de a contemporaneidade estar sendo marcada pela rapidez e inconstância nas interações sociais, afetivas e profissionais e esse contexto acaba por ocasionar sofrimento psicológico entre os jovens. Além disso, os veículos de comunicação podem se tornar dispositivos de controle, já que, nesses veículos, as pessoas midiáticas discursam e aparentam situações que os jovens também querem seguir (Maciel *et al.*, 2018).

É essencial investir na melhoria do uso das TDIC em áreas como a educação, a fim de assegurar que não se torne marcada por essa rapidez e que não seja inconstante. Por isso é importante também conhecer sobre como se dá seu uso nos diferentes segmentos sociais, como na educação. Considerando essas informações, são trazidos aqui alguns dados relacionados a esse contexto no Brasil, a partir das informações disponibilizadas pelo Centro Regional de Estudos para o Desenvolvimento da Sociedade da Informação (Cetic.br).

O Cetic.br é um departamento do Núcleo de Informação e Coordenação do Ponto BR (NIC.br) que, por sua vez, é integrado ao Comitê Gestor da *Internet* do Brasil (CGI.br). Foi criado em 2005 e, desde então, tem como objetivo monitorar como se encontra a adoção das Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC) no Brasil. O monitoramento é importante, pois permite conhecer como está a

utilização das TDIC em públicos de contextos e idades diferentes, esse conhecimento auxilia em estratégias para melhoria e ampliação desse uso.

A última publicação em relação às TDIC no contexto educacional foi feita em 22 de novembro de 2023, quando da escrita desse trabalho, e um dos documentos verificou o percentual de escolas no que se refere à disponibilidade de conectividade para os alunos utilizarem em atividades educacionais (Cetic.br, 2023a). Os resultados publicados mostraram que 63% das escolas brasileiras do nível Fundamental e Médio têm computador disponível para o uso dos alunos; 80% possuem *internet* disponível para os alunos utilizarem e 58% das escolas possuem ambos, tanto computador quanto *internet* disponível.

Das escolas públicas brasileiras municipais, estaduais e federais de ensino fundamental e Médio, 93% têm acesso à *internet* e 59% têm presença de computador para uso dos alunos e, das escolas particulares, 99% têm acesso à *internet* e 80% computador para uso dos alunos. Sobre o aspecto da *internet* das escolas não suportar muitos acessos ao mesmo tempo, a pesquisa revelou que isso ocorre em 45% das escolas municipais, 50% das escolas estaduais e 15% das escolas particulares de ensino fundamental e médio. O relatório expressou nas suas discussões que esses dados são as principais barreiras ao uso de tecnologias digitais em atividades de ensino e de aprendizagem. O estudo ainda apontou que:

Nesse contexto, dispositivos pessoais, como telefones celulares, tornaram-se alternativas às restrições de conectividade nas escolas. Ainda assim, as desigualdades de oportunidades persistiam para estudantes e educadores que não possuíam as condições adequadas para o acesso significativo às tecnologias digitais (Cetic.br, 2023a, p. 76).

Quanto ao uso de tecnologias digitais por professores, no ensino médio, 83% utilizaram o telefone celular para as atividades com os alunos; 65% utilizaram projetor multimídia, 63% computador portátil, 52% dos professores utilizaram televisão como dispositivo para desenvolver as atividades com os alunos; 44% computador de mesa; 16% *tablet* e 12% a lousa digital. Pode-se notar que o telefone celular é o dispositivo mais utilizado, talvez por sua facilidade de transporte e devido à maioria dos professores possuir um celular. (Cetic.br, 2023a).

Outro resultado incluído na publicação avaliou a porcentagem de alunos, por uso de tecnologias digitais em atividades educacionais na escola, especificamente no ensino médio. A principal atividade realizada por 78% dos alunos é o uso do computador ou do celular para fazer pesquisas sobre o que o professor falou na aula.

Dentre as demais atividades, 37% dos alunos usaram o celular ou o computador para jogos que os professores pediram, e a atividade de menor percentual entre os alunos, seja usando o computador ou o celular, foi usar esses recursos para gráficos e planilhas. Por outro lado, 32% dos professores de nível Fundamental e Médio implementaram atividades em que os alunos usem tecnologias digitais de forma criativa para resolver problemas (Cetic.br, 2023a).

Dessa forma, percebe-se que as tecnologias digitais estão presentes no contexto educacional, com os professores utilizando essas tecnologias sob a forma de diferentes dispositivos, sendo o celular o mais utilizado para as atividades com os alunos. No que tange à integração de tecnologias digitais às atividades de ensino e de aprendizagem, nos 12 meses anteriores à realização da pesquisa do Cetic.br, 39% dos professores fizeram uso das TDIC para trabalhar com jogos educativos digitais; 80% para realizar aulas expositivas; 84% para solicitar a realização de exercícios e 89% para solicitar a realização de pesquisas (Cetic.br, 2023a).

O Cetic.br também realizou estudo publicado em 2023 sobre o uso das tecnologias nos domicílios brasileiros, os resultados mostraram que 80% dos domicílios possuem acesso à *internet*. E dentre aqueles que não possuem, é porque os moradores consideraram que a *internet* é um serviço caro. Quanto ao uso dos dispositivos que possuem *internet*, 99% dos brasileiros usam *internet* pelo celular (sendo 85% usam para enviar mensagens instantâneas), 55% pela televisão e 38% pelo computador (Cetic.br, 2023b).

A partir dessas informações, observa-se que a maioria dos brasileiros possui serviço de *internet* no celular, o que sugere a possibilidade de que esse dispositivo possa ser utilizado como uma ferramenta para estudar conteúdos de diferentes disciplinas, abrangendo todos os níveis de educação (Cetic.br, 2023b).

Em relação aos usuários de computador, quando foi realizada a pesquisa do Cetic.br em, 49% estavam com idade entre 16 a 34 anos; 91% eram pertencentes à classe social A e 16% eram da classe D e E; 43%, 34% e 35%, respectivamente, brancos, pretos e pardos. Quanto ao nível de escolaridade, 80% dos indivíduos com ensino superior usaram computador como dispositivo, enquanto esse percentual é de 40% dentre aqueles que possuem ensino médio (Cetic.br, 2023b).

Estar atualizado sobre as informações e os valores percentuais referentes ao uso das tecnologias digitais de informação e comunicação é relevante para entender a realidade dos brasileiros e obter um panorama dos dispositivos mais utilizados,

bem como sobre seu acesso à *internet*. Além disso, é importante conhecer a situação das TDIC nas escolas públicas e privadas. Os dados publicados em 2023 revelaram, por exemplo, que ainda existem diferenças no acesso à *internet* e na utilização de diversos dispositivos conectados ao mesmo tempo em sala de aula entre escolas particulares e públicas, sendo que as privadas ainda apresentam percentuais melhores.

1.1.1 TDIC e imagens no ensino

Como foi apresentado, as TDIC estão presentes na sala de aula e também nos domicílios das pessoas, isso gera modificações no cotidiano desde a infância, na pré-adolescência e adolescência. No trabalho de González-Patiño (2011), o autor buscou pesquisar sobre as consequências evolutivas que estão relacionadas às mudanças de vida da infância contemporânea ocidental e que são causadas pelas tecnologias de informação e comunicação.

Nessa perspectiva, o estudo do autor foi realizado com uma pré-adolescente de 12 anos e os resultados do trabalho evidenciaram dois aspectos principais: as situações de comunicação se manifestam dependendo do tipo de mediação no uso das tecnologias, podendo ser a convergência, divergência e a acessibilidade. O outro aspecto dos resultados é que as tecnologias facilitam transformações interativas em diferentes espaços (González-Patiño, 2011).

Com base em fotografias do uso das TDIC, capturas de áudios feitas pela pré-adolescente e de entrevistas semiestruturadas realizadas durante um ano, em Madri, foi possível verificar que a participante fez uso extensivo e frequente das TDIC no colégio e em casa com o celular, videogame, computador e redes sociais e, a partir disso, o autor estudou a mediação tecnológica em seu cotidiano. Os resultados mostram que, além do uso de redes sociais e aplicativos, o computador também foi usado para estudos e trabalhos escolares (González-Patiño, 2011).

Dependendo do uso das TDIC, pode ocorrer convergência, divergência ou acessibilidade na mediação entre as mídias e dispositivos. A acessibilidade se refere tanto aos dispositivos quanto à localização em que está disponível o acesso das Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação. Convergência é a utilização simultânea de dispositivos, por exemplo, no caso de o estudante usar celular para conversar com uma colega e então fazer as correções de um trabalho no

computador. Por outro lado, a divergência ocorre quando se usa mais de um dispositivo ou mídia ao mesmo tempo sem que um ajude ou seja suporte à utilização de outro para realizar alguma tarefa (González-Patiño, 2011).

Outro trabalho buscou analisar e verificar como se dá a relação das vivências tecnológicas de alunos do 3º ano do ensino fundamental de uma escola particular do Rio de Janeiro, com suas experiências na escola. Depois de observação e entrevista com os alunos, as autoras verificaram alguns deslocamentos causados pela tecnologia nos modos de subjetivação (aprendizagem, concentração, tempo/espço e esforço/prazer). Esses deslocamentos foram analisados e concluiu-se que o empoderamento dado às crianças em relação ao uso de tecnologias pode-se tornar algo que é superficial. Nesse sentido, é a educação que pode ajudar a dar um rumo nessa utilização (Martins; Castro, 2011).

As atividades de informática estavam relacionadas às tarefas da sala de aula e sobre aprender usar *Word*, *PowerPoint*, dentre outros programas. Durante essas aulas de informática, os alunos tiveram mais facilidade e sabiam usar o computador, no entanto se mostraram mais passivos em outras aulas, apenas recebendo as informações da professora. Muitos alunos falaram na aula de informática que já sabiam utilizar o computador porque já o utilizavam em casa e que aprenderam sozinhos. As autoras também perceberam que eles deram prevalência ao uso de imagens nas aulas de informática para entender como fazer a atividade proposta (Martins; Castro, 2011).

Acerca do maior interesse pelas imagens, cabe destacar que as representações visuais se tornam cada vez mais variadas, numerosas e intercambiáveis entre diferentes mídias. No estudo de Pulita e Santos (2016), os autores procuraram investigar como as tecnologias digitais da informação, comunicação, expressão e circulação de imagens podem possibilitar novas formas de informar, comunicar e construir conhecimento na educação. Nesse sentido, seguiram uma metodologia qualitativa de pesquisa-ação realizada durante três semestres com 38 graduandos do curso de Pedagogia e de outros cursos de licenciatura da Faculdade de Educação da Universidade de Brasília. Os graduandos fizeram leitura discussão dos artigos de Paula Sibila: *O desmoronamento do sonho letrado: inquietação, evasão e Zapping* e *Salas de aula informatizadas e conectadas: muros para quê?*, assistiram e analisaram o *Janelas da alma*, de João Jardim e Valter Carvalho e produziram textos reflexivos sobre imagens.

Como resultado da análise dos textos reflexivos, os participantes mostraram preocupação com o excesso e rapidez de informação de imagens que as tecnologias proporcionaram, haja vista que, às vezes, perde-se até o significado das imagens e deixa-se de refletir sobre essas informações. Outros graduandos se preocuparam com o impacto de como as pessoas lidam com o imagético na educação formal, sendo até mesmo sugerida uma educação para selecionar quais se deve dar mais atenção dentre o turbilhão de informação de imagens.

Ademais, o estudo de Pulita e Santos (2016) destaca outros participantes que falaram da importância da educação de mediar e incentivar o olhar dos alunos, para ver a tecnologia também como uma forma de enxergar para além da escola, e que deve ser uma aliada da educação, uma vez que as novas gerações já nascem sabendo utilizá-la. É preciso pensar novos métodos educacionais que acompanhem esse fluxo, a escola e as tecnologias possuem funções e finalidades históricas que foram constituídas de formas diferentes. Nesse sentido, os autores se perguntaram “como manejar os limites e os limiares entre adaptação, redução, didatização e conciliação desses universos?” (Pulita; Santos, 2016, p.99).

Vale ressaltar que, apesar de a escola ser um dos locais que é fonte de construção de conhecimento, ainda há o fato de a escola tradicional ser vista como sinônimo de confinamento. Por outro lado, as tecnologias são vistas como algo que significa autonomia, proporciona conexões e compartilhamento, ao mesmo tempo em que podem aprisionar, podem alienar a consciência (Pulita; Santos, 2016, p.99).

Retornando ao trabalho de Martins e Castro, (2011), além de verificarem que os alunos nas aulas de informática tiveram um maior interesse nas imagens do computador, as autoras também relataram que, quando começavam a jogar no computador, não se interessaram em ler a explicação de como jogar, não leram as regras e foram seguindo as figuras para entender. Em decorrência da falta de leitura, muitas vezes, erravam o objetivo do jogo e, assim, foram errando e acertando, descobrindo sozinhos ou perguntando a opinião dos colegas para conseguirem concluir a atividade (Martins; Castro, 2011).

Esse cenário evidencia que os alunos apresentaram desinteresse pela leitura das regras e se envolveram mais com as imagens, baseando-se nelas para jogar no computador. Apesar de cometerem erros apenas com a observação das figuras, preferiram consultar os colegas ou explorar soluções de forma independente em vez de ler o texto, demonstrando que, embora a parte escrita seja importante para a

explicação, as imagens foram a principal ferramenta de compreensão e execução para os alunos.

Neste contexto, as autoras perceberam que:

enquanto na escola pesquisada existia um caminho mais definido para o processo de aprendizagem (os educadores dando a direção), em um sentido mais tradicional da concepção de ensino, a aprendizagem através da tecnologia se dava de forma mais individual, acontecendo por tentativa (acerto e erro), por intuição, e com ajuda das imagens. A modelização cognitiva por meio do uso do computador se operacionaliza pela rapidez com que se demanda reagir aos elementos visuais apresentados na tela. Podemos supor que a rapidez ensejada pelo uso das TIC induz a uma maneira mais superficial de elaboração cognitiva, ao se compará-la com a aprendizagem escolar realizada na relação de transmissão professor-aluno praticada no tempo estendido da fala, da escuta e da interação entre ambos, e condicionada ao enquadre de atenção dirigida a um outro. (Martins; Castro, 2011, p. 626).

Com o uso da tecnologia, muitas tarefas, que antes demoravam mais tempo, podem ser mais rápidas. E como o aluno quer aprender rápido ou desenvolver as atividades, tarefas ou jogos de forma rápida, como apresentado pelas autoras Martins e Castro (2011), talvez possa ocorrer essa elaboração cognitiva de forma mais superficial. No entanto, cabe aqui uma reflexão, essa pressa do aluno em utilizar imagens para fazer algo sozinho com rapidez não poderia, de certa forma, auxiliar no aprendizado, já que, ele mesmo está buscando aprender algo por conta própria?

Outro aspecto observado por Martins e Castro (2011) é que a maioria fez as tarefas no computador com desvio de atenção, realizando outras atividades e sem foco. No entanto, no contexto das TDIC na sociedade, há uma necessidade de atenção múltipla, antes os modos de subjetivação (aprendizagem, concentração, tempo/espço e esforço/prazer) não se condicionavam a esses múltiplos focos. Vale ressaltar, ainda, que os alunos interagiram mais nas aulas de informática e ficaram entediados quando terminavam a tarefa nas demais disciplinas,

Nota-se, neste estudo, que os alunos já sabiam utilizar o computador, ou seja, já tinham algum tipo de alfabetização para utilizá-lo quando chegavam para as aulas de informática (Martins; Castro, 2011). Há a necessidade, portanto, de se falar sobre alguns conceitos, uma vez que, no contexto da difusão das tecnologias digitais, existem conceitos tanto no âmbito acadêmico quanto profissional. Esses conceitos incluem os termos alfabetização midiática e alfabetização transmídia (Scolari, 2018).

1.1.2 Alfabetização Midiática e Alfabetização Transmídia

Scolari (2018) discute teóricos que veem a alfabetização midiática como uma medida de proteção contra os efeitos negativos das mídias e outros que veem a alfabetização midiática como sendo baseada em termos como “consciência crítica”, “participação democrática” e até “desfrute dos meios”. Essa visão é conhecida também como educação midiática e envolve uma pedagogia mais centrada nos alunos.

De acordo com o dicionário Priberan¹, mídia é definida como:

Todo o suporte de difusão de informação (rádio, televisão, imprensa, publicação na *Internet*, videograma, satélite de telecomunicação, etc.) que constitui ao mesmo tempo um meio de expressão e um intermediário na transmissão de uma mensagem.

Portanto, faz sentido falar-se também em alfabetização transmídia, já que a informação não é mais transmitida apenas de um indivíduo para muitos, mas sim de muitos indivíduos para muitos outros. Nessas práticas, o indivíduo compartilha, produz e consome mídia, e, por isso, a alfabetização midiática não pode mais se limitar a uma análise crítica das mídias (Scolari, 2018).

Considerando que a maioria dos jovens se conecta à *internet* e usa as redes sociais como meio de comunicação e socialização, a alfabetização transmídia pode ser vista como uma série de habilidades, práticas, sensibilidades, prioridades e uma série de estratégias de aprendizagem nas novas culturas que são mais participativas. Enquanto que a alfabetização tradicional é focada nos livros, a alfabetização midiática é mais focada na televisão e a alfabetização transmídia se concentra nas redes digitais e nas experiências com as mídias interativas (Scolari, 2018).

Tradicionalmente, as diferentes formas de alfabetização tratam a pessoa como sendo analfabeta, um receptor passivo de informações. Na alfabetização midiática o indivíduo é tratado como um expectador passivo. Em contrapartida, na alfabetização transmídia, o indivíduo é um prosumidor, ele não apenas consome, mas também é ativo, cria, participa, produz e se envolve no processo (Scolari, 2018).

Sobre o conceito de prosumidor, Irigaray (2019) assevera que é importante observar que esse termo possui uma raiz economicista, a junção de consumidor e produtor, por isso deve-se sempre estar atento e levar em consideração que esse termo é usado em relações comunicativas democráticas e horizontais, para que

¹ <https://dicionario.priberam.org/m%C3%ADdia>

possa assim promover experiências verdadeiras de construção e coautoria. De modo que, no contexto transmídia, as pessoas sejam atores sociais que possam interagir e se desenvolver nos ambientes virtuais e também em território. Nesse contexto, quando as pessoas estão envolvidas, a comunicação transmídia auxilia a empoderar as comunidades de modo que possam comunicar e transmitir suas histórias, o que pode ajudar a mudar e transformar seus contextos (Irigaray, 2019).

Em relação ao espaço, a alfabetização tradicional geralmente ocorre na escola, contudo as novas gerações também desenvolvem suas competências fora das instituições escolares, em espaços informais de aprendizagem, e esses espaços constituem um componente fundamental da alfabetização transmídia (Scolari, 2018). Quando se usam diferentes códigos: como texto, vídeo, fotografia, animação, infográficos, áudio para contar uma história em uma única plataforma digital, tem-se uma forma de convergência de diferentes linguagens (Irigaray, 2019).

Outro aspecto que é diferente na alfabetização transmídia é o papel do professor, que deixa de ser autoridade e o mediador do texto e passa a ser um facilitador do conhecimento, que busca envolver os alunos em um processo de aprendizagem participativa. Atua assim, como um professor mais descentralizado e flexível que promove o aprendizado de baixo para cima, o professor pode ser entendido, ainda, como a interface entre a instituição educacional (a sala de aula, por exemplo) e a ecologia da mídia externa (local onde os alunos criam e vivem) (Scolari, 2018).

De tal modo, no contexto da crescente participação das mídias em diversos ambientes e espaços sociais, existe, portanto, a alfabetização transmídia, que envolve habilidades, práticas e sensibilidades específicas para atuar em uma cultura cada vez mais participativa. E isso se reflete também na educação, nos espaços de aprendizado que não são exclusivamente mais na escola. Os alunos chegam na sala de aula então sabendo mexer nas redes sociais, nos aplicativos de comunicação, já postam seus conteúdos, já possuem em parte uma alfabetização transmídia, sendo assim, é cada vez mais importante trazer essas TDIC para o ambiente de sala de aula a fim de auxiliar tanto os alunos quanto os professores também no processo de ensino aprendizagem.

Ainda sobre transmídia, Irigaray (2019) acrescenta:

Cabe destacar também que transmídia não é o mesmo que digital e *online*: as narrativas transmídia têm a extraordinária capacidade de conectar meios digitais e

analógicos, ressignificar o papel dos meios tradicionais e incorporar uma multiplicidade de plataformas válidas para contar histórias, com uma boa dose de engenho e criatividade. (Irigaray, 2019, p.392)

Destaca-se, assim, também a importância de as narrativas transmídias conectarem os meios analógicos e os tradicionais com os digitais. Isso possibilita uma experiência mais rica no contexto educacional, porque pode incluir diferentes tipos de meios de comunicação, as mídias digitais com as aulas que se ministram de forma analógica. Sob essa ótica, algum conteúdo aprendido em sala, com o uso do quadro e pincel e com escrita e desenvolvimento das atividades no caderno, pode ser trabalhado também com ferramentas digitais, o aluno aprende em diferentes formatos e um formato pode complementar o outro, sempre buscando que o aluno possa interagir com essas ferramentas e manuseá-las em seu processo de estudar algum conteúdo.

1.2 TDIC, *MOBILE LEARNING*. ENSINO E VISUALIZAÇÃO, TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA E SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Apesar da inserção das Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDIC) como recurso didático nos processos pedagógicos, ainda há docentes que possuem aversão quanto ao seu uso em sala de aula, seja em relação ao uso de tecnologias mais atuais quanto em relação às anteriores. Isso ocorre principalmente devido à falta de formação para trabalhar com essas tecnologias e devido à questão de adequação de qual tecnologia utilizar para desenvolver o conteúdo a ser estudado (Leite, 2019).

De maneira geral, a falta de entendimento sobre algo, especialmente tecnologias desconhecidas ou não dominadas, pode causar insegurança e medo. No contexto das tecnologias aplicadas à sala de aula, poderia o professor utilizar uma tecnologia com a qual não tem familiaridade ao trabalhar com os alunos? Partindo desse pressuposto, é necessária uma formação e capacitação primeiro.

Para além disso, mesmo quando ocorre capacitação dos professores, geralmente, não são consideradas as condições de trabalho do professor. Assim, é necessário primeiro essa avaliação para que depois ocorram essas capacitações. É importante avaliar a estrutura do ensino, incluindo a remuneração, a infraestrutura do espaço físico até mesmo a liberdade docente para criação. É preciso até mesmo entender como está a carga horária do professor, se existe apoio pedagógico e

psicológico da instituição de ensino a fim de que possa se capacitar e aplicar o conhecimento sobre a utilização das tecnologias em suas aulas (Flores; Ribeiro; Echeverria, 2017).

É importante reiterar que, se o professor estiver sobrecarregado com carga horária e excesso de atividades, não conseguirá se dedicar ao estudo e formação para utilizar as tecnologias em sua prática na sala de aula. Percebe-se que existem, dessa forma, muitos aspectos envolvidos na efetiva utilização das tecnologias no ensino, principalmente, porque existem diferentes tipos de dispositivos em que as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação estão presentes.

Considerando a informação inicial de que os professores precisam de capacitação para desenvolver o uso das tecnologias em suas práticas pedagógicas, ressalta-se que, dentre as tecnologias que podem ser utilizadas, estão aquelas se mostram incorporadas nos mais diferentes dispositivos como o computador, telefone, videogame, *softwares*, vídeos, *internet*, televisão, dentre outros. E devido ao fato desses dispositivos que podem atuar como ferramentas da tecnologia convergirem tanto a informação quanto a comunicação são, por isso, chamadas tecnologias da informação e comunicação. Uma vez que podem facilitar a troca de informação e conhecimento na educação, podem atuar como um recurso pedagógico, no entanto, “para que as TIC possam trazer alterações no processo educativo, elas precisam ser compreendidas e incorporadas pedagogicamente” (Leite, 2019, p. 319).

Nesse sentido, é preciso que as TDIC não sejam vistas como substitutas das outras tecnologias, por exemplo, substituir o quadro por computadores e *smartphones*. Realizar uma substituição não vai causar mudança na aprendizagem, não é a troca de uma tecnologia pela outra que fará isso. Contudo, é importante pensar na necessidade de construção de recursos didáticos baseados nas tecnologias, Recursos Didáticos Digitais (RDD), de uma forma que possibilite considerar os aspectos de educação e de comunicação. Dentro desse contexto, o fato de as RDD serem ferramentas que permitem formas de linguagem como as imagens, textos, sons e outros, podem facilitar o processo de ensino aprendizagem de Química (Leite, 2019).

Os recursos didáticos digitais podem ser equipamentos, objetos, instrumentos e materiais que são utilizados no ensino de algum conteúdo para ajudar na transferência de situações, de experiências, de sons, de imagens e fatos. Possuem

a característica de serem reutilizados por outros professores para ajudar na construção do conhecimento (Leite, 2019).

As TDIC colaboram também na diversidade de dispositivos que podem ser utilizados como recursos didáticos. Silva, Silva e Silva (2015) construíram um aplicativo de celular com o intuito de proporcionar o estudo dos materiais básicos de laboratório e, para avaliar sua utilização, quatro professores de escolas públicas da cidade de Esperança, Paraíba responderam a questionários abertos. Os professores consideraram que o aplicativo foi uma ferramenta que auxiliou nas aulas de Química, principalmente quando não tem laboratório na escola, e contribuiu para que os alunos prestassem mais atenção na aula.

O conceito de *Mobile learning*, (em português, Aprendizagem Móvel) está relacionado à mobilidade de aprender de modo que os estudantes possam participar das atividades educacionais sem que haja restrição em relação ao espaço físico. Essa aprendizagem pode ocorrer a partir de livros, lugares, pessoas e também de recursos eletrônicos, ou seja, está relacionada à mobilidade. Com a introdução dos recursos digitais, aumentou-se mais ainda as possibilidades do *mobile learning*, já que os *notebooks*, *tablets*, celulares e *smartphones* cabem na palma da mão e no bolso e, por serem de fácil portabilidade, podem ser carregados com relativa facilidade. Ressalta-se, ainda, que alguns desses recursos geralmente são mais baratos que computadores de mesa, alguns celulares e *smartphones*, por exemplo. E, quando esses recursos digitais são conectados à *internet* permitem justamente que as atividades de aprendizagem possam ser coordenadas de diferentes locais (Kukulska-Hulme; Traxler, 2005).

A aprendizagem móvel apresenta algumas características que levaram à sua definição, dentre elas: ser pessoal, portátil, contextual, espontânea, ubíqua, pervasiva e amplamente espalhada, com a vantagem de ser usada em diferentes locais, apresenta vantagem econômica e pode ajudar até mesmo no aprendizado *online* ou a distância (Kukulska-Hulme; Traxler, 2005).

Deve-se considerar, ainda, que os próprios dispositivos móveis estão evoluindo, logo o *mobile learning* também evolui com eles. Ou seja, a evolução do *mobile learning* acompanha o próprio desenvolvimento dos dispositivos móveis. Moura (2012) traz autores e discute que a origem do termo de *mobile learning* iniciou-se como uma vertente do *eletronic-learning*, aprendizagem eletrônica, só que por meio de dispositivos móveis, enquanto que outra vertente considera que é uma

simplificação equivocada considerar apenas como uma extensão da *e-learning* (Moura, 2012).

De acordo com Quinn (2011), quando se escuta falar em aprendizagem móvel, a percepção inicial contém a ideia do uso de celular até mesmo para estudar cursos completos, contudo esse autor afirma que as aplicações da aprendizagem móvel atuam como suporte ao desempenho da aprendizagem, auxiliando as pessoas naquele momento. E de modo geral, o uso da aprendizagem móvel é relativamente curto, já que se usa para encontrar e acessar informações rápidas e específicas, embora os dispositivos móveis possam ser utilizados várias vezes ao dia, por outro lado, computadores de mesa costumam ser usados apenas algumas vezes, mas por períodos longos (Quinn, 2011).

Antes de falar sobre a aprendizagem móvel, Quinn (2011) argumenta que, anteriormente à aprendizagem formal que ocorre na escola, aprendemos com base em sete palavras que iniciam com C (em inglês): *chose*, *commit*, *create*, *crash*, *converse*, *copy* e *collaborate*. Inicia-se escolhendo (*chose*) o que é importante para nós, depois comprometemo-nos (*commit*) com isso, criamos (*create*) uma performance, uma forma de agir ou produto sobre o que se está aprendendo, falhamos (*crash*) em algum momento no processo, conversamos (*converse*) com outras pessoas para nos ajudar a entender, observamos o trabalho dos outros e como agem para copiarmos (*copy*) e nos modelarmos a partir disso e, por fim, colaboramos (*collaborate*) uns com os outros. Nesse contexto, o autor afirma que:

o fracasso é uma parte importante do aprendizado, e o aprendizado social não deve ser apenas aceito, mas também incentivado: copiar não é ruim, conversar juntos não é errado e colaborar é algo desejável. (Quinn, 2011, p.24).

O uso de aplicativos para dispositivos, ao buscar auxiliar no processo de ensino-aprendizagem, também percorre parte desse caminho, quando estamos aprendendo a utilizá-lo, performamos de determinado modo, às vezes erramos algo em seu uso, pedimos ajuda aos que já sabem usar, observamos como se usa e, depois de entender seu funcionamento, podemos utilizar para estudar algum conteúdo ou, até mesmo, auxiliar os pares em sala de aula a utilizar, potencializando assim sua compreensão. Esses aplicativos podem ser usados para criar, analisar, avaliar e entender conteúdos de diferentes disciplinas.

Uma das abordagens que existe na *mobile learning* pelos políticos e pelos gestores da educação da área da tecnologia é aquela de um dispositivo móvel por

discente, de modo a proporcionar aos alunos a distribuição desses aparelhos. Outro contexto, traz o conceito de *Bring Your Own Device* (BYOD) o qual tem a perspectiva de utilizar as próprias tecnologias heterogêneas dos alunos, principalmente os *smarthphones* (Vieira; Conforto, 2015).

Esse conceito BYOD parece se adequar bem à diversidade de celulares que os alunos possuem, tanto em modelos e marcas quanto em sistemas operacionais. Apesar dessa heterogeneidade de celulares, as lojas dos dispositivos possibilitam instalar aplicativos que podem ser utilizados como ferramentas que atuam como recursos didáticos e dá maior possibilidade de seu uso. Assim, todos podem participar utilizando seus próprios dispositivos, independentemente do tipo de celular e, se a instituição de ensino não tiver aparelhos para cada aluno individualmente, que é a realidade de muitas escolas, cada um utiliza seu celular.

A possibilidade de os alunos usarem seus próprios celulares se deve à redução dos custos de equipamentos tecnológicos no século XXI. Isso criou um novo cenário educacional, ampliando o uso de tecnologias além dos laboratórios de informática, com recursos como *notebooks*, celulares e *tablets* (Vieira; Conforto, 2015). O uso desses dispositivos permitiu também a possibilidade de diferentes recursos didáticos a serem trabalhados em sala de aula.

Para entender melhor como evoluiu a utilização de diferentes RDDs no ensino de Química, Leite (2019) buscou no *Google Classroom* por ensino de Química usando as palavras-chave: computador, vídeo e dispositivos móveis como tecnologias utilizadas com o intervalo de tempo de 1988 até 2017 e escolheu três artigos mais citados para cada uma das três palavras-chave. Com o uso de computador, um dos trabalhos utilizou um ambiente virtual já desenvolvido, no qual se pode construir átomos e moléculas e manipulá-las sem conhecer as leis que as regem.

A partir da palavra-chave vídeo, o autor apresentou, dentre os três artigos, um estudo que utilizou uma produção em vídeo para analisar a narrativa e sugerir formas de transposição da química da atmosfera para a sala de aula. Por fim, no que concerne ao uso de dispositivos móveis para o Ensino de Química, o autor destacou um trabalho com 47 alunos do ensino médio que realizaram pesquisa sobre a temática Calor utilizando o celular, para verificar se os alunos se apropriavam do celular como uma ferramenta de aprendizagem. O autor ressaltou que foi encontrado um número alto de trabalhos com a utilização de dispositivos

móveis, e os resultados permitiram inferir que estes possuem uma área extensa ainda para contribuir com o processo de ensino-aprendizagem com o professor atuando para que haja mudanças.

Para além de recursos didáticos em sala, um dos setores sociais em que a tecnologia também ganha espaço é nos outros espaços da escola, só que com o objetivo de integração das pessoas que estão distantes da instituição de educação, e também para a formação de quem trabalha na área da educação (Soares; Colares, 2020).

Nesse aspecto, as TDIC também tiveram participação na educação durante o período de pandemia de Covid-19 causada pelo vírus SARS-Cov-2. Com a suspensão das aulas presenciais para evitar o contágio pela doença, as TDIC atuaram como auxiliares no desenvolvimento de atividades educacionais, a fim de que não houvesse tanto atraso, haja vista que algumas instituições de ensino superior paralisaram as aulas e voltaram apenas após a redução do contágio, após as vacinas.

Um dos estudos que mostrou as tecnologias digitais na pandemia foi o trabalho de Soares e Colares, em 2020, os autores procuraram entender sobre a crise educacional ocasionada pela pandemia, quais foram seus impactos nas instituições de ensino. Ademais, empenharam-se em sistematizar as ações realizadas em relação às TDIC e descreveram uma experiência real sobre o uso das TDIC desenvolvida por uma Instituição de Ensino Superior da Amazônia.

Durante a vivência da pandemia, foram necessárias novas estratégias na área da educação, com as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação, importantes na aquisição e na socialização de conhecimento e até mesmo tendo assumindo um papel temporário de espaço físico da sala de aula. Essa foi uma forma de dar continuação aos processos educacionais durante o isolamento social demandado pela Covid-19 de modo a evitar atrasos ou a paralisação total das aulas. Nesse contexto, foi um instrumento que ajudou, conforme afirmam Soares e Colares (2020):

as TICs dotam-se de enorme eficiência, como um instrumento eficaz na educação, tornando a *Internet*, e a rede de conhecimentos existentes nela, uma verdadeira sala de aula, ainda que virtual, interligando sujeitos diversos, situados em espaços geográficos distintos, embora saibamos que essa utilização é limitada, pois, as pessoas, sobretudo as que trabalham de forma presencial na área da educação, têm seus limites, uma vez que não foram capacitadas para tal. (Soares; Colares, 2020, p.29)

Em contrapartida, nem todos puderam ter acesso ao uso dessas tecnologias, porque não é a totalidade da população brasileira que possuía celulares ou computadores com *internet*, como foi apresentado pela Cetic.br (2021), 81% da população foi usuária da *internet* em 2020. Não apenas em relação aos alunos possuírem ou não acesso à *internet*, houve a questão do despreparo dos professores quanto à utilização das ferramentas para aulas síncronas, para disponibilizar atividades, dentre outros. Isso vem ao encontro também ao que foi mencionado anteriormente, não são todos professores que tiveram capacitação e condições de trabalho para se familiarizarem e utilizarem as TIC, seja no ensino presencial ou no ensino mediado por tecnologias durante a pandemia (Cetic.br, 2021).

Não obstante, durante a pandemia, o uso de ferramentas como o *Zoom*, *Skype* e *Hangouts* nas aulas terem proporcionado a interação em tempo real entre professores e alunos, ainda se observou o desnivelamento quanto à usabilidade das ferramentas tecnológicas, principalmente ao que se refere às dificuldades que as pessoas apresentam em manusear essas tecnologias (Soares; Colares, 2020). Apesar disso, na pandemia, muitos aprenderam a utilizar as tecnologias, por essa ter sido a forma estabelecida por algumas instituições de ensino para a continuidade das aulas.

Um desses casos é o da Universidade Federal do Oeste do Pará em Santarém no Estado do Pará, o grupo de estudos e de pesquisa intitulado História, Sociedade e Educação no Brasil (HISTEDBR), que dentre as atividades desenvolvidas realiza uma atividade chamada de “Quarta com Ciência” com discussões de obras selecionadas para a reflexão sobre Educação e o contexto da Amazônia e do Brasil, continuou as atividades com o uso dos recursos digitais por meio de *lives* (transmissões ao vivo) no *Instagram* (Soares; Colares, 2020).

Com as transmissões ao vivo, o grupo de estudos conseguiu um bom retorno dos participantes, incluindo aqueles que não poderiam comparecer presencialmente à universidade. As *lives* foram um desafio tanto para professores quanto para estudantes em termos de usabilidade desses recursos, como as transmissões pelo *Instagram*, proporcionando momentos de aprendizado e desenvolvimento dos processos formativos. E no final, a experiência demonstrou a contribuição das tecnologias durante o período pandêmico, colaborando para o fortalecimento da educação pública de qualidade e acessível (Soares; Colares, 2020).

Além de ter auxiliado durante o período de emergência sanitária da Covid-19, existem muitos trabalhos anteriores sobre o uso de tecnologias na área de pesquisa em Ensino de Ciências, principalmente na área de química. A visualização é um dos assuntos recorrentemente mais estudados quanto ao uso das tecnologias. Teruya e colaboradores (2013) identificaram aumento de estudos de 2001 a 2010 nos estudos da área de ensino que Química que abordam esse tema. Os autores selecionaram 171 artigos de diferentes periódicos da área educacional publicados nesse período, que continham as palavras-chave visualização, habilidades visuoespaciais e literacia visual (Teruya *et al.*, 2013).

Esses artigos foram classificados em seis categorias: país de origem do autor principal, tipo de artigo, conceitos químicos, metodologia usada no contexto educacional, metodologia de pesquisa educacional e recurso didático. Os conceitos mais citados foram organizados em sete grupos: estrutura da matéria, propriedades moleculares, bioquímica, físico-química, química geral, técnicas de laboratório e outros, que englobaram todos os demais conceitos menos citados (Teruya *et al.*, 2013).

A partir dos resultados, os autores verificaram que, dos artigos analisados, a maioria das publicações na temática de visualização no ensino de Química é dos Estados Unidos com 78 artigos, em seguida, o Brasil com 17 publicações, Israel com 9, Reino Unido com 8 e Austrália, 7 artigos, sendo aqueles com idioma na língua inglesa os que mais publicam. Quanto à publicação em relação ao tipo de artigo, os maiores números estão relacionados aos artigos sobre recursos didáticos e sobre metodologias de ensino. Os três conteúdos mais abordados no que concerne à temática de visualização no Ensino de Química foram: estrutura da matéria, propriedades moleculares e bioquímica e o recurso didático mais utilizado foi de natureza interativa e incluiu *softwares* computacionais em que os usuários puderam interagir com a informação (Teruya *et al.*, 2013).

Esses três conteúdos mais citados são os que apresentam uma característica de serem abstratos e, possivelmente, por esse motivo tenham sido para os quais houve mais artigos com aplicação das tecnologias para visualização. A estrutura da matéria trata de partículas, que compõem o átomo, e o átomo já é algo que não conseguimos observar macroscopicamente no dia a dia. O conceito de átomo é um conceito que exige abstração para seu entendimento e, para entender o conteúdo de propriedades moleculares, que dentre outros inclui as interações intermoleculares,

há dependência também do conceito de ligações entre átomos, da natureza dessas ligações, se essas ligações possuem uma região mais negativa e outra positiva. Do mesmo modo, o conteúdo de bioquímica, em sua teoria, apresenta conceitos abstratos, que também incluem até mesmo interações intermoleculares, quando se fala em enzimas, por exemplo. São conteúdos, portanto, que se tiverem sua representação visual disposta em algum recurso ditático digital permite a visualização de algo que não seria possível sem tal recurso.

Como afirmam Teruya e pesquisadores (2013), mesmo sendo um conceito básico, as dificuldades de ensino referentes à estrutura da matéria aparecem em todos os níveis de aprendizagem, o que poderia explicar o interesse em estudos e muitos trabalhos sobre visualização desses conceitos. Justamente, por esses três conteúdos apresentarem um grau de abstração, acabam sendo objeto de estudo para o uso e desenvolvimento de modelos e ferramentas de visualização de imagens.

No estudo de Malta (2013), o autor discorre sobre as imagens na educação e seu uso para potencializar a explicação de conteúdos, de modo a possibilitar um aprendizado mais lúdico e prazeroso. Na sociedade midiática em que se vive hoje, o conhecimento é transmitido principalmente por imagens e, mesmo anteriormente, as informações eram transmitidas também pelas inscrições em cavernas (Malta, 2013). Essas inscrições eram representações visuais de coisas reais e são consideradas imagens “na medida em que imitam, esquematizando visualmente, as pessoas e os objetos do mundo real.” (Joly, 1996, p.18). Essas figuras, quando desenhadas ou pintadas, são chamados petrogramas, quando desenhadas, gravadas ou entalhadas são chamadas de petroglifos e serviam para a comunicação humana (Joly, 1996). Dentro desse contexto, até mesmo crianças já são expostas a uma série de símbolos, com cartilhas e gibis, por exemplo, entramos em contato com imagens desde muito cedo.

A autora Joly (1996) discute que a palavra imagem possui diversos significados e compreende que ela designa algo que, apesar de nem sempre remeter ao visível, utiliza traços ao visual e que depende da produção ou reconhecimento imaginário ou concreto de alguém, de modo que a imagem seria algo que vem em segundo lugar, algo posterior a um objeto que já existe, portanto é um tipo de representação. Nesse aspecto, a representação visual por meio de imagens de coisas reais é importante até hoje, seja a representação de coisas

macroscópicas ou de coisas microscópicas. Em relação àquilo que é real, mas não se pode ver a olho nu, as representações ajudam a acessar uma visualização baseada em modelos matemáticos.

De tal modo, há a imagética científica, por meio da qual as imagens desenvolvem seu potencial em domínios científicos, desde a medicina até a astronomia, da matemática à meteorologia e em outras áreas como informática, biologia, mecânica nuclear, dentre outros. Na ciência, as imagens atuam como representações de algum fenômeno e são verdadeiras ou reais pois “permitem uma observação mais ou menos direta e mais ou menos sofisticada da realidade e das simulações numéricas” (Joly, 1996, p.24). Dessa forma, as imagens científicas são produzidas a partir de fenômenos físicos e, com essas imagens, tem-se um recurso que ajuda a observar e interpretar esses fenômenos (Joly, 1996).

No que diz respeito aos fenômenos da natureza, os cientistas procuram compreendê-los e entender as causas que levam a determinados efeitos. Esses fenômenos não estão prontos, porque nós, como seres humanos, colocamos nossas ideias ao que é importante em relação à complexidade de determinados fenômenos da natureza. Isso resulta por simplificar o fenômeno da natureza, originando, assim, os fenômenos exemplares, os quais são usados, portanto, na tentativa de compreender os fenômenos da natureza. De tal modo, os fenômenos exemplares possuem simplificações que ajudam na formação de visualizações (percepções visuais) do que ocorreu no nível macroscópico. Essa simplificação com a ajuda de modelos, posteriormente, torna-se mais importante para explicações de fenômenos exemplares em nível microscópico, sendo que o desenvolvimento de modelos e suas representações são importantes também na produção do conhecimento (Gilbert, 2005).

Assim, os modelos podem representar entidades macroscópicas e microscópicas, podem ser desenhos e modelos de objetos vistos com uma existência independente, como um átomo ou uma vidraria de laboratório ou aqueles que são parte de um sistema como uma vidraria, que faz parte de um sistema de equipamentos, ou um átomo, que faz parte da composição de uma molécula. Os modelos também podem ter diferentes tamanhos, o modelo de uma baleia, por exemplo, pode ser menor que a baleia real, também pode representar não apenas objetos, mas abstrações, como linhas que podem representar fluxos de energia e de força, e podem existir modelos até de processos (Gilbert, 2005).

Telescópios e microscópios, por exemplo, são instrumentos de observação por meio dos quais também podem ser registradas imagens. No caso dos telescópios, imagens de coisas infinitamente grandes, como galáxias, são registradas. Quanto aos microscópios, são feitos registros de imagens de fenômenos pequenos, como de moléculas, dependendo do tipo de microscópio. Essas imagens que são geradas podem ajudar a estudar e prever comportamentos de galáxias e corpos celestes que ajudam na pesquisa do universo, podem auxiliar a entender interações entre moléculas e estudar microestruturas. Podem até mesmo servir de modelo para simulações computacionais que geram outras imagens. Nesse sentido, Joly (1996, p.26) assevera que: “As simulações podem ainda servir de razoável substituto para o inobservável”.

Justamente uma das maiores preocupações no ensino de Química é como tornar fenômenos microscópicos visíveis para os alunos, assim, a visualização em Química é muito importante. As autoras Jones e Kelly (2015) tratam o termo visualização com referência a qualquer representação não verbal e essas representações geralmente são visuais, compostas de imagens ou animações, seja em duas ou três dimensões. Contudo, podem se constituir de representações táteis como modelos físicos e representações em áudio. Quando, inicialmente a natureza da matéria era desconhecida para os pesquisadores, símbolos arbitrários eram utilizados para designar elementos químicos (Jones; Kelly, 2015).

Posteriormente, no século XIX, o pesquisador austríaco August Hofmann, que tinha estudado arquitetura, utilizou bolas e bastões para representar estruturas de moléculas em duas dimensões. Mais tarde, van't Hoff e Le Bel utilizaram modelos em que mostravam os ângulos de ligações de moléculas orgânicas. Na década de 1960, modelos de arame barato permitiram que estudantes universitários tivessem seus próprios conjuntos de modelos. Na década de 1980, computadores foram utilizados para possibilitar a visualização de imagens de átomos e moléculas a partir de dados gerados por microscopia de tunelamento por varredura. Essas visualizações geradas a partir de dados experimentais possibilitaram avanços na Química. As autoras também discorrem que, depois da segunda metade do século XX, pesquisadores podiam estudar o sítio ativo de uma enzima a partir de modelos computadorizados (Jones; Kelly, 2015).

Os modelos podem ter diferentes tipos de representação: modo concreto ou material, modo verbal, modo simbólico, modo visual e o modo gestual. O concreto é

feito a partir de materiais resistentes, como modelo físico de bolas e bastões, maquetes de estratos geológicos; modelos com representação verbal descrevem as entidades, por exemplo, descrever as características das bolas e dos bastões, podem também usar analogias como explicando ligações covalentes como compartilhamento de elétrons, podem ser faladas ou escritas essas representações. Já o modo simbólico consiste de fórmulas, símbolos e expressões matemáticas. O modo de representação de modelos visuais, por sua vez, usa gráficos, diagramas, animações e pode ter também representações tridimensionais geradas por computador, consistindo assim de modelos virtuais. E a representação de modelos com representação gestual, inclui o movimento do corpo e partes do corpo (Gilbert, 2005).

No ensino, contudo, alguns modelos moleculares iniciais, que foram feitos à mão, eram difíceis de produzir e transportar para a sala de aula, assim como a geração de imagens em *displays* monocromáticos e animações, que se mostravam desafiadoras na maioria dos computadores da época. No entanto, as autoras Jones e Kelly (2025), a partir de seus estudos e de pesquisadores que utilizaram animações nas aulas de Química para representar e possibilitar aos alunos visualizarem conteúdos químicos, constataram que essas animações auxiliaram os alunos no entendimento dos conceitos químicos trazendo mudanças nesse cenário. Os discentes trouxeram o que visualizaram nas animações nas suas explicações nos momentos de responderem atividades, contudo também retiveram características e concepções equivocadas quando escreveram, os resultados das pesquisadoras também relataram que as animações ajudaram os alunos a se lembrarem do que aprenderam nas animações (Jones; Kelly, 2015).

Uma das possibilidades de utilizar o computador com aplicação para o ensino de Química na visualização é por meio de simulações de práticas de laboratório, dentre outros conceitos. Ayres e Arroio (2009) fizeram uso de uma simulação já previamente pronta no LabVirt (Laboratório Didático Virtual), que é organizado pela Faculdade de Educação Universidade de São Paulo. Para os autores:

O simulador é uma ferramenta interativa, que envolve o aluno, pois o mesmo participa do processo, aprende fazendo. Ele consegue controlar variáveis do sistema em estudo e, com isto, acompanhar e relacionar como se altera o comportamento do modelo em uma série de situações e condições. (Ayres; Arroio, 2009, p. 2446)

A simulação foi acessada a partir do site LabVirt por alunos do primeiro ano de ensino médio, os autores tiveram o objetivo de facilitar a visualização de conceitos que já tinham sido expostos em sala de aula. Como resultado, houve bom engajamento e interesse dos alunos para interagir com a simulação. Depois da utilização da simulação, eles responderam às perguntas abertas de um roteiro, alguns tiveram dificuldade de identificar que as bolinhas das estruturas eram átomos e que seu conjunto eram moléculas, e que uma delas formava a molécula de acetona (propanona). Já com a molécula de água, eles tiveram mais facilidade de compreender que as estruturas eram a representação de moléculas de água, enquanto que, por falta de compreensão, chamaram de bolinhas os átomos da estrutura da acetona. De modo geral, a pesquisa mostrou que os alunos consideraram que, com a simulação, ficou mais fácil de entender sobre as interações intermoleculares (Ayres; Arroio, 2009).

Ainda no contexto de tecnologias, Sant'Anna (2013) e colaboradores, do Instituto Federal do Rio de Janeiro, desenvolveram junto a discentes o projeto BufferLator (<https://bufferlator.netlify.app>). Esse projeto possui um site com uma calculadora interativa no intuito de auxiliar alunos e professores nos cálculos de solução tampão, devido ao fato de estudantes do IFRJ, geralmente, apresentarem uma considerável dificuldade de aprendizado no que concerne a conceitos e contas que estão envolvidos em disciplinas de Química, Biologia e Matemática. E o conceito de solução tampão envolve essas disciplinas (Sant'Anna *et al.*, 2021).

Diante dessa realidade, o BufferLator foi criado para tentar minimizar as deficiências conceituais e deixar o ensino da Química mais atrativo aos alunos e pesquisadores. Em relação aos conceitos, os autores disponibilizaram conteúdos no site apresentados de forma didática, tabelas de pKa, nomenclaturas de soluções tampões, quanto às contas matemáticas, o site apresenta calculadoras que facilitam nas práticas laboratoriais relacionadas à solução tampão. Dentre os cálculos estão o efeito da adição de ácido, efeito da adição de base, força iônica, cálculo de tampão e cálculo de pH. Nesse caso do BufferLator, vê-se que a dificuldade com cálculos foi uma das justificativas para sua criação, além disso, a tecnologia digital atuou como uma ferramenta para facilitar esse contexto (Sant'Anna *et al.*, 2021).

Outro trabalho que também fez uma proposta de aplicação do uso do computador para a visualização no ensino de Química foi o de Arroio, Ferreira e Rezende (2011). Os autores fizeram uso do *software* Arguslab® (Thompson, 2004)

para elaborar uma proposta a fim de estudar e gerar resultados e imagens que pudessem facilitar a compreensão dos mecanismos de reações químicas, entre hálito de alquila primário e base forte. Os potenciais eletrostáticos que o *software* criou mostrou onde acontece o ataque nucleofílico para dar início à reação, a ferramenta também gerou visualizações da orientação espacial dos orbitais, o que pode auxiliar no estudo desses conteúdos.

Os autores afirmaram que o programa computacional Arguslab® (Thompson, 2004) pode ser acessível aos estudantes, além de permitir que interajam com os conceitos de nucleofilicidade e basicidade, e ressaltaram a importância de poder manipular e visualizar representações moleculares no processo de aprendizagem dos alunos. Os pesquisadores esperam que, quando essa proposta for utilizada, os alunos possam ter um incremento em suas capacidades de visualização, contribuindo para que possam transpor os conteúdos (Arroio; Ferreira; Rezende, 2011).

Podem existir diferentes modos para a utilização da palavra visualização. Um deles é aquele em que a palavra é utilizada como verbo, no sentido de visualizar algo e lhe atribuir significado. Nos estudos que usam esse significado, os pesquisadores estudam como as representações visuais se transformam em conhecimento. Já em outro significado, a palavra visualização é usada como nome na forma de um objeto, seja virtual ou material. Os estudos que levam em consideração esse aspecto buscam verificar o efeito que as representações visuais de diferentes tipos de ferramenta causam na aprendizagem (Gilbert; Reiner; Nakhleh, 2008).

É importante mencionar que, não só os computadores com uso de programas computacionais, mas principalmente os *smartphones* estão presentes no cotidiano de muitos alunos e de professores, como já citado. Nesse sentido, os autores Moreno e Heidelmann (2017) selecionaram e descreveram recursos instrucionais que podem ser utilizados nas aulas da disciplina de Química com a utilização do celular. Existem aplicativos para criação de formulários, que permitem questões abertas como o *Google Forms*, *Socrative* e *Survey Monkey*, todos os três disponíveis para dispositivos móveis. Em relação a mapas conceituais, os autores destacaram *GoConqr*, *DroidDia* e *Popplet*, entre os que se destinam-se a jogos e simulações interativas no Ensino de Química, estão o PhET; Banco Internacional de Objetos

Educacionais e o Educaplay para utilização no celular, e são recursos que podem ajudar as demandas dos professores em sala de aula.

O trabalho de Santos, Freitas e Lopes (2020) utilizou uma dessas ferramentas, o PhET, para auxiliar professores de quatro turmas do primeiro do ano do ensino médio integrado ao curso Técnico em Agropecuária do Instituto Federal Farroupilha, no Campus Alegrete. Foi aplicada uma proposta didática para o estudo de cinemática na disciplina de Física com uso da plataforma PhET, mais especificamente a simulação “Movimento de Projétil”, que já estava pronta e disponível no PhET. Inicialmente, os professores disponibilizaram a aula em formato assíncrono e alguns alunos conseguiram realizar a atividade sem explicação prévia. Em seguida, em aula síncrona, os professores explicaram como manipular o experimento virtual e os alunos perguntaram suas dúvidas e dificuldades. Os professores verificaram pelas respostas a um questionário que os alunos tiveram bom entendimento dos conceitos físicos de queda livre e conseguiram manipular a simulação do experimento no PhET (Santos; Freitas; Lopes, 2020).

Com o uso desse laboratório virtual de aprendizagem por meio da simulação de lançamento de projétil, os alunos se mostraram mais motivados e participativos. Contudo, uma das dificuldades relatadas foi a não devolutiva do questionário pelos alunos, o que foi observado desde o início das aulas não presenciais em virtude da pandemia, pois os alunos apresentaram resistência para entrar em uma outra plataforma diferente a fim de enviar as respostas do questionário, já que tinham apenas o celular. Os professores conversaram com os alunos por troca de mensagens e com auxílio de vídeo para que realizassem a atividade e, assim, todos conseguiram concluir a atividade proposta (Santos; Freitas; Lopes, 2020).

Esse caso específico utilizou tecnologias digitais para trabalhar como um recurso didático nas aulas e, ainda, no contexto da pandemia. Observa-se aqui que esses recursos podem auxiliar em situações atípicas, contudo evidencia-se que as tecnologias não são uma solução completa nessas situações, pois também apresentam suas dificuldades. Um aluno que, às vezes, não possua um celular ou possua um celular e não saiba utilizar todas as suas funções, terá dificuldade em acompanhar as aulas, precisando assim de suporte e ajuda do professor, como descreve o trabalho de Santos, Freitas e Lopes (2020) a dificuldade de alguns para entregar a atividade que estava no questionário.

Reconhece-se que esses dispositivos podem se constituir como uma ferramenta que auxilia na visualização de imagens relacionadas a conteúdos e conceitos estudados em sala de aula, no entanto, dependendo do conteúdo, há de se considerar o conceito da Transposição Didática (Silva; Chagas, 2017). Por exemplo, pode-se utilizar as TDIC para estudar conteúdos da estrutura sobre a matéria, o átomo e partículas subatômicas, porém é preciso transpor esses conhecimentos acadêmicos para uma forma mais adequada ao nível de ensino dos estudantes.

Os conhecimentos que são estudados, pesquisados e discutidos em nível acadêmico, por especialistas e pesquisadores da área, antes de serem explicados em sala de aula, precisam passar por uma transposição didática, na qual se busca uma forma mais acessível de ensinar de acordo com o nível de escolaridade do estudante. Por exemplo, a explicação sobre a estrutura da matéria será diferente para alunos do ensino fundamental, do ensino médio e do ensino superior. Há de se transpor esses conteúdos de modo a facilitar sua compreensão em sala de aula (Silva; Chagas, 2017). Dessa forma, faz-se uma adaptação didática, pela qual se traz um saber para ser um conteúdo transposto nas disciplinas a serem estudadas, de modo mais acessível ao estudante.

Assim, para que o ensino de um determinado conhecimento seja possível, os conteúdos, conceitos e os elementos desse conhecimento precisam sofrer algumas adaptações, que irão contribuir para que esses conhecimentos possam ser ensinados. De acordo com a teoria da Transposição Didática, existem três tipos de saber: o Saber Sábio, aquele proveniente de estudos dos pesquisadores e discutidos entre pares e representa um paradigma até que seja refutado, o Saber a Ensinar, que é aquele presente nos currículos escolares e o Saber Ensinado que é aquele levado para a sala de aula e ensinado aos alunos (Chevallard, 1991).

No contexto da Transposição Didática, Silva e Chagas (2017) afirmam que, no Ensino de Ciências, na maior parte das vezes o saber se torna deformado e pode causar modificações epistemológicas, por isso é preciso ter uma reflexão quanto a sua utilização na Educação, de modo a transpor sem modificar o sentido do saber. Esses autores analisaram a transposição didática a partir de um livro de ensino superior para livros didáticos do ensino médio, Química: A Ciência Central dos autores (Brown; Lemay; Bursten, 2009), que já passou por transposição didática, mas que contém o Saber Sábio por ter seguido as seguintes regras da transposição

didática: modernização do saber; atualizar o saber escolar; articular o saber novo com o antigo; transformar um saber em exercícios e problemas e transformar para um conceito mais compreensível para os estudantes do ensino superior.

Os autores Silva e Chagas (2017) verificaram como o conteúdo de números quânticos do livro Química a Ciência Central foi transposto para cinco livros de ensino médio, em relação aos aspectos históricos, à fundamentação conceitual, às ilustrações dos orbitais, às aplicações tecnológicas e sobre a distribuição eletrônica. No livro de ensino superior, há um contexto histórico acerca da evolução dos modelos atômicos, fala-se da equação de Schrödinger e, pelo fato de o conteúdo ser abstrato, o livro também mostra o desenho dos orbitais atômicos *s* (*sharp*), *p* (*principal*) e *d* (*diffuse*). O livro também remete à aplicação tecnológica do conteúdo falando da relação entre o *spin* nuclear e a ressonância magnética e explica também sobre o diagrama da distribuição eletrônica que é originada dos números quânticos, além disso, destaca que a distribuição eletrônica é essencial para o estudo da tabela periódica. Sendo assim, é um importante saber a ser ensinado, contudo nenhum livro relacionou o diagrama de distribuição eletrônica com os números quânticos.

Os resultados mostraram que três livros relataram o contexto histórico, fundamentação conceitual e ilustrações dos orbitais. Dentre eles, apenas um livro apresentou assunto relacionado às aplicações tecnológicas e todos os cinco livros abordavam o assunto de distribuição eletrônica. Silva e Chagas (2017) verificaram que, na transposição didática, a parte histórica dos números quânticos e a fundamentação conceitual se perderam em alguns livros, a partir do Saber Sábio para o Saber a Ensinar. Dois livros que não fizeram a transposição da parte histórica e da fundamentação conceitual não fizeram também a transposição dos desenhos dos orbitais, essa falta de ilustrações deixa mais difícil a visualização de um conteúdo abstrato (Silva; Chagas, 2017).

Nessa perspectiva, o movimento de simplificação na transposição didática de um conhecimento também pode provocar mudanças no saber, de modo que o conteúdo acaba não se relacionando com outros. Os aspectos históricos e a fundamentação conceitual também são importantes, porque se possibilita ao aluno compreender que existe um processo em todo saber, quando se mostra as evoluções das equações para se chegar a algum melhor resultado de representação dos desenhos dos orbitais, por exemplo.

Fazendo uma analogia com a inclusão da interface GUI e do *mouse* ter facilitado a interação do usuário com o computador e permitido visualizar os zeros e uns de sua linguagem binária, as ferramentas das Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação seriam também uma forma de facilitar o processo de ensino-aprendizado de alguns conteúdos de Química, principalmente aqueles de natureza abstrata. Dessa forma, as simulações computacionais auxiliam no entendimento dos conteúdos e equações da mecânica quântica e da mecânica molecular a fazerem sentido, pois as tornam visíveis, mesmo que de maneira representativa.

A tecnologia digital, que faz uso da simulação computacional no ensino, auxilia em visualizações de estruturas químicas, o que pode facilitar a compreensão de conteúdos abstratos. As simulações permitem que se obtenha uma perspectiva em *3D (three-dimensional)*, ou seja uma visão em três dimensões da forma espacial de microestruturas. Desse modo, os alunos podem ter uma visualização mais perceptível do conceito estudado (Li; Cao; Luo, 2021). Por meio dessas simulações, é possível visualizar representações químicas que podem ser utilizadas para estudar conceitos de ligação química e visualizar o comprimento e ângulo de ligação, orbitais moleculares, dentre outras propriedades.

Nas simulações computacionais, as espécies químicas são apresentadas em diferentes tipos de representações, que foram desenvolvidas pelos químicos para ilustrar estruturas que não podem ser vistas macroscopicamente. De tal modo, desenvolveu-se, na Química, uma linguagem própria para transmitir informações sobre uma molécula. A linguagem química inclui fórmulas, símbolos, estruturas e esquemas baseados em modelos para representar a realidade que não se pode observar. Nessas representações de moléculas, se utiliza principalmente modelos como o de bolas e bastões: para representar a identidade dos átomos e como estes se ligam, respectivamente (Hoffmann; Laszlo, 1991).

Existem outras representações que mostram como a molécula está arranjada em três dimensões. E cabe ressaltar que essas representações visuais também são capazes de mostrar as interações intermoleculares e intramoleculares. As informações moleculares podem, portanto, ser visualizadas por representações bidimensionais em um papel ou na lousa, ou tridimensionalmente em uma tela de algum dispositivo como computador, ou ainda por modelos *3D* feitos à mão (Hoffmann; Laszlo, 1991).

Percebe-se que as simulações computacionais são utilizadas no Ensino de Química em diferentes aplicações tanto no nível de ensino médio, como no nível superior na graduação em Química e pós-graduação em Química, seja como uma ferramenta para facilitar no aprendizado por meio de visualizações, seja pesquisar e contribuir para o desenvolvimento de novos materiais e medicamentos por meio da Química Computacional, usando mecânica molecular ou mecânica quântica. No ensino médio, como já foi apresentado, podem ser utilizadas desde simulações voltadas para o contexto de laboratório de Química até a visualização de conceitos químicos com utilização de simulações prontas ou imagens prontas.

Na perspectiva dos cursos de formação de professores de Química, é importante o estudo sobre estratégias que possibilitem associar a linguagem da Química, bem como a abordagem de conceitos às tecnologias que permitem simulações e visualizações no sentido de contribuir com a Transposição Didática do Saber Sábio ao Saber a Ensinar. Nos cursos de bacharelado em Química, não excetuando também esse uso na licenciatura, simulações computacionais podem abordar o estudo de algum conteúdo específico da disciplina da matriz curricular do curso, como a mecânica molecular e mecânica quântica para calcular propriedades moleculares. Em algumas instituições de ensino superior, existem até as disciplinas de Química Computacional e de Química Quântica. E, tanto na graduação quanto na pós-graduação de Química, existem grupos de pesquisa que utilizam a Química Computacional para estudo e desenvolvimento de fármacos, design de materiais, estudo do comportamento de poluentes, dentre outros. Nas áreas de bioquímica e na área da farmácia, simulações computacionais são bastante utilizadas, exemplos desses grupos de pesquisa incluem o grupo do qual faz parte o presente trabalho.

O presente trabalho faz parte do grupo de pesquisa Modelagem Molecular e Simulação Computacional de Nano-Bio Sistemas do Programa de Pós-graduação em Química da Universidade Federal de Uberlândia e fica localizado no Laboratório de Cristalografia e Química Computacional (LCQC). O grupo é interdisciplinar e busca, por meio de métodos de simulação clássicos e quânticos, o desenvolvimento de novos biossensores com alta especificidade e seletividade. Os primeiros estudos elucidaram o comportamento da quitosana em solução aquosa e propuseram e previram o funcionamento teórico de um nanobiossensor para detecção de herbicidas. A efetividade da construção de um nanobiossensor, ou de um medicamento pode ser testada ou avaliada primeiro *in silico*, ou seja, testada

primeiro por métodos de simulação computacional, para depois se darem os testes em laboratório.

Dentre os projetos de pesquisa do grupo estão: Análise *in silico* de sistemas de detecção de compostos bioquímicos; Uso de modelagem molecular no desenvolvimento de nanobiossensores para detecção de herbicidas e de doenças causadas pelo mosquito *Aedes Aegypti*; Análise *in silico* de sistemas de detecção de compostos bioquímicos; Avaliação computacional do encapsulamento de fármacos utilizando quitosana em diferentes graus de acetilação; Investigação da superfície de potencial eletrostático do vírus da dengue, Chikungunya e Zika na presença de epítopos utilizando cálculos QM/MM e, nos anos recentes, o projeto de desenvolvimento e uso de ferramentas computacionais para o auxílio ao aprendizado de Química no ensino superior que visa à utilização de ferramentas computacionais avançadas de programação para a realização de simulações computacionais na sala de aula, especificamente no presente projeto, com alunos dos cursos de Agronomia e Engenharia Civil.

Outro grupo de pesquisa brasileiro na área de Química Computacional é o Laboratório Computacional de Química Farmacêutica (LCQF), localizado na Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto (FCFRP) da Universidade de São Paulo (USP). Os estudos são voltados para a área da Química Medicinal com uso de Modelagem Molecular e construção de modelos de QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) no planejamento racional de fármacos, de modo a entender os mecanismos de ações dos compostos em diferentes alvos terapêuticos como Alzheimer, câncer, doenças inflamatórias e doenças negligenciadas.

Na UFPA, Universidade Federal do Pará, também existem grupos de pesquisa na área de Química Computacional, dentre eles o de Química Computacional Aplicada, que desenvolve estudos sobre substâncias naturais e sintéticas com potencial biológico. Uma das metodologias do grupo inclui modificações moleculares usando métodos empíricos e computacionais visando à alteração dos parâmetros de solubilidade, estéricos e eletrônicos dos fármacos ou candidatos. Realiza-se, ainda, o planejamento racional de compostos bioativos com uso da relação de estrutura química versus atividade biológica (*Structure-Activity Relationship* - SAR) e relação de estrutura química quantitativa versus atividade biológica (QSAR), química quântica e análise multivariada, triagem virtual e ensaios biológicos.

Há também o Grupo de Química Teórica e Computacional da UFPE, Universidade Federal do Pernambuco, que atua nas áreas de Química Quântica e Clássica de novos materiais e moléculas biológicas, cobrindo escalas eletrônicas, atomísticas e mesoscópicas, é considerado um dos maiores grupos de Química Teórica e Computacional do país.

No contexto desses estudos, para o uso e desenvolvimento de simulações computacionais na área de Química, é esperado dos alunos que desenvolvam e que estudem a área específica da mecânica molecular e da mecânica quântica, por exemplo, bem como suas equações e como utilizá-las e, na formação de professores, especificamente, os discentes podem desenvolver simulações como produtos na forma de recursos didáticos para a área de ensino. A exemplo, a simulação computacional por ancoramento molecular é usada marcadamente em aplicações como ferramenta educacional em cursos da área da saúde.

Dentro desse contexto, no trabalho de Silva e colaboradores (2023), foi utilizada a metodologia computacional de ancoramento molecular para os alunos da disciplina de Química Farmacêutica do curso de Farmácia da Universidade Federal do Amazonas, campus Manaus, aplicarem seus conhecimentos em modelagem estrutural para proporem e defenderem compostos bioativos contra alvos moleculares do vírus SARS-CoV-2. Ao final do estudo, foram apresentados potenciais inibidores do vírus tendo a ferramenta ajudado no processo de ensino de desenvolvimento de medicamentos (Silva *et al.*, 2023). Outro curso de Farmácia da Universidade de Cuiabá, Mato Grosso, utilizou ancoramento molecular como ferramenta computacional associada à Aprendizagem Baseada em Problemas para desenvolver um novo fármaco inibidor da ciclooxigenase-2 (COX-2), sendo um fármaco anti-inflamatório e análogo ao diclofenaco (Araujo *et al.*, 2013).

No ensino médio, as simulações, geralmente, estão prontas em seu estágio final, e o aluno interage com algum botão para mexer alguma vidraria e reagentes na simulação de um laboratório ou alguma molécula, mas não participa da execução da simulação. Dessa forma, o discente interage com o produto final, de modo que auxilia em seu aprendizado, como relatado em Ayres e Arroio (2009), o uso da simulação computacional, a partir do recurso multimídia, “favoreceu a elaboração de conceitos sobre ligações intermoleculares para a maioria dos alunos” (Ayres; Arroio, 2015, p. 175).

Considerando que o uso de simulações da Química Computacional se apresenta como estratégia facilitadora no processo de ensino aprendizagem de alunos no ensino médio ou na graduação, marcadamente nas disciplinas de Química do ensino médio e na graduação em Química, na presente pesquisa, têm-se alguns questionamentos, de forma a ampliar o olhar para as abordagens da disciplina de Química no nível superior: Como as simulações computacionais podem contribuir com o processo de ensino e aprendizagem em disciplinas de química em cursos de graduação em Engenharia Civil e Agronomia? Quais são os impactos do uso de simulações computacionais no processo de ensino e aprendizagem em disciplinas de química no ensino superior com os próprios alunos participando de todo processo de realização da simulação?

Alunos da graduação em Engenharia Civil e Agronomia, da instituição municipal de ensino superior Centro Universitário de Goiatuba, possuem disciplinas de Química na matriz curricular dos cursos. Engenharia Civil com a disciplina de Química Geral (disciplina de 2 créditos em 2021/1) e Agronomia com a disciplina de Química Geral e Analítica (disciplina de 4 créditos que une Química Geral e Analítica) e a disciplina de Química Orgânica (4 créditos). Pensando nessas disciplinas da graduação, questiona-se: como incluir simulações computacionais de modo que os alunos possam realizar a simulação computacional do início ao fim poderia auxiliar no aprendizado de conteúdos de Química?

Parte-se da hipótese de que a utilização das simulações computacionais com os estudantes participando do processo de realização dessas simulações pode contribuir com a apropriação dos conhecimentos químicos relacionados às estruturas atômicas e moleculares. Sendo que, o conhecimento dos principais conceitos da Química Computacional, também permite realizar simulações computacionais e conhecê-las.

1.3 OBJETIVO GERAL

Identificar como a realização de simulações computacionais da Mecânica Quântica e da Mecânica Molecular pelos discentes do ensino superior, em disciplinas de Química, pode contribuir com o processo de ensino e aprendizagem de conceitos químicos.

1.3.1 Objetivos Específicos

- Elaborar roteiros de atividades para os discentes realizarem as etapas das simulações computacionais por meio do aplicativo do *software* WebMO e do *software* AutoDock4 nas aulas de disciplinas de Química do ensino superior;
- Calcular e gerar, por meio dos *softwares* WebMO e Autodock4, imagens que representem as simulações realizadas;
- Investigar como os alunos interagem e sua motivação nas aulas com o uso WebMO e o AutoDock4 e quais suas maiores dificuldades;
- Utilizar o WebMO como ferramenta de ensino e de estudo para os conteúdos de Ligações Químicas, Geometria Molecular, Comprimento e Ângulo de ligação e Orbitais de fronteira: HOMO e LUMO;
- Utilizar o AutoDock4 como ferramenta de ensino e de estudo para conteúdos de Interações Intermoleculares;
- Identificar a compreensão dos estudantes sobre o uso das simulações computacionais a partir das respostas às atividades por meio dos questionários aplicados.

2 PERCURSO METODOLÓGICO

2.1 TIPO DA PESQUISA

Esta pesquisa se configura como uma pesquisa qualitativa, pois busca investigar e documentar o que acontece entre pessoas reais, no mundo real e que vivem de acordo com suas próprias palavras, em relação às suas próprias perspectivas e de seus contextos. Isso ajuda a trazer sentido ao que acontece, pois com a pesquisa qualitativa é possível encontrar padrões e temáticas ao que parece caótico e sem sentido nos dados obtidos, além disso, permite perceber as idiossincrasias, ou seja, as particularidades de muitas situações (Patton, 2015).

Nos estudos com investigação qualitativa, é importante que se tenha uma atenção especial ao contexto em que se encontram os participantes da pesquisa, ou seja, o que está acontecendo ao redor das pessoas e comunidades que estão sendo estudadas. Portanto, os resultados geralmente divergem em comunidades e locais diferentes, já que a cultura, geografia, política, história e instituições regionais influenciam os dados a serem coletados. De modo que cada pesquisa apresenta variação e resultados diferentes de local para local (Patton, 2015).

A investigação qualitativa documenta o que acontece entre pessoas reais no mundo real, a partir de suas próprias palavras, em relação às suas próprias perspectivas e de seus próprios contextos; isto traz sentido às coisas que acontecem, porque encontra padrões e temáticas ao que parece caótico e também idiossincrasias de muitas coisas. (Patton, 2015, p. 52).

No âmbito da pesquisa qualitativa, esta pesquisa configura-se como um estudo de caso. De acordo com Morgado (2022), o estudo de caso é uma estratégia de investigação que busca analisar, descrever e compreender determinados casos individuais e específicos seja de situações de grupos de pessoas ou de pessoas. Posteriormente, pode-se até comparar os resultados com os de outras situações particulares. Morgado (2022) também traz e discute conceitos de outros autores que dizem que um estudo de caso faz um levantamento de dados que são apresentados como uma opinião interpretativa de um caso único de determinada situação e os analisa. Sendo assim, pode ser considerada uma técnica que procura explicar aspectos dessa determinada situação, resultando em informações específicas de uma situação, em uma inovação ou em um acontecimento. Isso é importante, por

exemplo, em contextos educacionais como no processo de avaliação de escolas, pois permite conhecer seu funcionamento.

Nesse sentido, na área da educação dentro de instituições de ensino, seja de nível Básico ou Superior, o estudo de caso pode ajudar a compreender o contexto e a peculiaridade dessas instituições, bem como de seus estudantes. Como cada região do país, cada estado, cada município possui sua própria cultura, suas atividades econômicas e sociais, as pessoas ali inseridas e suas interações sociais refletem um pouco desse cenário, e é diferente em cada local. As Instituições de Ensino Superior se configuram como ambiente formal de ensino que acomoda algumas dessas relações sociais, que também se refletem em sala de aula. Dessa forma, o estudo de caso permite estudar como determinadas propostas didáticas podem ocorrer em diferentes contextos.

O estudo de caso como caminho de pesquisa pode ser usado em diversos casos e, como mencionado, ajuda no conhecimento de fenômenos individuais, organizacionais, sociais, políticos e grupais, dentre outros. E por isso, é um tipo de pesquisa comumente encontrado na psicologia, antropologia, educação, enfermagem, dentre outras áreas. Pode-se também dizer um estudo de caso sobre os determinados setores de uma região ou cidade, como o setor industrial (Yin, 2015).

Os objetos de estudo do estudo de caso podem incluir um grupo de alunos, um grupo de professores, o impacto de uma inovação em uma escola, uma experiência realizada para o desenvolvimento de currículo, entre outras situações e contextos. Desse modo, é um tipo de investigação que pode ajudar não só na autoavaliação de escolas, mas também para oportunizar melhorias nas práticas pedagógicas que ocorrem nas instituições de ensino. Assim, o estudo de caso vem se afirmando no campo da investigação educativa, podendo ser de característica qualitativa ou quantitativa (Stake, 1999; Morgado, 2022).

Por sua vez, McKernan (1999) explica que o estudo de caso procura representar a realidade que os participantes e o investigador vivenciam e experimentam, de modo a orientar-se mais para o processo do que para o produto, buscando mais a compreensão do que a mediação, a previsão e o controle científicos rigorosos dos ambientes, das pessoas estudadas ou das ações. Nessa perspectiva, faz uso de técnicas de recolhimento de dados que incluem questionários, observações, entrevistas, análises de documentos e anotações de

campo para, assim, apropriar-se das inter-relações que ocorrem naquele determinado contexto. Geralmente, é qualitativo, mas o pesquisador precisa saber quantificar grandes quantidades em contexto qualitativo.

Em relação aos instrumentos de coleta de dados, nas pesquisas qualitativas, questionários podem ser utilizados para entender o cenário do estudo. Sendo que as perguntas abertas ou discursivas permitem a possibilidade de ler respostas que não sejam dicotômicas e entender esse contexto dos alunos. Pode-se, então, analisar essas respostas, de modo que a mensagem para a análise pode ser verbal (oral ou escrita), gestual, silenciosa, figurativa, dentre outros, e esse conteúdo expressa significado que irá refletir o contexto em que se encontra o grupo a ser pesquisado (Franco, 2018).

2.2 O CONTEXTO DA PESQUISA

A presente pesquisa foi desenvolvida com estudantes de dois cursos de nível superior a partir da proposta de construção e simulações com o uso de aplicativo e *softwares* específicos da Química Computacional para abordar conceitos químicos. A Química Computacional possui ferramentas que permite calcular propriedades como velocidade e equilíbrio de reações, geometria molecular, interações intermoleculares, reatividade da espécie química, comprimentos e ângulos de ligação, dentre outros. Dentre as metodologias utilizadas na Química Computacional, está o uso da mecânica molecular e dos métodos quânticos semiempíricos (Lewars, 2016).

A tecnologia que faz uso dos métodos quântico semiempírico foi o aplicativo do *software* WebMO e o *software*, que usa mecânica molecular foi o AutoDock4. A fundamentação teórica dessas tecnologias e metodologias de Química Computacional serão descritas na seção 3 (REFERENCIAL TEÓRICO SOBRE OS SOFTWARES UTILIZADOS). Para o uso das simulações computacionais, foram elaborados roteiros para execução de simulações e atividades desenvolvidas no aplicativo WebMO e no *software* AutoDock4. O estudo foi realizado com alunos de graduação em Agronomia e Engenharia Civil de uma Instituição de Ensino Superior (IES) municipal da cidade de Goiatuba-Goiás, que atende cerca de 2800 alunos, de cento e duas (102) cidades do entorno.

O estado de Goiás possui mais de 7,20 milhões de habitantes e está localizado na região Centro-Oeste do Brasil. É no sul do estado que se encontra a cidade de Goiatuba entre o paralelo 17° 46' 48" e os meridianos 49° 10' 00" e 50° 18' 00" de longitude oeste. A cidade de Goiatuba possui população estimada em 35.664 de habitantes, com área territorial de 2.479,591 km² e densidade demográfica de 14,38 hab/km² (IBGE, 2022). A região é conhecida por suas atividades agropecuárias e agroindustriais.

Participaram do estudo 14 alunos do primeiro período do curso de Engenharia Civil e 157 alunos do primeiro e segundo período do curso de Agronomia nas disciplinas de Química Geral, Química Geral e Analítica e Química Orgânica. A pesquisa foi qualitativa, estudo de caso e incluiu a observação das dúvidas e participação dos alunos e das respostas às atividades realizadas. Além disso, foi aplicado um questionário ao término do semestre para os alunos escreverem suas opiniões sobre o uso do aplicativo do *software* WebMO.

O presente trabalho está dividido da seguinte forma: a seção 1 aborda as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação; a seção 2, a presente seção, o percurso metodológico; a seção 3 descreve a fundamentação teórica sobre o aplicativo do *software* WebMO e do *software* AutoDock4; a seção 4 apresenta os resultados e discussões e, por fim, as Considerações Finais e as Referências Bibliográficas.

2.3 O APLICATIVO DO SOFTWARE WEBMO

O WebMO é um *software* (Figura 1) com uma interface *Web-based*, ou seja, um programa computacional *web-based* (desenvolvido *online*), podendo ser executado de um computador com *internet* por meio de um navegador. O WebMO usa, portanto, uma arquitetura cliente-servidor (*server-client*), instalada em um único servidor ou em um *cluster* (série de computadores conectados) e, por isso, seu acesso pode ser feito pelo próprio navegador de *internet* em caso de uso em computadores ou *notebooks* (Polik; Schmidt, 2022).

Figura 1 - Aplicativo do software WebMO.



Fonte: Aplicativo WebMO².

Além do acesso pelo navegador, o WebMO está disponível gratuitamente nas lojas de aplicativo de dispositivos móveis Android e iOS para o desenho de moléculas com até 9 átomos, mais de 9 átomos é necessário adquirir o WebMO Premium. Nesse sentido, o WebMO, busca proporcionar uma acessibilidade para o uso da Química Computacional, seja por especialistas da área ou até mesmo para fins didáticos com estudantes que nunca tiveram contato com a Química Computacional. O que pode auxiliar como uma ferramenta para representações de estruturas que não podem ser vistas macroscopicamente e para estudar conteúdos de Química (Polik; Schmidt, 2022).

No WebMO, os cálculos podem ser submetidos para um dos seguintes programas de Química Quântica: GAMESS (Barca *et al.*, 2020), Gauss (Frisch *et al.*, 2016), MolPro (Werner *et al.*, 2012), Mopac (Stewart, 1990), NWChem (Aprà *et al.*, 2020), Orca (Neese, 2011), PQS (Baker *et al.*, 2012), psi (Smith *et al.*, 2020), Q-Chem (Krylov; Gill 2013), TeraChem (Seritan *et al.*, 2020), Tinker (Rackers *et al.*, 2018), Quantum Espresso (Giannozzi *et al.*, 2020), e VASP (Hafner, 2008). Os cálculos que podem ser feitos, a partir do *software* WebMO, incluem desde a

² <https://play.google.com/store/apps/details?id=net.webmo.android.moledit>

otimização de geometria da molécula, modos vibracionais, propriedades termodinâmicas e o cálculo da energia dos orbitais moleculares. Cabe ressaltar que o *software* WebMO é também um editor 3D para desenhar estruturas moleculares e apresenta opções já pré-definidas para os cálculos dessas estruturas (Polik; Schmidt, 2022).

De forma geral, o WebMO apresenta as seguintes etapas: (1) criar a estrutura de *input*, ou seja, o arquivo de entrada que consiste na estrutura da molécula que foi desenhada (Figura 2); (2) escolher um método computacional para o cálculo; (3) selecionar um tipo de cálculo, como a otimização da geometria ou o cálculo dos orbitais moleculares para a molécula desenhada; (4) enviar e monitorar o processo de cálculo e (5) visualizar os resultados da molécula, por meio de representações 3D e tabelas com os valores de energia calculada. Depois de desenhadas as estruturas e submetidos os cálculos, os resultados podem ser visualizados no aplicativo por meio das representações tridimensionais (Polik; Schmidt, 2022).

Figura 2 - Imagem da etapa 1 do aplicativo do *software* WebMO.



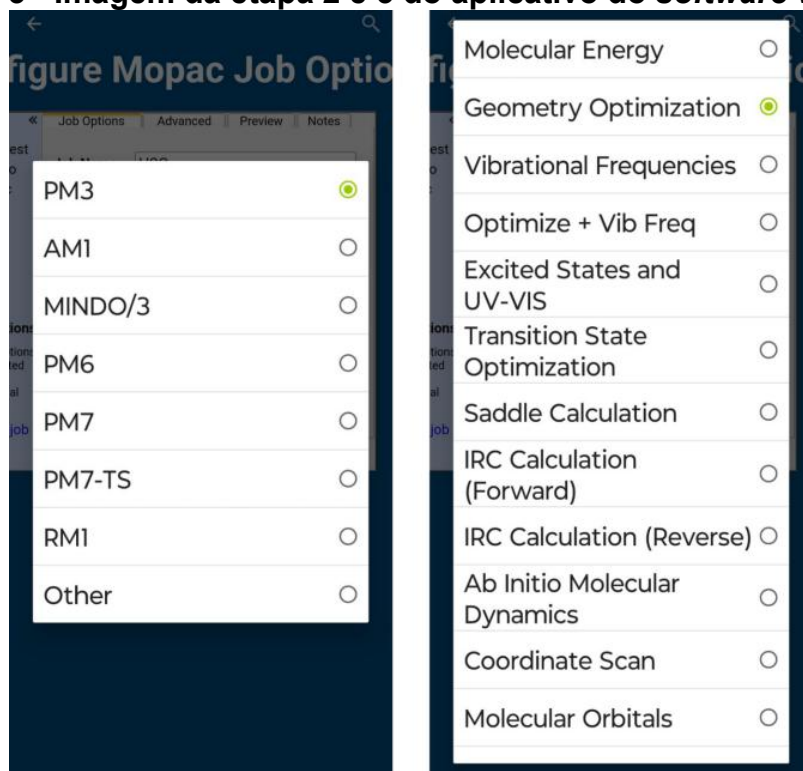
Fonte: Aplicativo WebMO (2024).

A etapa 1, é a etapa na qual se desenhavam as moléculas, para isso deve-se acessar a tabela periódica do WebMO, selecionar um átomo de cada vez e, em seguida, posicioná-los na tela do aplicativo. Com a molécula de água, por exemplo, seleciona-se o átomo de oxigênio e clica-se na tela, aparecerá uma pequena esfera

vermelha que representa o oxigênio. Na sequência, seleciona-se o átomo de hidrogênio e clica-se ao lado esquerdo e ao lado direito do oxigênio (Figura 2), então serão visualizadas duas pequenas esferas brancas que representam o elemento químico hidrogênio. Depois de posicionados os átomos, clica-se em um átomo arrastando-o até o outro para desenhar as ligações.

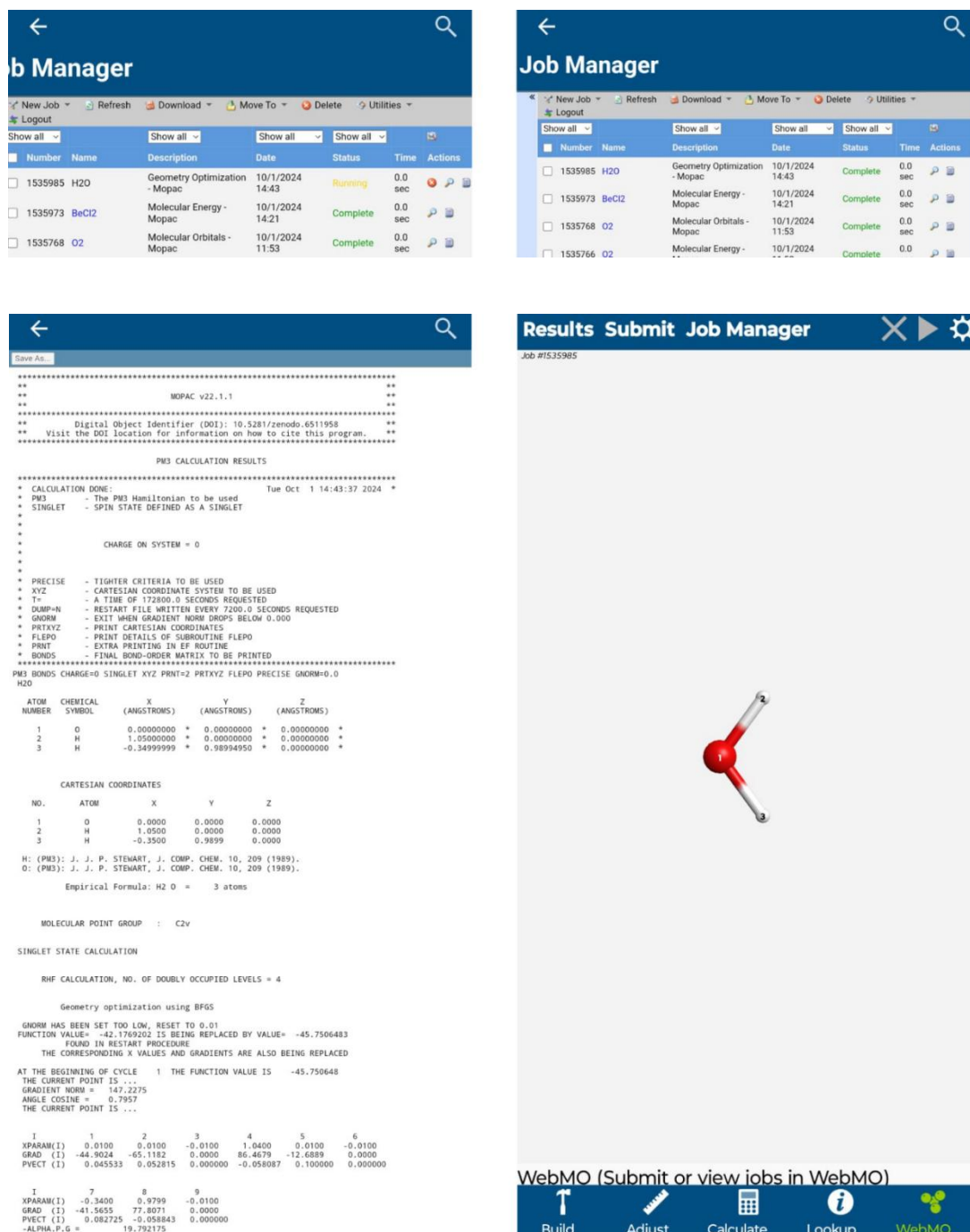
Na etapa 2, Figura 3, escolhe-se o tipo de metodologia semiempírica da Química Computacional (como mencionado acima, será explicado, na seção 3, sobre referencial e fundamentação teórica). Na etapa 3 (Figura 3), há as opções de propriedades moleculares para serem calculadas por esse método, para se fazer a escolha, deve-se clicar em cima da opção desejada. Na etapa 4 (Figura 4), envia-se essas informações para iniciar o cálculo, que pode ser monitorado até que esteja completo e, por fim, na etapa 5, clica-se na lupa para ver os resultados, graficamente ou na forma de texto (Figura 4).

Figura 3 - Imagem da etapa 2 e 3 do aplicativo do *software* WebMO.



Fonte: Aplicativo WebMO (2024).

Figura 4 - Imagem das etapas 4 (acima) e 5 (abaixo) do aplicativo do software WebMO.



Fonte: Aplicativo WebMO (2024).

Depois que o cálculo é finalizado, na tela do WebMO, aparece a palavra *complete*, completo em português (Figura 4), e, ao lado direito em *Actions*, constam dois ícones, um de uma lupa e outro de uma folha branca com escritas. Ao clicar na lupa, pode ser observada a representação visual da molécula após os cálculos, e pode-se ver o desenho dos orbitais, potencial eletrostático, tamanho das ligações e

dos ângulos de ligações. Ao clicar no ícone da folha branca com escritas, abre-se uma janela com os resultados do cálculo em forma de texto, com todas as informações a serem lidas.

2.3.1 O procedimento com o aplicativo do *software* WebMO

O estudo com o uso do aplicativo do *software* WebMO foi realizado no semestre de 2021/1 com 46 alunos da turma de primeiro período do curso de Agronomia (EA) e com 14 alunos da turma de primeiro período de Engenharia Civil (EC) em Goiatuba-GO, na qual a autora deste trabalho é docente. No semestre de 2021/2, participaram 19 alunos do primeiro período de EA, nesse semestre não se formou turma de primeiro período de Engenharia Civil. No semestre de 2023/1, participaram 53 alunos do primeiro período do curso de Agronomia, na disciplina de Química Geral e Analítica. Usou-se a combinação de letras e números para denominação dos alunos, A para alunos da Agronomia e C para alunos da Engenharia Civil, de A1 a A118 para a turma de EA e de C1 a C14 para a turma EC, portanto o total de alunos que participaram das atividades com o WebMO foram 132 alunos.

Na turma de EA, foi ministrada a disciplina de Química Geral e Analítica (os dois nomes juntos, mas consiste em uma disciplina com 4 créditos) e na turma de EC foi ministrada a disciplina de Química Geral (2 créditos). Foi feita essa separação das denominações dos alunos em A (alunos da Agronomia) e C (alunos da Engenharia Civil) pois são duas turmas distintas que tiveram aulas separadas; portanto cada turma com carga horária específica para cada disciplina. A Química Geral e Analítica do curso de EA foi composta de 4 aulas semanais de 50min cada, enquanto a Química Geral do curso de EC, 2 aulas semanais de 50min. As aulas, nos dois cursos, incluíram aulas síncronas (que ocorreram ao vivo simultaneamente com aluno e professor) e assíncronas (não simultaneamente). As aulas que foram ministradas no semestre letivo de 2021/1 (fevereiro a junho) e de 2021/2 (agosto a dezembro), aconteceram por meio do *Google Meet* e *Google Classroom*, devido à pandemia causada pelo coronavírus (SARS-Cov-2). Foram utilizadas 8 aulas na Agronomia, e 4 aulas na Engenharia Civil.

As turmas do primeiro período de EC e EA possuem na ementa das disciplinas conteúdos em comum de Ligações químicas, Geometria molecular,

Polaridade da molécula, Teoria da Ligação de Valência e Teoria do Orbital Molecular (breve introdução), dentro do tópico de Ligações Químicas. Inicialmente, no semestre de 2021/1 e 2021/2, devido à pandemia, os conteúdos foram explicados por meio de aula expositiva-dialogada nas aulas síncronas que ocorreram no *Google Meet*.

Após cada aula, foram colocados no *Google Classroom* listas de exercícios sobre o conteúdo estudado. Os alunos responderam as listas no caderno, tiraram foto e enviaram as respostas dos exercícios. Esses momentos de listas de exercícios foram realizados de forma assíncrona, para que os alunos pudessem responder às atividades. E na aula síncrona seguinte, a professora corrigiu os exercícios com a turma, tirando dúvidas.

Após as aulas expositivas-dialogadas e depois das atividades sobre os conteúdos concluídas no caderno, pediu-se aos alunos, por meio de recado no mural do *Google Classroom*, que baixassem no celular o aplicativo do *software* WebMO para a próxima aula síncrona, pois seriam realizadas atividades utilizando-o. Em seguida, na aula síncrona, por meio do *Google Meet* foi apresentado o aplicativo do WebMO e explicado para que é utilizado, houve esclarecimentos sobre a Química Computacional e as metodologias quântico semiempíricas e como são importantes para as pesquisas, pois podem auxiliar com representações de estruturas químicas e com a previsão de propriedade químicas e físicas. Dentro desse contexto, pediu-se para os estudantes acompanharem com seus celulares a explicação de como utilizá-lo, como desenhar as estruturas e os tipos de cálculos. Na sequência, foi explicada a Atividade 1 a ser entregue, o roteiro da Atividade 1 foi lido e explicado aos alunos e disponibilizado no *Google Classroom*. Dois vídeos sobre a utilização do aplicativo também foram gravados e disponibilizados para os alunos.

A Atividade 1 foi solicitada dia 20 de abril de 2021, com data de entrega em 04 de maio de 2021 para os alunos da turma EC. E para a turma EA foi solicitada dia 23 de abril com data de entrega para o dia 07 de maio de 2021. Após a realização da Atividade 1, a Atividade 2 foi explicada e o roteiro disponibilizado dia 18 de maio de 2021 para a turma de EC e dia 19 de maio de 2021 para a turma de EA, com data de entrega para 01 de junho e 02 de junho de 2021, respectivamente; ou seja, duas semanas para cada atividade. Essas datas foram selecionadas para não atrapalhar os outros conteúdos da ementa da disciplina e devido ao fato de os

alunos trabalharem e não terem tanto tempo disponível para atividades a serem feitas fora do horário das aulas.

Como mencionado, o aplicativo do *software* WebMO foi utilizado nesta pesquisa como ferramenta de ensino-aprendizagem nos conteúdos de Ligações químicas, Geometria molecular e Polaridade da molécula. Na Atividade 1, para a utilização do aplicativo do *software* WebMO, os discentes desenharam as estruturas das seguintes moléculas: CH_3OCH_3 ; CH_3SCH_3 ; H_2O ; H_2S ; H_2Se ; PF_3 ; PCl_3 e ZnCl_2 , que são moléculas com 9 átomos ou menos, quantidade que permite utilizar a versão gratuita do *software*, e os diferentes tipos de moléculas se deve à diferença entre ligações químicas do átomo central.

A molécula de CH_3OCH_3 é a representação de um composto orgânico pertencente à função oxigenada dos éteres e possui nome comum de dimetil éter já que o oxigênio está ligado a dois grupos metil, pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC), recebe o nome de metoximetano e se apresenta como um gás incolor que, em contato com a pele, pode causar queimaduras (NCBI, 2023a). Já a estrutura CH_3SCH_3 , dimetilsulfureto, representa um composto organossulfuroso com nomenclatura de metilsulfanilmetano de acordo com a IUPAC, esta molécula é um líquido sem cor, volátil, tóxico, irritante e corrosivo (NCBI, 2023b), o H_2O é a fórmula química para a molécula de água, também possui as nomenclaturas de óxido e monóxido de diidrogênio. Essa molécula apresenta densidade do sólido menor que a do líquido, alta tensão superficial devido às ligações de hidrogênio, capacidade térmica alta, geometria angular, e ponto de ebulição alto quando comparado a outros átomos do mesmo grupo 16 da tabela periódica (NCBI, 2024a).

O H_2S é um gás incolor com cheiro de ovo podre denominado sulfeto de hidrogênio, que é produzido naturalmente a partir do petróleo, gás natural, gases vulcânicos e fontes termais. A degradação bacteriana de matéria orgânica também produz sulfeto de hidrogênio, animais também produzem H_2S nos resíduos resultantes do metabolismo. Processos industriais como fornos de coque, fábrica de papel, curtume e refinaria de petróleo liberam este gás, que pode ser prejudicial ao meio ambiente (NCBI, 2023c).

A quinta fórmula H_2Se é uma base conjugada do selênio e recebe o nome de seleneto de diidrogênio, um gás inflamável, tóxico, com cheiro parecido ao de rabanete podre (NCBI, 2023d). A sexta estrutura desenhada foi o PF_3 , que é um gás incolor, corrosivo e tóxico chamado comumente de trifluoreto de fósforo e pela

IUPAC de trifluorofosfano, tem uso em aparelhos eletrônicos como geladeira, máquina de lavar, computador, lâmpadas, telefones dentre outros (NCBI, 2023e). Por outro lado, o PCl_3 (tricloreto de fósforo) é um líquido fumegante de incolor a cor amarelada, tem um cheiro irritante e pungente que lembra ao do ácido clorídrico. Apresenta toxicidade por inalação, ingestão e absorção dérmica e irritação, causando queimaduras na pele, olhos e mucosa, geralmente é utilizado para a fabricação de agrotóxicos, surfactantes, corantes e medicamentos (NCBI, 2023f). O ZnCl_2 , última estrutura da atividade, é o dicloreto de zinco, um sólido branco cristalino corrosivo para metais e apresenta-se como um irritante da pele, mucosa e olhos, é usado para preservar madeira, como catalisador e é essencial para sintetizar colesterol, proteínas e gorduras (NCBI, 2023g).

Essas oito moléculas foram desenhadas no aplicativo pelos alunos e submetidas para 6 (seis) diferentes cálculos mecânico-quânticos semiempíricos existentes no WebMO (MNDO, AM1, RM1, PM3, PM6 e PM7), para comparação metodológica. Os alunos realizaram os cálculos para todos esses métodos, com os resultados, preencheram a Tabela 1 da Atividade 1 com as distâncias de ligação e os ângulos de ligação e responderam sobre a geometria molecular das moléculas atribuídas. Os resultados foram colocados na Tabela 1 e comparados com os valores experimentais contidos na mesma tabela.

Roteiro da Atividade 1

1. No aplicativo do *software* WebMO desenhar a estrutura da molécula;
2. Clicar em *Cleanup* (limpar) e, em seguida, em *Comprehensive - Idealized* (visão geral idealizada);
3. Se a geometria ainda não for adequada, clique em *Comprehensive – Mechanics* (visão geral - mecanismo), a estrutura estará em uma conformação adequada para agilizar o tempo de cálculo;
4. Clicar em *WebMO* e em *Submit* (submeter);

Após clicar em *Submit*, irá abrir uma caixa de diálogo para ser preenchida de acordo com as configurações ou setups que são requisitados ou requeridos. Nesta tela, têm-se:

- *Job Name* (nome do trabalho): é a fórmula do composto, ou pode ser modificada para qualquer nome.

- *Calculation* (cálculo): Tipo de cálculo que será realizado. No caso do exemplo, *Geometry Optimization* calcula a estrutura correta do composto e obtém as distâncias e ângulos de ligação do composto. Para obter outras informações (orbitais moleculares, vibração molecular, etc...), basta clicar na seta à direita.
 - *Theory* (teoria): Hamiltoniano a ser utilizado de acordo com o requisitado. Para mudar de hamiltoniano, clique na seta à direita;
 - *Charge* (carga): Carga do composto;
 - *Multiplicity* (multiplicidade): é a multiplicidade (singleto, duplete, tripleto), assim como a carga líquida sobre o sistema. A multiplicidade é o número que expressa o emparelhamento dos elétrons, e refere-se ao spin total da molécula. Assim, para uma molécula de água, onde todos os elétrons encontram-se emparelhados, S (spin total da molécula) = 0 e a multiplicidade M é 1 ($M = 2S+1$): a molécula de água é singleto. Já para o NO, que possui um elétron desemparelhado, $S = \frac{1}{2}$ (S é o valor absoluto do spin do elétron que “sobra”). Logo, sua multiplicidade é 2 (duplete), pois $M = 2(\frac{1}{2}) + 1$. Um caso típico de tripleto é a molécula de oxigênio no estado fundamental, que possui dois elétrons desemparelhados, mas com spins idênticos. Assim, seja $s = +\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$, $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$, e a multiplicidade da molécula será $M = 3$.
5. Em *Calculation*, escolher *Geometry Optimization* (otimização de energia);
 6. Em *Theory*, deve-se escolher o tipo de metodologia de acordo com a tabela.
 7. Depois, clicar em *Submit Job* (submeter o trabalho) no lado esquerdo acima de *Help* (ajuda);
 8. Em seguida, é apresentada a data em que o cálculo foi submetido e o status: *Running* (calculando) e *Complete* (completado) ou se o cálculo falhou;
 9. Posteriormente, clicar no *ícone lupa*;
 10. Clicar em *Adjust* (ajuste) e selecionar os átomos para ver os comprimentos da ligação e os ângulos de ligação (clicar nos ângulos de acordo com a tabela abaixo);
 11. Em seguida anotar os valores na tabela abaixo;
 12. Observação: as etapas anteriores devem ser realizadas para cada uma das moléculas da Tabela 1.

A) Comprimentos e ângulos de ligação

Tabela 1 - Moléculas e informações estruturais obtidas nos cálculos teóricos.

Molécula	Comp. Ligação (Å)	Ângulo Lig. (°)	MNDO		AM1		RM1		PM3		PM6		PM7		Valor Experimental	
			Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)
CH ₃ OCH ₃	C-O	C-O-C													1,416	112,0
CH ₃ SCH ₃	C-S	C-S-C													1,807	99,1
H ₂ O	O-H	H-O-H													0,958	104,5
H ₂ S	H-S	H-S-H													1,336	92,1
H ₂ Se	Se-H	H-Se-H													1,460	91,0
PF ₃	P-F	F-P-F													1,570	97,8
PCl ₃	P-Cl	Cl-P-Cl													2,039	100,3
ZnCl ₂	Zn-Cl	Cl-Zn-Cl													2,062	180,0

Fonte: Os autores.

B) Questões sobre Geometria Molecular:

a) Escreva qual a geometria molecular dos átomos de carbono nas moléculas de: CH₃OCH₃ e CH₃SCH₃;

b) No aplicativo do *software* WebMO, desenhar as estruturas NH₃, BF₃ e XeF₄, clicar em *Cleanup* e, em seguida, em *Comprehensive - Idealized* e, a partir das estruturas formadas, escreva qual geometria e hibridização de cada uma.

Os alunos tiveram duas semanas para fazer a Atividade 1 e, em seguida, tiraram fotos e enviaram no *Classroom*, as atividades foram corrigidas e depois discutidas com as turmas. Nesse momento, houve esclarecimentos sobre as atividades que os alunos já tinham feito no caderno utilizando VSEPR e falou-se sobre como foi fazer a atividade utilizando o WebMO. Foi explicado também que, dependendo da metodologia semiempírica do cálculo, vai dar um resultado melhor para determinada molécula. Na Tabela 1, na última coluna da esquerda para a direita, podem ser vistos os resultados de comprimentos de ligação e ângulos das ligações de cada uma das moléculas, esses valores não foram colocados pelos alunos, mas foram entregues assim. É importante mencionar que são valores experimentais e serviram de parâmetros aos alunos para quando realizaram a

atividade. Os valores calculados pelos discentes por meio do aplicativo deveriam ser similares aos valores experimentais que já estavam na tabela.

Em relação aos diferentes tipos de métodos, explicou-se aos alunos que, os pesquisadores que utilizam a Química Computacional podem escolher o melhor tipo de metodologia semiempírica, analisando os átomos que estão presentes na espécie química. Foi consideravelmente importante os alunos realizarem os cálculos para todas as metodologias, pois se familiarizaram com o uso do WebMO e praticaram como desenhar estruturas moleculares no aplicativo.

Na Atividade 2, após o cálculo da energia dos orbitais moleculares, os alunos observaram o formato dos orbitais HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*: orbital molecular ocupado de mais alta energia) e LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*: orbital molecular não ocupado de mais baixa energia) de cada uma das moléculas e, em seguida, preencheram a Tabela 2 com os valores de energia de ionização. Nesta atividade, foi retomado a explicação da propriedade periódica de energia de ionização, explicou-se que, após a submissão dos cálculos para calcular as energias dos orbitais moleculares no WebMO, pode-se visualizar a representação dos orbitais HOMO e LUMO e também se têm as estimativas dos valores de energia de ionização para os elétrons das moléculas, a partir do valor da energia do orbital molecular HOMO, ou seja, o orbital molecular de maior energia que possua elétron.

Roteiro da Atividade 2

1. No aplicativo do *software* WebMO, desenhar a estrutura da molécula;
2. Clicar em *Cleanup* e, em seguida, em *Comprehensive - Idealized*;
3. Clicar em *WebMO* e em *Submit*;
4. Em *Calculation*, escolher *Molecular Orbitals* (orbitais moleculares);
5. Em *Theory*, escolher a metodologia de acordo com a tabela;
6. Depois, clicar em *Submit Job* no lado esquerdo, acima de *Help*;
7. Após, irá aparecer a data em que o cálculo foi submetido e o status: *Running* e *Complete* ou se o cálculo falhou;
8. Em seguida, clicar no ícone lupa;
9. Clicar em *Results* (resultados);

10. Clicar na aba *Molecular Orbitals*, onde pode-se ver a energia de cada orbital molecular;
11. Clicar nos *ícones das lupas* para visualizar o orbital;
12. Em seguida, anotar o valor da energia do orbital HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*), em português: orbital molecular ocupado de mais alta energia;
13. Em seguida, anotar os valores na tabela abaixo;
14. Realizar esses procedimentos para cada uma das moléculas da Tabela 2.

ENERGIA DE IONIZAÇÃO (I)

Do teorema de Koopmans:

$$I = -\epsilon_{\text{HOMO}}$$

Estimativas de I , a partir das energias dos orbitais, são boas desde que a adição ou remoção de um elétron não altere os orbitais moleculares (OM). Esse critério não pode ser aplicado quando o OM envolvido na ionização consiste basicamente de orbitais *d* (*diffuse*, em português difuso) de elementos de transição. Nesse caso, um outro método é empregado (Mahan; Myers, 2000).

Os erros típicos na estimativa acima, para compostos orgânicos, são de $\pm 0,5$ eV, quando se usa os métodos MNDO, AM1, RM1, PM3, PM6 ou PM7.

Tabela 2 - Energia de Ionização em eV (compute → orbitals).

Molécula	MNDO (eV)	AM1 (eV)	RM1 (eV)	PM7 (eV)	PM6 (eV)	PM7 (eV)	I experimental (eV)
CH ₃ OCH ₃							10,03±0,02
CH ₃ SCH ₃							8,69±0,02
H ₂ O							12,621±0,002
H ₂ S							10,46±0,01
H ₂ Se							9,892±0,05
PF ₃							11,60±0,05

PCl ₃							9,91±0,01
ZnCl ₂							11,802±0,005

Fonte: Os autores.

Após a entrega das respostas às Atividades 1 e 2 e da observação das perguntas e participação com dúvidas de alguns alunos nas aulas síncronas no *Google Meet*, foi respondido o questionário (Quadro 1) na última semana de junho de 2021. Nele, os alunos puderam colocar suas opiniões e percepções sobre as atividades realizadas com o aplicativo do *software* WebMO. Cada item do questionário foi denominado de Questão 1 (Q1), Questão 2 (Q2) até Questão 9 (Q9). O questionário para avaliação de percepção foi aplicado *online* por meio de uma plataforma de formulários eletrônicos, *Google Forms* (A IES de Goiatuba tem acesso aos recursos do *Google for Education*). Os discentes aceitaram participar da pesquisa e assinaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido e não tiveram suas informações pessoais identificadas.

O questionário consistiu em um total de 9 itens, sendo 2 (duas) questões abertas e 7 (sete) questões fechadas. Para as perguntas fechadas, a escala de concordância foi usada com cinco graus, sendo eles: concordo parcialmente; concordo totalmente; não concordo e nem discordo; discordo parcialmente e discordo totalmente. No semestre de 2023/1, o mesmo procedimento foi realizado, no entanto já após o isolamento social ocasionado pela pandemia.

Quadro 1 - Questionário.

Questão 1	<i>Achei muito difícil a utilização do aplicativo do software WebMO</i> (Q1) () concordo parcialmente () concordo totalmente () não concordo e nem discordo () discordo parcialmente () discordo totalmente
Questão 2	<i>Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador</i>

	<i>durante as aulas. (Q2)</i> ☐ concordo parcialmente ☐ concordo totalmente ☐ não concordo e nem discordo ☐ discordo parcialmente ☐ discordo totalmente
Questão 3	<i>Quais foram as dificuldades em utilizar o WebMO? (Q3)</i>
Questão 4	<i>A experiência de usar o aplicativo do software WebMO foi relevante para estudar a disciplina de Química Geral/Química Geral e Analítica. (Q4)</i> ☐ concordo parcialmente ☐ concordo totalmente ☐ não concordo e nem discordo ☐ discordo parcialmente ☐ discordo totalmente
Questão 5	<i>A utilização do WebMO facilitou na compreensão de ligações químicas e geometria molecular. (Q5)</i> ☐ concordo parcialmente ☐ concordo totalmente ☐ não concordo e nem discordo ☐ discordo parcialmente ☐ discordo totalmente
Questão 6	<i>A utilização do WebMO facilitou na compreensão dos conceitos de orbitais HOMO e LUMO. (Q6)</i> ☐ concordo parcialmente ☐ concordo totalmente ☐ não concordo e nem discordo ☐ discordo parcialmente ☐ discordo totalmente
Questão 7	<i>Você já tinha usado algum aplicativo de celular relacionado à disciplina de Química? (Q7).</i> ☐ sim ☐ não
Questão 8	<i>A seguir, deixe seus comentários e sugestões sobre a disciplina,</i>

	<i>elogios ou críticas. Quais suas maiores dificuldades com as aulas não presenciais? Acesso à internet? Uso do celular ou computador? (Q8).</i>
Questão 9	Você concluiu o ensino médio em: (Q9) () Rede pública de ensino () Rede particular de ensino.

Fonte: Os autores.

A Questão 9 foi elaborada e incluída para procurar entender e discutir se existe alguma relação entre os alunos serem egressos de escola particular ou pública com questões socioeconômicas que afetariam no acesso ao computador, ao celular, à *internet*, dentre outros. Essa questão foi incluída no questionário realizado ao final do semestre, haja vista que, no decorrer do semestre, foram recorrentes, durante as aulas não presenciais, relatos de alunos nas aulas síncronas, com dizeres de que não tinham *notebook*, nem computador e *internet* para fazer as atividades. Contudo, ressalta-se aqui que ter ou não vindo de uma escola pública não é fator determinante das condições socioeconômicas, mas, ainda assim, pode ser uma condição que permite fazer algumas considerações e reflexões. Como mostrado na pesquisa da Cetic.br (2023b), há diferença no uso das tecnologias, principalmente computador quando se compara classes A, B, C, D e E, sendo as duas últimas com menor percentual de usuários.

Nesse aspecto, quando se refere à pesquisa em Educação, existe a busca pelo conhecimento como em qualquer outra pesquisa. No entanto, a pesquisa em educação e em ensino também busca aplicar esse conhecimento para entender contexto e procurar possibilidades de propor a solução de problemas. “Espera-se, nesse sentido, que as pesquisas em educação tenham impacto social, oferecendo retorno à comunidade” (Mattar; Ramos, 2021, p.118). O interesse está voltado para entender os problemas que aquele estudo apresenta na busca de conhecê-los e propor soluções (Mattar; Ramos, 2021).

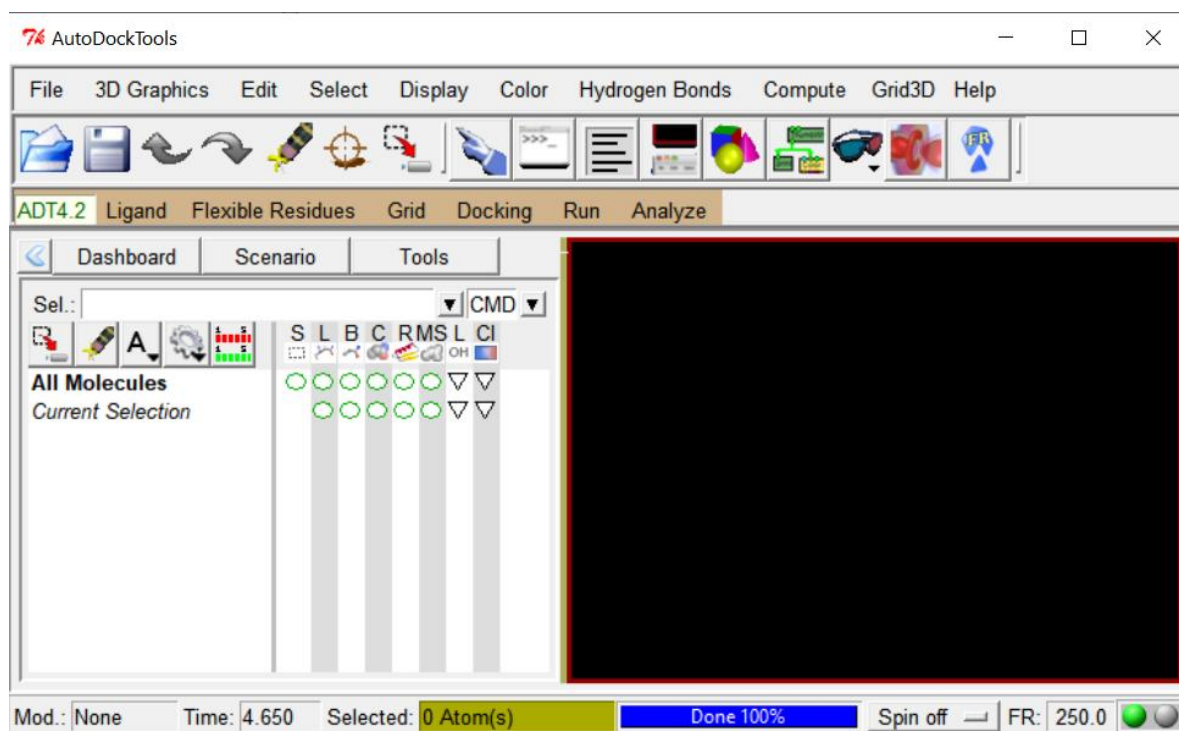
2.4 O ANCORAMENTO MOLECULAR (*MOLECULAR DOCKING*) E PROCEDIMENTO EM SALA DE AULA

Na Química Computacional, as simulações também podem ser concebidas a partir da mecânica molecular, que se baseia em um modelo em que as moléculas

são entendidas como se fossem bolas unidas por molas. As bolas representam os átomos e as molas as ligações químicas entre eles. Uma das vantagens dos cálculos de propriedades moleculares, que envolvem a mecânica molecular, é ser rápida e poder ser realizada em até mesmo computadores que se têm em casa (Lewars, 2016).

Dentro da mecânica molecular, tem-se a metodologia do Ancoramento Molecular ou (*Molecular Docking*), que é uma metodologia da química computacional a qual prevê as melhores conformações e calcula as energias de interação envolvidas em complexos do tipo proteína-ligante (Lewars, 2016). A proteína é denominada de receptor (*P*) no processo do ancoramento e pode ser uma macromolécula como uma enzima, e o ligante (*L*) pode ser uma molécula de herbicida. Para realização do ancoramento molecular como uma ferramenta de ensino de Química no ensino superior, no presente estudo, o *software* utilizado foi o AutoDock4 com a interface AutoDockTools (Figura 5).

Figura 5 - Interface AutoDockTools.

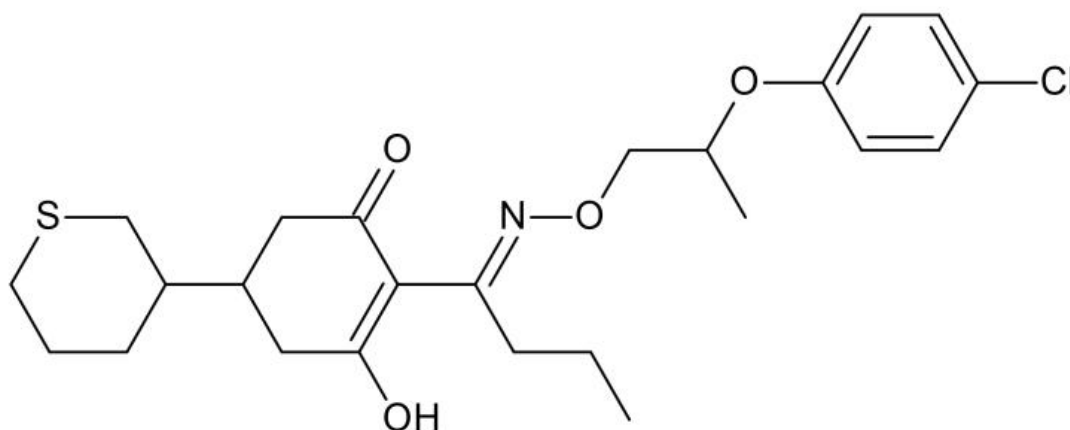


Fonte: AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

A utilização do Ancoramento Molecular foi realizada no semestre 2023/1, com a participação de 39 alunos do segundo período de Agronomia, na disciplina de Química Orgânica, esses estudantes foram denominados de D1 a D39.

O ancoramento molecular foi feito com a estrutura cristalográfica da enzima acetil-coenzima A carboxilase (ACCase), que foi a macromolécula receptora, e dois herbicidas: o clefoxidim (Figura 6), um de seus herbicidas inibidores específicos, que pertence à classe dos ariloxifenoxipropionatos e com o herbicida glifosato, que não é um inibidor específico da ACCase, mas é um inibidor da enzima 5-enolpiruvilshiquimato-3-fosfato sintase (EPSPs). Clefoxidim e glifosato foram, portanto, os ligantes do ancoramento molecular. A escolha da enzima ACCase e dos herbicidas para o ancoramento é devido aos alunos serem discentes de Agronomia, e os herbicidas da ACCase são agrotóxicos muito utilizados para o combate às plantas daninhas na agricultura.

Figura 6 - Estrutura do herbicida clefoxidim (C₂₄H₃₂ClNO₄S).



Fonte: ChemSketch (2019).

A ACCase é uma enzima que converte a molécula de acetil-CoA para a molécula de malonil-CoA, que é um intermediário para a síntese de ácidos graxos. Na célula vegetal, se a enzima ACCase for inibida por um herbicida específico, ela deixa de sintetizar o malonil-CoA, o que leva à morte da planta daninha, já que não vai ocorrer a síntese de ácido graxo (Agostinetto *et al.*, 2002). As classes de herbicidas específicas que inibem a ACCase incluem os ariloxifenoxipropionatos (fops), as ciclohexanodionas (dims) e as fenilpirazolinás (dens), ambos herbicidas que atuam na região meristemática da planta, que é responsável pelo crescimento

vegetal (Silva *et al.*, 2017). Por isso, o ancoramento foi realizado com um herbicida dim, clefoxidim (Figura 6) e um herbicida não específico, o glifosato, de forma a poder fazer comparações com os resultados. As cicloexanodionas, grupo dos dims, apresentam um cicloexano em sua estrutura que possui uma hidroxila e uma ligação dupla na posição 1 e uma carbonila na posição 3, conforme Figura 6 do clefoxidim.

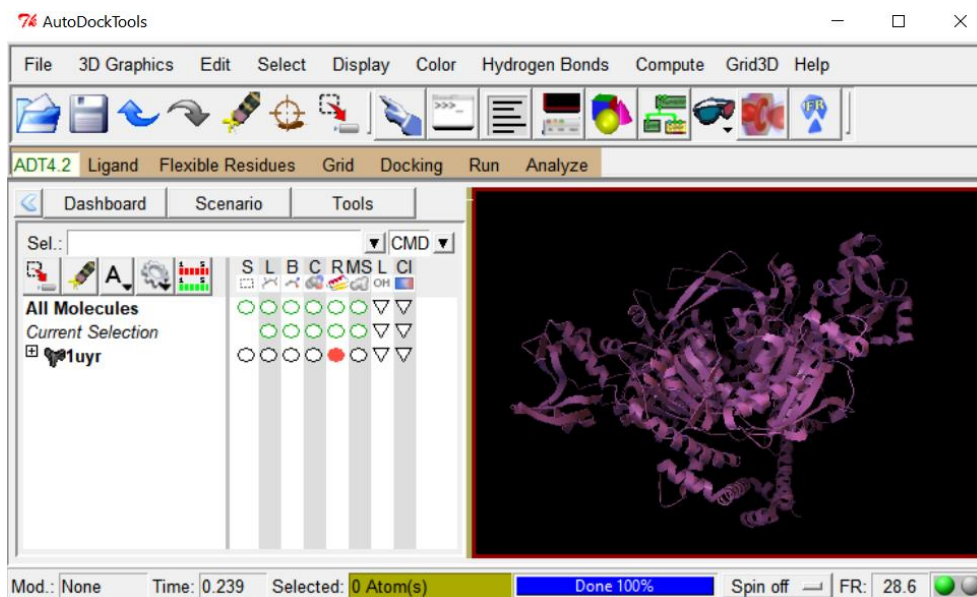
O planejamento de atividade utilizando o ancoramento molecular foi proposto e realizado para fins didáticos no ensino de Química com o objetivo de os alunos realizarem a simulação computacional para visualizarem as estruturas dos herbicidas, desenhá-las, fazer as etapas do ancoramento molecular e verificar as interações intermoleculares existentes entre a enzima ACCase e os herbicidas.

As etapas da utilização do ancoramento molecular com a turma de segundo período de Agronomia começaram a partir da explicação sobre o que é o Ancoramento Molecular (*Molecular Docking*), bem como é o funcionamento do AutoDock4. Inicialmente, foram ministradas aulas expositivas dialogadas sobre a metodologia do ancoramento, seus princípios, sobre a equação de avaliação de energia livre, bem como seus termos, sobre o algoritmo genético Lamarckiano (essa explicação feita aos alunos encontra-se na seção 3, na fundamentação teórica do ancoramento molecular) e como utilizar o programa AutoDock4 (Morris *et al.*, 2009b) com interface AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b) e do passo a passo de como realizar o ancoramento molecular, para que, nas aulas posteriores, os alunos realizassem a simulação. Os conceitos envolvidos no funcionamento do método do ancoramento são explicados de forma mais ampla na seção 3, que versa sobre a fundamentação teórica das tecnologias digitais utilizadas como ferramenta de ensino.

Após a explicação da professora, a atividade do ancoramento molecular começou com a etapa de preparo dos *input* do receptor e dos ligantes. Os *input* são arquivos de entrada para o programa AutoDock4 a fim de que ele possa realizar a simulação de ancoramento. Para o arquivo de entrada do receptor, que foi a enzima ACCase, os alunos acessaram o site do RCSB PDB (*Research Collaboratory for Structural Bioinformatics, Protein Data Bank*), na sequência, pesquisaram a enzima e a estrutura cristalográfica da ACCase foi baixada do sob o código 1UYR, com extensão de arquivo .pdb. Quando aberto em um programa de editor de textos, é possível visualizar as matrizes de átomos com as posições, ligações, ângulos e diedros dos átomos.

Depois de baixarem a estrutura, os alunos abriram (Figura 7), a partir do *notebook*, o arquivo da enzima ACCase no programa de Química Computacional, AutoDock4 (Morris *et al.*, 2009b) com interface AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

Figura 7 - Estrutura da enzima ACCase sob o código 1UYR aberta no AutoDockTools.

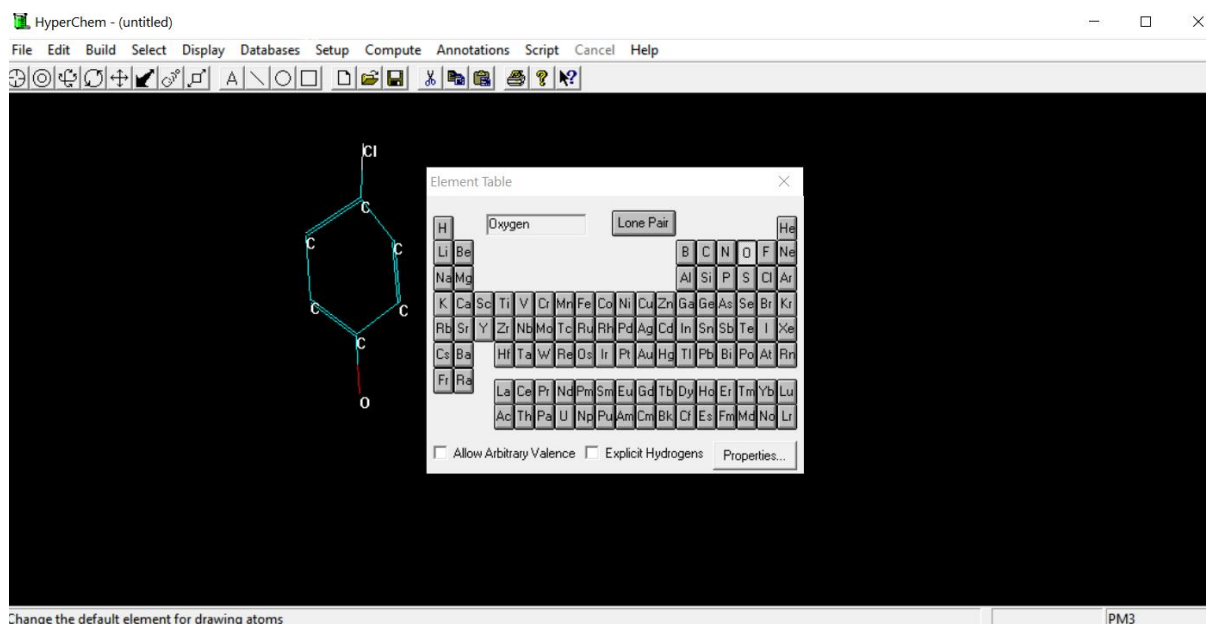


Fonte: AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

Em relação ao *input* do ligante, os alunos do segundo período de Agronomia foram divididos em dois grupos, um grupo desenhou a estrutura do clefoxidim e o outro grupo a estrutura do glifosato. Assim, as estruturas dos herbicidas clefoxidim e glifosato foram desenhadas pelos alunos de cada grupo (Figura 8) no programa HyperChem (Froimowitz, 1993) e tiveram a otimização de geometria realizada, com orientação da professora.

No HyperChem, acessa-se a tabela periódica em *Build* seleciona-se o átomo e clica-se na tela até finalizar o desenho da molécula, para as ligações, clica-se de um átomo até o outro, e para ligações duplas ou triplas, basta clicar sobre a ligação. Em seguida, tanto a enzima ACCase e os dois herbicidas foram tratados no programa AutoDock4, que adicionou os hidrogênios polares, as cargas parciais dos átomos e os tipos dos átomos e gerou o *input* PDBQT, ou seja, um arquivo com as informações de posição dos átomos e dos tipos de átomos para o cálculo do ancoramento molecular ser realizado.

Figura 8 - Processo do desenho da estrutura do herbicida clefoxidim.

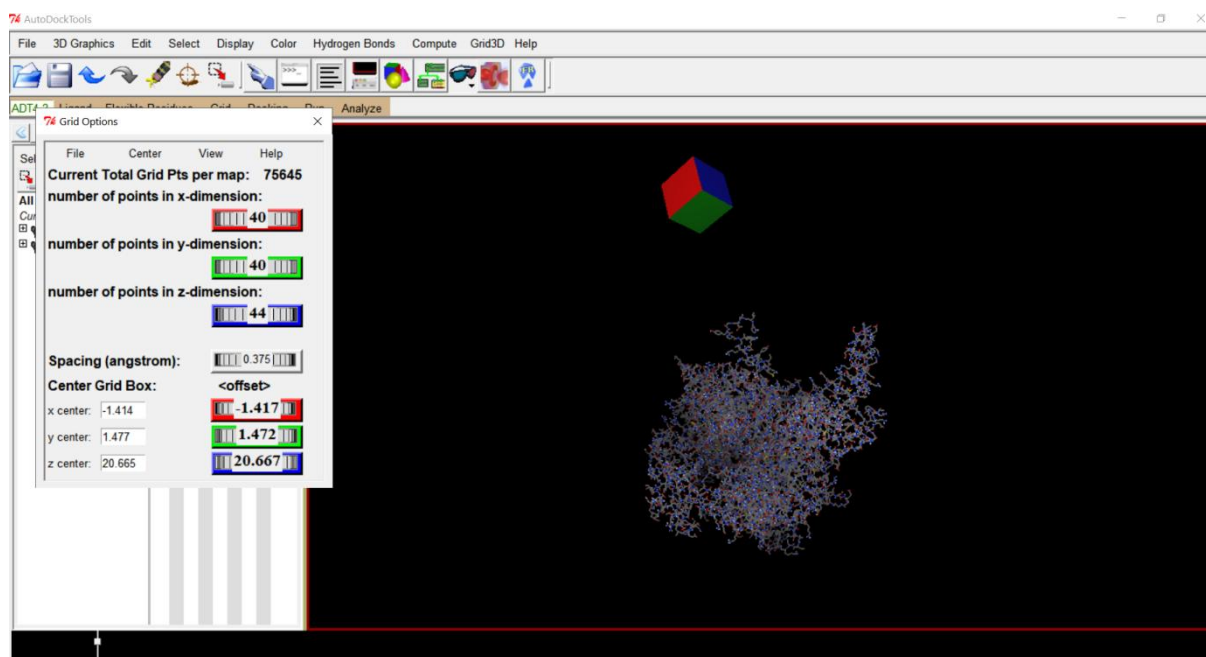


Fonte: HyperChem (Froimowitz, 1993).

Cada grupo realizou um ancoramento molecular no *notebook*. Um grupo com a ACCase e o herbicida clefoxidim (herbicida inibidor da ACCase) e outro grupo com a ACCase e o herbicida glifosato (herbicida inibidor da EPSPs). Após gerar os arquivos de entrada (*inputs*), existe uma caixa de grade no AutoDock4 (Figura 9 e 10) que permite posicionar o local da enzima onde os herbicidas serão colocados para realização dos cálculos de interação com a enzima. Assim, os alunos selecionaram e posicionaram a caixa na região do sítio ativo da enzima ACCase (Figura 11), que é o local onde os herbicidas inibem seu funcionamento.

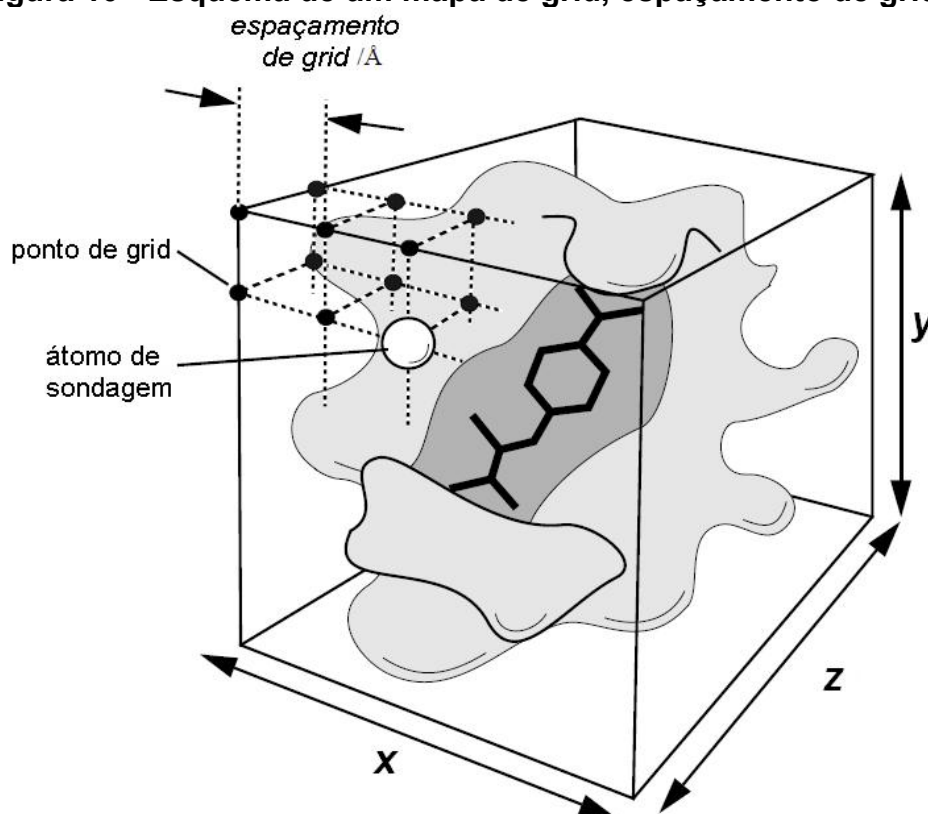
Depois de posicionar a caixa de grade na região do sítio ativo, os dois grupos submeteram a enzima e o herbicida ao cálculo de ancoramento molecular, que inclui primeiro a etapa em que o programa faz o *Run AutoGrid* e o *Run AutoDock* (Figura 12). No primeiro, o programa analisa os tipos de átomos existentes na região da enzima, onde foi posicionada a caixa de grade e analisa os tipos de átomos existentes no herbicida e, a partir daí, faz mapas de interações entre ambos.

Figura 9 - Caixa de grade no AutoDockTools que pode ser movida até a posição do sítio ativo da enzima.



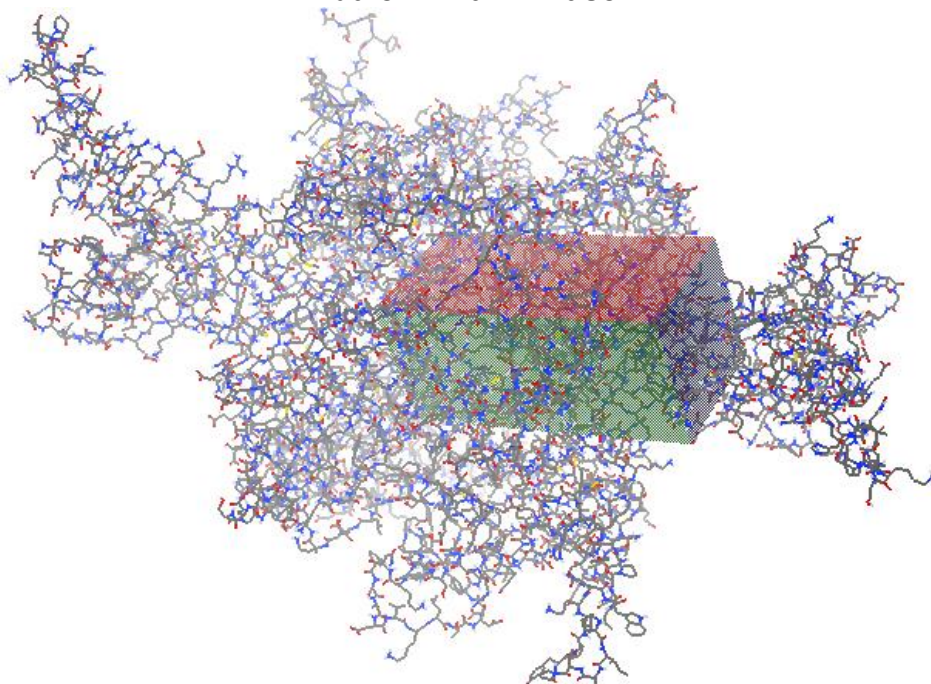
Fonte: AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

Figura 10 - Esquema de um mapa de grid, espaçamento de grid foi de 0,375Å.



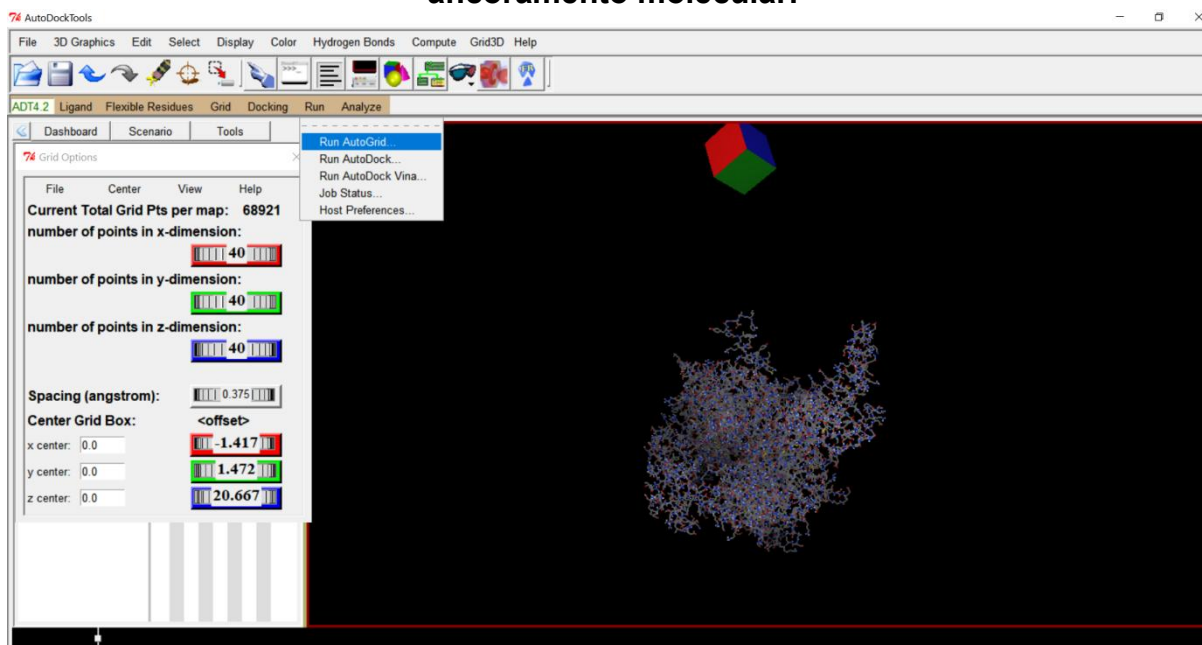
Fonte: (Adaptado de Morris *et al.*, 2001).

Figura 11 - Caixa de grade de 56x56x126 Å, já localizada na região do sítio ativo da enzima ACCase.



Fonte: (Mendes, 2014).

Figura 12 - Run AutoGrid e o Run AutoDock no AutoDockTools para realizar o ancoramento molecular.



Fonte: AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

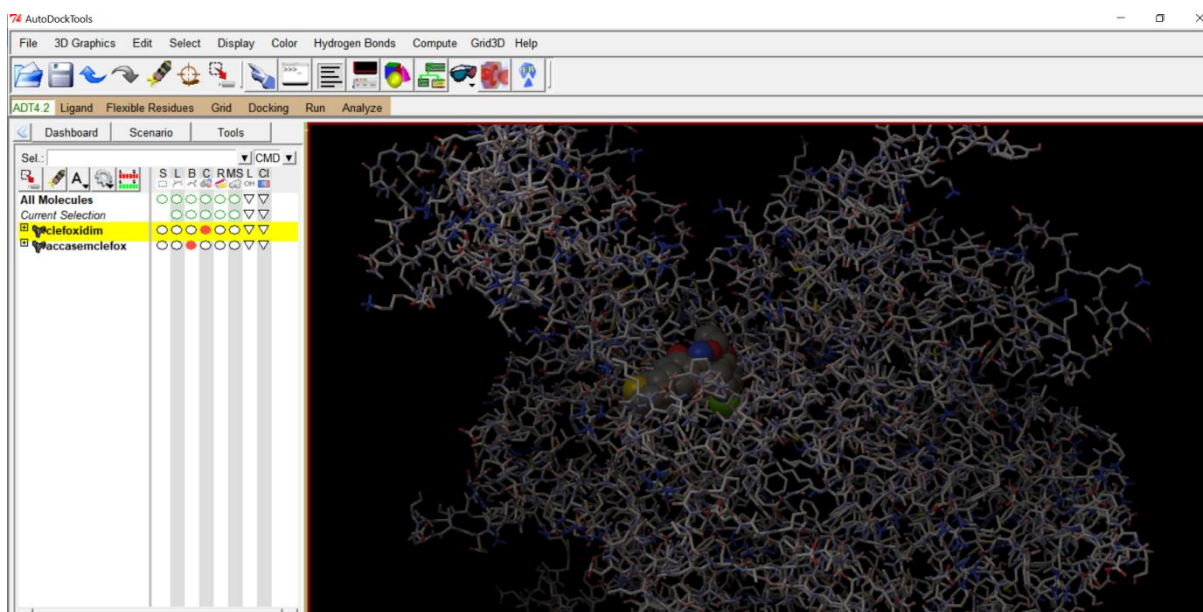
Para avaliações de energia de interação entre os receptores e o ligante, são realizados cálculos dos potenciais de afinidade de cada átomo do ligante em relação aos átomos da região do sítio ativo receptor, neste trabalho, a enzima ACCase. A grade possui um átomo de sondagem denominado no *software* por átomo de sondagem que varre a região selecionada e gera arquivos de afinidade da região selecionada da enzima para cada átomo do ligante. Esses arquivos são chamados mapas de grade.

Após os mapas de grade terem sido gerados, as energias das configurações, que o ligante possui frente ao alvo, foram verificadas por interpolação tri-linear a partir dos valores de afinidade entre os oito pontos de grade ao redor do átomo de sondagem. A interação eletrostática entre ligante e receptor também foi realizada da mesma forma, a partir da interação entre os átomos presentes na seleção da grade tridimensional com os átomos presentes no ligante (Morris *et al.*, 2001).

Depois dos mapas prontos, que são feitos na etapa do *Run AutoGrid*, pode-se dar início à realização do ancoramento molecular (Morris *et al.*, 2001). É no *Run AutoDock*, que se realiza de fato o ancoramento molecular, no qual são verificadas as melhores conformações espaciais em que o herbicida se liga ao sítio ativo. Assim, os alunos clicaram primeiro em *Run AutoGrid* e geraram os mapas de interação e depois clicaram em *Run AutoDock* para calcular as menores energias de interação de cada conformação dos herbicidas.

Depois de finalizados os dois ancoramentos moleculares, por cada grupo, o programa AutoDock4 gerou um arquivo com extensão *.dlg que pode ser visualizado no bloco de notas. Neste arquivo, estavam os valores encontrados para cada uma das dez conformações dos herbicidas ligados ao sítio ativo da enzima. Assim, os alunos ranquearam os valores das energias livres resultantes e colocaram em uma tabela e fizeram uma comparação entre clefoxidim e glifosato, logo após, foi perguntado aos discentes o porquê da diferença nos valores das energias entre os dois herbicidas. Em seguida, os alunos abriram esse arquivo *.dlg no programa AutoDock e visualizaram (Figura 13) as dez conformações de cada herbicida no sítio ativo da enzima ACCase, acompanhando os seus valores de energia livre de interação. A professora observou a participação dos alunos durante todo o processo de simulação computacional por ancoramento molecular, realizada pelos dois grupos.

Figura 13 - Uma das dez conformações do herbicida clefoxidim ancorado no sítio ativo da enzima ACCase, cada conformação, apresenta determinado valor e energia de interação.



Fonte: AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

Na aula seguinte, foram trazidos resultados de valores de energia livre de ligação dos ancoramentos da enzima ACCase feitos com outros herbicidas inibidores específicos e não específicos da enzima ACCase (Mendes, 2014) para comparação e entendimento do porquê da diferença de valores. Essa tabela foi explicada e discutida com os alunos.

Após o programa AutoDock calcular as interações entre a enzima ACCase e os herbicidas, as dez conformações, com menor valor de energia livre resultante do ancoramento molecular, foram analisadas em relação às energias e às interações intermoleculares. Nesse contexto, explicou-se aos alunos que foi o químico alemão Emil Fischer, quem propôs o modelo de chave-fechadura para poder explicar a especificidade da interação que ocorre entre uma enzima e uma molécula presente em um substrato. Nesse modelo, faz-se a analogia dizendo que a enzima é como se fosse a fechadura, o sítio ativo da enzima é como se fosse o buraco da fechadura e o ligante é visto como se fosse a chave. Dependendo da interação que ocorre, a chave pode ativar ou inibir a resposta biológica da enzima (Barreiro; Fraga, 2015).

Posteriormente a essa explicação, foi entregue uma atividade com duas questões discursivas para os alunos responderem de forma manuscrita e entregarem. A correção e discussão da atividade foi feita na aula seguinte.

Atividade do Ancoramento Molecular

“Docking Molecular ou Ancoramento Molecular é um método que prediz orientações e conformações de uma molécula ao interagir com outra (geralmente uma proteína) para formar um complexo energeticamente estável, classificadas por meio de funções matemáticas específicas.”

Disponível em: BARREIRO, Eliezer J.; FRAGA, Carlos Alberto Manssour.
Química Medicinal: as bases moleculares da ação dos fármacos.
3ª ed. Porto Alegre: Artmed Editora, 2015.

Questão 1) De acordo com as aulas e a realização do ancoramento molecular, escreva como o ancoramento molecular pode auxiliar no entendimento da inibição de uma enzima.

Questão 2) Explique, em termos de interações intermoleculares, por que os herbicidas fops e dims apresentam os menores valores de energia livre de ligação com a enzima ACCase e as menores constantes de inibição.

Diferente de questões de múltipla escolha, questões discursivas demandam do aluno a elaboração escrita de sua resposta, o que pode levar mais tempo para organizar suas ideias e expressá-las. Contudo, responder questões discursivas permite ao aluno demonstrar a sua individualidade, possibilita serem originais na hora de escrever, além do exercício de sintetizar, classificar dados e informações e se posicionar diante de algum fato. A partir da leitura das respostas discursivas, o professor pode conhecer essas individualidades dos estudantes e verificar também o que o aluno conseguiu compreender do assunto estudado (Rampazzo; Jesus, 2011).

Depois que entregaram essas duas questões feitas, antes de fazer a correção e discussão na aula seguinte, as respostas dos alunos foram transcritas e extratos das repostas dos discente foram discutidos nos resultados e discussões, sendo verificadas falas dos alunos no sentido de compreensão de conceitos químicos e na visualização dos processos microscópicos.

3 REFERENCIAL TEÓRICO SOBRE OS SOFTWARES UTILIZADOS

3.1 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO APLICATIVO DO SOFTWARE WEBMO

Neste trabalho, o *software* WebMO intermediou cálculos das propriedades das moléculas por meio de metodologias quântico semiempíricas que fazem parte da Química Computacional. As metodologias semiempíricas apresentam a inserção de dados experimentais das moléculas nas equações pertencentes à mecânica quântica. Desse modo, apresenta-se aqui uma breve fundamentação sobre a mecânica quântica e os principais métodos semiempíricos.

A mecânica quântica faz uso da teoria quântica e, por meio de integrais, realiza cálculos para estudar as propriedades de estruturas moleculares. A equação de Schrödinger, independente do tempo, é definida como $\hat{H}\Psi = E_{\text{total}} \Psi$. Sendo $\hat{H}$, nesse contexto, a energia total (E_{total}) do sistema e é dada por cinco termos do operador hamiltoniano $\hat{H}$. Estes termos incluem as contribuições da energia cinética dos elétrons e dos núcleos, a energia de atração dos elétrons com o núcleo, as repulsões entre os elétrons (intereletrônicas) e as repulsões núcleo com núcleo (internuclear), conforme equação 1.

$$\hat{H} = - \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \nabla_n^2 - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (1)$$

Na equação 1, N representa a quantidade de elétrons, M quantidade de núcleos, r é a coordenada dos elétrons, R a coordenada dos núcleos, i e j são elétrons, A e B são núcleos, r_{ij} é a distância entre dois elétrons. R_{AB} é a distância entre dois núcleos, M_A consiste na razão entre a massa do núcleo A e a massa de um elétron. Z_A é o número atômico do núcleo A, e os laplacianos ∇^2 são as derivadas segundas das coordenadas x, y e z de cada partícula (Euqueres, 2009).

Existem aproximações para facilitar a resolução do $\hat{H}$, uma das aproximações é a de Born-Oppenheimer. Nessa aproximação, leva-se em conta que o movimento dos núcleos é bem mais lento se comparado ao movimento dos elétrons, de tal modo que se pode remover do hamiltoniano com as coordenadas dos elétrons, os termos que se referem à energia cinética dos núcleos (Trzesniak, 2002). Essa aproximação ajuda a diminuir algumas variáveis que facilita o cálculo.

Existem metodologias que podem ser utilizadas para a resolução do hamiltoniano, dentre essas estão os métodos semiempíricos. Os cálculos semiempíricos são baseados na equação de Schrödinger e algumas aproximações utilizando dados experimentais são feitas. Para essas aproximações, os *softwares* para cálculos semiempíricos apresentam uma biblioteca de integrais compiladas de dados experimentais de moléculas e átomos. A partir desses dados, o *software* calcula as propriedades desejadas da molécula, sendo que os valores experimentais já devem estar inseridos no *software*. Torna-se importante destacar que se algum método semiempírico não tiver esses valores de dados experimentais para determinados átomos presentes em uma espécie química, os valores das propriedades calculadas não apresentarão bons resultados (Lewars, 2004).

Inicialmente, os métodos semiempíricos foram formulados considerando apenas os elétrons π das moléculas como explícitos, por isso que era aplicado apenas a sistemas conjugados planares, ou seja, os métodos semiempíricos só serviam para calcular propriedades moleculares de espécies químicas com ligações duplas conjugadas e com geometria planar. Mais tarde, começaram a ser elaborados modelos semiempíricos que puderam ser aplicados a moléculas não planares, dentre eles, o modelo EHT (*Extended Huckel Theory*), que considera todos os elétrons de valência. Em seguida, foi incluído, nos modelos semiempíricos, o método NDO (*Neglect of Differential Overlap*) que despreza efeito de recobrimento entre os orbitais nos cálculos. Depois, seguiu-se o método CNDO (*Complete Neglect of Differential Overlap*), que é um método autoconsistente mais simples, usa conjunto de base do tipo Slater para os elétrons e a aproximação ZDO (*Zero Differential Overlap*), essa aproximação despreza integrais de repulsão eletrônica dos orbitais atômicos (Euqueres, 2009).

Dando sequência aos modelos semiempíricos, a aproximação NDDO (*Neglect Diatomic differential overlap*) é outro método que usa uma aproximação que ignora o recobrimento diferencial diatômico, ou seja, apenas os recobrimentos entre orbitais atômicos A e B em átomos diferentes são desprezados em cálculos das integrais. Apesar de facilitar os cálculos, esse método ainda precisa calcular um número grande de integrais de dois centros, o que é complexo e trabalhoso. Para solucionar esse problema do cálculo de muitas integrais, o método INDO (*Intermediate Neglect of Differential Overlap*) ignora também o recobrimento entre orbitais de átomos

diferentes, porém recobrimentos no mesmo átomo não são desprezados (Euqueres, 2009).

As metodologias semiempíricas mais recentes são: o MNDO (*Modified Neglect of Diatomic Overlap*), AM1 (*Austin Model 1*), RM1 (*Recife Model 1*), PM3 (*Parametric Method 3*), PM6 (*Parametric Method 6*) e PM7 (*Parametric Method 7*). O hamiltoniano MNDO é um método autoconsistente e foi parametrizado para estudar caminhos de reação e geometrias moleculares. Nele, os orbitais da camada de valência são representados por combinações lineares de orbitais (LCAO - *Linear Combination of Atomic Orbitals*), contudo o MNDO apresenta falha quando descreve ligações de hidrogênio e acaba maximizando as repulsões entre átomos não ligados. Dessa forma, foi necessário corrigir a repulsão núcleo-núcleo, resultando no método AM1. Outra parametrização para melhorar o método MNDO resultou no método PM3 elaborado por James J. P. Stewart, de modo que PM3 e AM1 só se diferenciam pelo tipo de parametrização e conjunto de parâmetros (Bretanha Neto, 2015).

Já o RM1 foi elaborado por Alfredo Mayall Simas em 2006 e possui uma nova reparametrização do AM1 e parametrização de lantanídeos, esse modelo mostrou valores calculados de potencial de ionização, momentos de dipolo e distância de ligação com melhores resultados (Ramos, 2016). Por sua vez, o método PM6, também desenvolvido por James J. P. Stewart, possui parâmetros diatômicos na equação de repulsão núcleo-núcleo e isso diminuiu erros no cálculo de entalpia de formação na molécula (Ramos, 2016).

Contudo, percebeu-se que o hamiltoniano PM6 apresentou predições erradas em sistemas Si-O-H e também para estruturas que não estavam no banco de dados. Consequentemente, foi publicado o PM7, por James Stewart, o PM7 que possui aperfeiçoamento da descrição das ligações covalentes (Ramos, 2016). Dessa forma, é possível notar que os novos métodos semiempíricos foram elaborados a partir de melhorias e modificações e inclusão de parametrização de outros átomos, com o objetivo de fornecer resultados mais próximos aos dados experimentais, como o cálculo dos comprimentos de ligações químicas, de ângulos de ligações e cálculos de energia de ionização das moléculas. Quanto mais aprimorado e quanto melhores os dados experimentais inseridos nas equações com informações de átomos presentes na espécie química de interesse, melhor os valores dos resultados reproduzidos pelos cálculos quântico semiempíricos.

3.2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO ANCORAMENTO MOLECULAR

O ancoramento molecular é uma metodologia da mecânica molecular que visa prever a interação entre um ligante e um receptor. Essa interação é especialmente focada na região do sítio ativo do receptor, podendo este ser uma proteína, anticorpo, enzima, DNA, RNA, dentre outras macromoléculas. O ancoramento molecular é subdividido em duas etapas: *docking* e *scoring*. O primeiro refere-se a algoritmos que exploram uma superfície de energia para antecipar a conformação e a orientação do ligante em relação ao alvo molecular (receptor). Já o *scoring* concentra-se no desenvolvimento de um modelo que avalia a energia livre de ligação entre o par ligante/receptor, identificando eficientemente o modo de ligação mais favorável. (Magalhães, 2006).

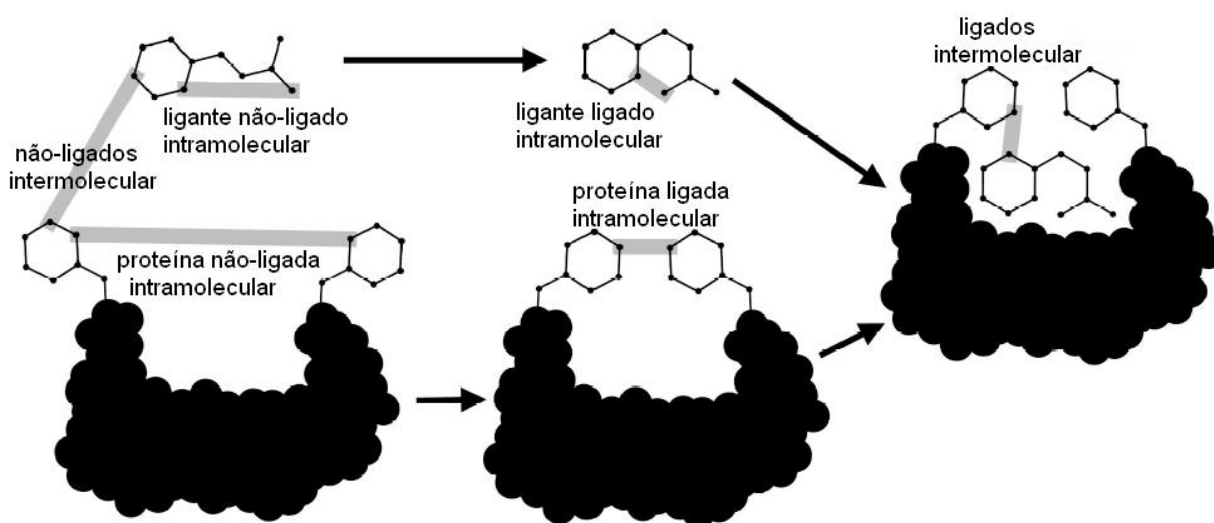
A partir dessas etapas, ocorre a formação do ligante (neste trabalho, o herbicida) complexado com a enzima (neste trabalho, a ACCase). A ligação do herbicida à enzima depende dos valores da entalpia e da entropia, expressas na energia livre de Gibbs, quanto menor o valor da energia melhor é a interação. O cálculo da energia livre é feito no programa AutoDock4 e usa a entalpia e entropia para isso. A entalpia (H) é uma quantidade termodinâmica que é definida pela equação: $H = U + PV$; sendo U a energia do sistema, e P e V são, respectivamente, a pressão e o volume. Um processo que absorve calor para ocorrer apresenta H maior que zero, e àqueles que liberam calor ao ocorrer, possuem H menor que zero. A entropia, que também é uma quantidade da termodinâmica, representada pela letra (S), é comumente descrita como a medida do espalhamento, ou da dispersão da energia de um sistema. Assim, quanto maior a dispersão, maior a entropia, sendo maior o número de estados (W), assim a equação da entropia é definida por $S = k \ln W$, (k é a constante de Boltzmann $1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K) (Chang; Goldsby, 2013).

É importante mencionar que, quanto maior o número de estados disponíveis, maior a entropia, sugerindo que a tendência dos sistemas é ir para um estado mais desordenado, pois a entropia será maior. A segunda lei da termodinâmica explica que a entropia do universo aumenta em um processo espontâneo e permanece invariável em um sistema em equilíbrio, de modo que, para uma reação ocorrer, a entropia do universo precisa ser maior que zero. Cabe salientar que tanto a entalpia e entropia são funções de estado pois dependem apenas do estado inicial e final do sistema (Chang; Goldsby, 2013).

Dessa maneira, a partir da entalpia e da entropia, é possível calcular a energia livre de Gibbs (G), que expressa diretamente a espontaneidade de uma reação ocorrer. G é dada pela equação: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$, sendo todas essas grandezas pertencentes ao sistema. Assim, se ΔG for menor que zero o processo ocorre espontaneamente, não precisando o conhecimento do que ocorre com o restante do universo, o que é diferente da entropia (Chang; Goldsby, 2013).

A formação do complexo ACCase com o herbicida depende das interações intermoleculares (entre as moléculas) e intramoleculares (dentro da molécula) (Figura 14), estas irão fornecer os valores de entalpia, entropia e energia de Gibbs, e quanto menor o valor da variação da energia de Gibbs, mais espontânea a formação do complexo enzima/herbicida, e mais fortes as interações intermoleculares entre enzima herbicida (MORRIS *et al.*, 2009a).

Figura 14 - Representação das interações intra e intermoleculares do receptor e o ligante.



Fonte: (Adaptado de MORRIS *et al.*, 2009a).

O AutoDock4 então calcula as energias livres de ligação (G) entre o herbicida e a enzima, durante simulações do ancoramento molecular. A avaliação da energia da formação do herbicida ligado à enzima ocorre pela análise das interações intramoleculares quando o receptor (enzima) e o ligante (herbicida) estão no estado não ligado e vão para o estado ligado e depois avalia suas interações intermoleculares na formação do complexo receptor-ligante (Morris *et al.*, 2009a). Dessa forma, esses efeitos entálpicos e entrópicos da formação do complexo podem

ser estimados com as equações $\Delta G_{lig} = \Delta H - T\Delta S$ e $\Delta G^{\circ}_{lig} = -RT \ln K_i$, referente à energia de Gibbs (Magalhães, 2006).

A energia livre de ligação é então calculada de acordo com a equação 2:

$$\Delta G = \left(V_{ligados}^{L-L} - V_{n\tilde{a}o\ ligados}^{L-L} \right) + \left(V_{ligados}^{P-P} - V_{n\tilde{a}o\ ligados}^{P-P} \right) + \left(V_{ligados}^{P-L} - V_{n\tilde{a}o\ ligados}^{P-L} + \Delta S_{conf} \right) \quad (2)$$

Sendo que L se refere ao ligante e P ao receptor, ΔS_{conf} se refere à perda da entropia conformacional devido à formação do complexo proteína-ligante. Os seis pares de avaliação de energia potencial (V) incluem interação de van der Waals (*vdw*), ligações de hidrogênio (*hbond*), interações eletrostáticas (*elec*), energia coulombiana, e o último termo é a dessolvatação (*sol*), como mostrado na equação 3 a seguir:

$$V = W_{vdw} \sum_{i,j} \left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right) + W_{hbond} \sum_{i,j} E(t) \left(\frac{C_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{D_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right) + W_{elec} \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{\epsilon(r_{ij}) r_{ij}} + W_{sol} \sum_{(i,j)} (S_i V_j + S_j V_i) e^{(-r_{ij}^2/2\sigma^2)} \quad (3)$$

O primeiro termo para as *vdw* usa potenciais 6/12 de Lennard-Jones para calcular as atrações e repulsões, o segundo termo se refere às ligações de hidrogênio e usa potenciais 10/12, A, B, C e D são as distâncias entre os átomos e, por sua vez, $E(t)$, diz respeito ao ângulo (t) ideal da ligação de hidrogênio (HUEY *et al.*, 2007). Assim, é calculada a energia de ligação entre os complexos formados entre a enzima e o herbicida, aquelas conformações dos herbicidas que apresentam as menores energias são aquelas que mostram as melhores interações intermoleculares.

Além dessas interações de van der Waals, ligação de hidrogênio e interações eletrostáticas serem importantes para calcular a energia livre de Gibbs, o efeito de dessolvatação também afeta a formação do complexo. A dessolvatação neste contexto está relacionada ao efeito hidrofóbico devido às interações hidrofóbicas. O termo ligação hidrofóbica, foi dado por Kauzmann para explicar a tendência de junção de regiões apolares de proteínas em solução aquosa o que tem um papel no enovelamento de proteínas (Meyer; Rosenberg; Israelachvili, 2006). Assim, nessas regiões, as moléculas de água são liberadas para a solução, o que

aumenta a entropia do solvente. Por outro lado, quando se forma o complexo há diminuição na entalpia conformacional, de modo que há maior mobilidade do ligante quando no sítio ativo (Magalhães, 2006).

Depois de calcular as energias livres de Gibbs entre o receptor e o ligante, o Autodock busca os melhores valores de energia, ou seja, as melhores conformações em que o ligante está complexado ao receptor. Para encontrar estes valores o programa utiliza um Algoritmo Genético Lamarckiano (Figura 15), que é um método computacional que se baseia na evolução das espécies de Darwin (Magalhães, 2006).

Figura 15 - Algoritmo genético convencional.

1. Inicialize a população de soluções
2. Avalie os indivíduos da população
- Repita
 3. Selecione indivíduos para a reprodução
 4. Aplique operadores de reprodução
 5. Avalie os indivíduos gerados
 6. Selecione indivíduos para sobreviver
- Até critério de parada satisfeito
7. Fim

Fonte: (Magalhães, 2006, p.60).

Esses algoritmos genéticos são uma técnica da computação evolucionária, nesta um problema a ser solucionado é codificado no *software* de modo que seja representado como se fosse uma “informação genética” e essa informação é submetida ao processo de evolução artificial para atender as condições que irão resolver o problema. A “informação genética” é transportada por uma população de indivíduos que evoluem de acordo com regras e operadores genéticos, como os operadores de mutação e de recombinação. Os indivíduos são, portanto, propostas de soluções para o problema que se quer resolver (Goldbarg; Goldbarg; Luna 2015).

Por meio da avaliação dos indivíduos da população, o processo de reprodução é direcionado a favorecer os indivíduos de melhor adequação, conforme preconiza a evolução darwiniana. Na natureza, recombinações e mutações modificam o material genético dos indivíduos. No contexto computacional, recombinações e mutações são procedimentos heurísticos que visam utilizar as possibilidades combinatórias codificadas nos indivíduos da população trabalhada pelo algoritmo.

Embora simplista do ponto de vista biológico, os algoritmos evolucionários são suficientemente complexos para construir mecanismos adaptativos de busca robustos e eficazes para o fim proposto (Fogel, 1995 apud Goldbarg; Goldbarg; Luna, 2015).

Neste trabalho realizado com os alunos da Agronomia, os indivíduos consistiram em um conjunto de dados que representassem cada conformação estrutural do herbicida no sítio ativo da enzima ACCase. A reprodução dos indivíduos (Figura 15) foi feita por operadores genéticos de recombinação e mutação no indivíduo. Na recombinação, os graus de liberdade torcionais do ligante são trocados para buscar as melhores energias de Gibbs (mais negativas). Enquanto, no operador de mutação, só um grau de liberdade torcional da conformação estrutural do ligante é modificado. Inicialmente, diferentes conformações do ligante compõem a população de soluções; em seguida, realiza-se a avaliação dos indivíduos dessa população de conformações para então escolher as melhores conformações para a etapa 4 na qual os operadores de reprodução são aplicados para gerar novos indivíduos. Na etapa 5, as conformações geradas são analisadas e, na etapa 6, as melhores conformações (menores energias) passam para a próxima reprodução. Quando um conjunto de conformações com as melhores energias de interação é identificado, o cálculo é concluído (Magalhães, 2006).

4 RESULTADOS

4.1 RESULTADOS APÓS USO DO APLICATIVO DO SOFTWARE WEBMO

Nos semestres 2021/1 e 2021/2, após a utilização do aplicativo do *software* WebMO para realizar cálculos quânticos semiempíricos de propriedades moleculares e gerar visualizações, 79 alunos da EA e da EC responderam às Atividades 1 e 2 (dispostas na seção 2) e enviaram suas respostas na plataforma *Google Classroom* para as correções. Acerca da utilização e recepção em relação ao aplicativo, os alunos consideraram que o aplicativo foi muito atrativo ao desenharem as estruturas das moléculas, foram participativos e interessados em aprender a utilizá-lo. Quando se propôs as atividades nesses semestres durante a pandemia, algumas reações dos alunos relatadas nas aulas síncronas, ao abrirem o aplicativo e começarem a desenhar as moléculas em casa, evidenciaram que era muito “*divertido e bom*” poder desenhar as estruturas e cada átomo ter uma cor, bem como poderem clicar na tela para fazerem as ligações químicas, dizendo que consideraram “*diferente e legal poder usar um aplicativo para desenhar*”.

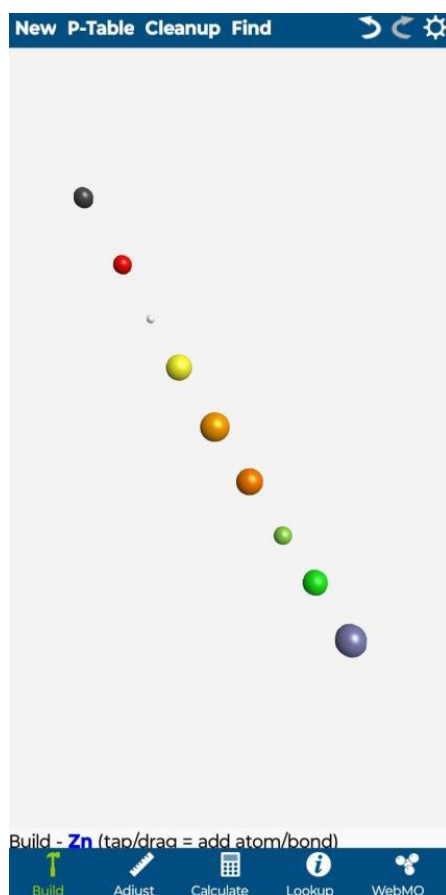
Mcnaught (2011) propôs a utilização do WebMO para estudar o tópico de modelo VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion), ou seja, a teoria de Repulsão dos Pares de Elétrons no Nível de Valência) afirmando a vantagem de ter uma interface acessível tanto para Química introdutória quanto para a mais avançada. Os exercícios propostos aos alunos da graduação em Química foram elaborados para ajudar a verificar a previsibilidade do modelo VSEPR. As atividades foram realizadas em 3 horas, o autor destaca que os alunos ficaram encantados com a geração de imagens bonitas das moléculas, e acharam o *software* útil para testar quantitativamente as previsões qualitativas do VSEPR.

O modelo VSEPR foi desenvolvido por Ronald J. Gillespie, que criou regras para prever a geometria das moléculas sem utilizar cálculos quânticos nem *softwares*. No entanto, cálculos quânticos presentes em aplicativos e *softwares* podem ser utilizados didaticamente para visualização das moléculas e para comparação com as geometrias determinadas previamente pelo modelo (Hargittai, 2009).

No aplicativo, cada átomo tem uma cor (Figura 16), que além de informar a identificação de cada um, nesse trabalho foi entendido como algo que teve um papel

lúdico perante os alunos. Ao selecionar o átomo de carbono na tabela periódica e clicar na tela do celular uma pequena esfera preta apareceu, em relação ao oxigênio a cor é vermelha; hidrogênio tem a representação de uma esfera na cor branca; enxofre cor amarela; selênio cor laranja-claro; fósforo cor laranja-escuro; flúor cor verde-lima; cloro cor verde-claro e zinco esfera com cor lilás.

Figura 16 - Cores dos átomos de cima para baixo no aplicativo do *software* WebMO: C (preto), oxigênio (vermelho), hidrogênio (branco), enxofre (amarelo), selênio (laranja-claro), fósforo (laranja-escuro), flúor (verde-lima), cloro (verde-claro) e zinco (lilás).



Fonte: Aplicativo do *software* WebMO.

Em aulas de Química sobre ligações químicas, comprimentos e ângulos, apenas uma abordagem expositiva e dialogada pode não ser suficiente para a compreensão desses conceitos abstratos, que lidam com fenômenos microscópicos. Nesse sentido, o aplicativo WebMO se mostrou uma ferramenta, pela qual os alunos puderam visualizar as bolas/esferas representando os átomos e os traços simbolizando as ligações. Os alunos conseguiram assimilar que as esferas

representavam cada átomo e ao interagir com o aplicativo, perceberam, por exemplo, que, ao clicar em qualquer lugar da tela do celular ou ao clicar duas vezes, algumas ligações apareciam de forma errada ou que havia a possibilidade de criar ligações duplas ou de inserir um átomo isolado em local que não fosse na estrutura da molécula. Isso ajudou na compreensão e no entendimento dos alunos sobre as ligações químicas e a disposição dos átomos e acabou por tornar o aprendizado desses conceitos mais dinâmico e acessível por meio do celular.

Percebeu-se que o aplicativo estimulou os alunos na hora de desenhar, pois eles gostaram de fazer os desenhos das estruturas das moléculas e expressaram isso quando perguntados nas aulas mediadas pelo *Google Classroom*. Observou-se também que os alunos se empolgaram em baixar o aplicativo e ficaram perguntando como achavam os átomos e como desenhavam, antes mesmo de a professora explicar e mostrar o roteiro do passo a passo da utilização, foram agindo com ações de já ir tentando fazer desenhos. Os estudantes relataram que se sentiram mais motivados em desenhar as moléculas no celular do que desenhar nas folhas de seus cadernos, acharam uma forma mais “*legal de desenhar*”.

Com o surgimento do mundo virtual e da máquina, ou seja, dos computadores e dispositivos, hoje tem-se acesso às informações rapidamente e de diversos lugares, e podem ser transmitidas e criadas por qualquer pessoa com acesso a esses dispositivos, como aplicativo em celular. De acordo com Demo (2007), esses dispositivos devem ser usados, não só para transmitir informações, mas para motivar os alunos a serem mais autores, mais interpretativos, criativos e críticos de modo que as tecnologias não sejam apenas uma caixa preta que só existe em sala de aula (Demo, 2007).

Diante dessa realidade, apesar do interesse dos alunos, já se adianta que uma das dificuldades na utilização de realizar o passo a passo desde o início até o final com o produto final das representações das moléculas foi o idioma do aplicativo, mas que isso não foi um impeditivo do uso do recurso, haja vista que a orientação da professora com o roteiro, vídeos gravados e ajuda na tradução foram muito importantes.

No que tange às respostas às atividades propostas, a Atividade 1 e 2, todos os alunos fizeram e entregaram na data estipulada. Apesar de a maioria dos alunos terem conseguido responder a tabela com acertos dos valores de comprimento de ligação e ângulo de ligação, após realizado os cálculos quânticos semiempíricos,

nas respostas à Tabela 1 da Atividade 1, notou-se que alguns chegaram a resultados diferentes do esperado para os ângulos das moléculas, destaque em vermelho, tanto no semestre 2021/1 (Figura 17) quanto no semestre 2021/2 (Figura 18). Isso ocorreu, pois não foi seguida a sequência de seleção dos átomos, de acordo com a coluna Ângulo Lig. (°) da Tabela 1, para obterem os valores dos ângulos de ligação.

Figura 17 - Resposta à Atividade 1 enviada no semestre 2021/1.

● Comprimentos e ângulos de ligação

Tabela 1 - Moléculas e informações estruturais obtidas nos cálculos teóricos.

Molécula	Comp. Ligação (Å)	Ângulo Lig. (°)	MNDO		AM1		RM1		PM3		PM6		PM7		Experimental	
			Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)
CH ₃ OCH ₃	C-O	C-O-C	1,500	109,43	1,417	33,537	1,402	33,433	1,406	32,945	1,439	33,493	1,415	33,489	1,416	112,0
CH ₃ SCH ₃	C-S	C-S-C	1,415	33,553	1,752	88,631	1,793	39,556	1,801	38,377	1,806	38,588	1,821	38,828	1,807	99,1
H ₂ O	O-H	H-O-H	1,050	35,264	0,961	103,33	0,958	39,701	0,951	39,694	0,949	38,244	0,955	37,306	0,958	104,5
H ₂ S	H-S	H-S-H	1,055	37,316	0,923	102,25	0,928	44,366	0,930	43,244	0,950	42,430	0,979	41,576	1,336	92,1
H ₂ Se	Se-H	H-Se-H	1,480	35,264	1,417	93,876	1,417	44,036	1,420	43,217	1,465	43,144	1,465	43,116	1,460	91,0
PF ₃	P-F	F-P-F	1,780	35,264	1,543	71,002	-	-	1,598	42,089	2,027	72,135	1,579	71,671	1,570	97,8
PCl ₃	P-Cl	Cl-P-Cl	2,027	33,680	1,919	37,708	1,983	37,510	2,067	40,155	2,072	39,631	1,979	35,266	2,039	100,3
ZnCl ₂	Zn-Cl	Cl-Zn-Cl	2,140	0,000	2,067	0,000	2,067	0,000	2,067	0,000	2,036	0,000	2,044	0,000	2,062	180,0

Fonte: Resposta do discente.

Figura 18 - Resposta à Atividade 1 enviada no semestre 2021/2.

Comprimentos e ângulos de ligação

Tabela 1 - Moléculas e informações estruturais obtidas nos cálculos teóricos.

Molécula	Comp. Ligação (Å)	Ângulo Lig. (°)	MNDO		AM1		RM1		PM3		PM6		PM7		Experimental	
			Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)
CH ₃ OCH ₃	C-O	C-O-C	1,417	112,924	1,417	32,924	1,402	33,704	1,406	32,945	1,439	33,493	1,415	33,489	1,416	112,0
CH ₃ SCH ₃	C-S	C-S-C	1,790	103,471	1,752	88,631	1,793	39,272	1,801	38,730	1,806	38,706	1,821	38,828	1,807	99,1
H ₂ O	O-H	H-O-H	1,050	35,264	0,961	103,33	0,958	39,701	0,951	39,694	0,949	38,244	0,955	37,306	0,958	104,5
H ₂ S	H-S	H-S-H	1,350	42,433	1,373	42,749	1,388	43,296	1,390	43,244	1,462	42,433	1,439	41,571	1,336	92,1
H ₂ Se	Se-H	H-Se-H	1,480	103,471	1,417	93,876	1,417	44,036	1,420	43,217	1,465	43,144	1,465	43,116	1,460	91,0
PF ₃	P-F	F-P-F	1,780	35,264	1,543	71,002	-	-	1,598	42,089	2,027	72,135	1,579	71,671	1,570	97,8
PCl ₃	P-Cl	Cl-P-Cl	2,027	33,680	1,919	37,708	1,983	37,510	2,067	40,155	2,072	39,631	1,979	35,266	2,039	100,3
ZnCl ₂	Zn-Cl	Cl-Zn-Cl	2,140	-	2,067	0,000	2,067	-	2,067	-	2,036	-	2,044	-	2,062	180,0

Fonte: Resposta do discente.

O aluno escreve um valor de 33,537° no método AM1 e 32,945° no método PM3 para o ângulo C-O-C da molécula de CH₃OCH₃. O valor experimental é 112,0° para o ângulo formado entre C-O-C, porém, ao selecionarem os átomos em ordens

aleatórias do ângulo, como: C-C-O ou O-C-C, os alunos chegaram em um valor diferente do esperado de $112,0^\circ$. Ou seja, o valor do ângulo formado por estes três átomos selecionados na sequência: carbono, carbono e oxigênio é de $33,537^\circ$, enquanto que se forem selecionados na ordem carbono, oxigênio e carbono o ângulo é de $112,926^\circ$, pelo método semiempírico AM1. Isso ocorre, porque a ordem de seleção dos átomos altera o valor do ângulo, já que cada seleção se refere a um ângulo diferente formado entre três átomos na sequência.

Dessa forma, para cada ordem de seleção de átomos, um ângulo diferente é observado. Isso pode ser verificado pela Figura 19, a qual mostra diferentes valores de ângulos de ligação em diferentes ordens de seleção.

Figura 19 - Ângulos formados entre os átomos C-O-C (a) e C-C-O (b). Em preto: carbono; em vermelho: oxigênio e em branco: hidrogênio. Ambos os valores foram obtidos com a metodologia PM6. Os átomos de carbono e de oxigênio que estão selecionados ficam destacados em cor azul-claro translúcida.



(a)

(b)

Fonte: Aplicativo do software WebMO.

Em a) a seleção feita na ordem: carbono (esfera preta), oxigênio (esfera vermelha) e carbono (esfera preta), tem-se como resultado o valor do ângulo formado $113,50^\circ$ e, em b), a seleção na ordem carbono, carbono, oxigênio, ângulo

de $33,25^\circ$, valor que é distante do experimental. Esse erro de seleção de átomos repetiu-se com as outras moléculas, como pode ser observado nas Figuras 17 e 18.

Levando-se em consideração as respostas de alguns alunos, foi explicado em aula que existe uma ordem correta de seleção de átomos para verificar o valor do ângulo C-O-C, que, se não for seguida, darão valores muito longe, se comparados aos valores experimentais. Dessa forma, percebe-se que faltou aos discentes lembrar de comparar os valores de ângulos resultantes da seleção de três átomos com os valores experimentais. Caso o aluno comparasse $33,25^\circ$ com o valor experimental de $112,0^\circ$, possivelmente, perceberia que o valor não está próximo. Se tivesse feito a seleção C-O-C, teria obtido o valor de $113,50^\circ$, mais próximo ao experimental.

Ressalta-se aqui que dois vídeos (Figura 20) foram gravados e foram disponibilizados no *Google Classroom* como forma de auxiliar os alunos na utilização do aplicativo WebMO nas duas Atividades. Como a interação estava limitada aos recursos do *Google Classroom* e das aulas síncronas no *Google Meet*, essa foi uma ação a mais encontrada para facilitar na explicação sobre como utilizar o aplicativo. Os vídeos foram gravados pela professora, utilizando outro celular para, assim, mostrar o uso do aplicativo e a forma de selecionar os átomos, bem como os valores encontrados de comprimento e ângulo de ligação e dos valores de energia de ionização, além de realizar a tradução das palavras em inglês do aplicativo. Ressalta-se que essas ações já haviam sido feitas antes em aula, no dia em que foi solicitado aos alunos para baixar e instalar o WebMO.

Figura 20 - Vídeos gravados e disponibilizados no *Google Classroom*, sobre o aplicativo WebMO.



Como usar WebMO - vídeo

Carla Mendes • 23 de abr. de 2021



WebMO1.mp4
Vídeo

Vídeo - parte 2 WebMO

Carla Mendes • 19 de mai. de 2021



WebMO2.mp4
Vídeo

Fonte: *Google Classroom*.

Esses vídeos se mostraram importantes, porque alguns alunos não perguntaram presencialmente pelo *Google Meet* para sanar as dúvidas, seja por receio de usar o microfone, seja pela limitação de recursos por não possuírem microfone ou fones de ouvido funcionando e, até mesmo, devido ao fato de haver pessoas por perto no horário das aulas ou por barulhos na residência, alguns dos alunos preferiram não perguntar no *Classroom*. Os vídeos viabilizaram o acesso a qualquer momento para ver a explicação de utilização do aplicativo.

Apesar da seleção de átomos que resultou em valores de ângulos diferentes apresentados na tabela, a maioria dos alunos não se confundiu em relação à ordem de seleção dos átomos, o que pode significar que a maioria dos alunos lembrou de selecionar os três átomos na ordem específica e, em seguida, conferir se estavam os valores próximos ao experimental. Reitera-se aqui que os vídeos gravados atuaram como um suporte para os alunos, pois a explicação do uso do aplicativo foi feita inicialmente em aula síncrona, simultaneamente com os alunos. Explicou-se o passo a passo, traduzindo os nomes em inglês, a forma de desenhar, de enviar os cálculos e, depois, vê-los em forma de texto e em representação gráfica. Assim, foi apresentado e explicado o roteiro para cada um realizar a sua simulação, destacando que, na última coluna do lado direito da Tabela 1 do roteiro da Atividade

1, estavam os valores experimentais que deveriam ser comparados com os resultados do aplicativo.

Durante aulas que não foram presenciais, a explicação da professora sobre o assunto, o uso de recursos didáticos e tecnológicos como *Google Classroom*, *Meet* e *Jamboard* foram necessários para que os alunos conseguissem compreender, da melhor forma possível, o que lhe era ensinado. Contudo, percebeu-se que a interação, apenas virtual, conferiu menor possibilidade de trocas e de possibilidades de tirar dúvidas dos alunos quanto ao uso das tecnologias, nesse caso, do aplicativo WebMO, em inglês. Não é por ser virtualmente, mas até pelo fato de que alguns dos alunos se sentem inibidos de perguntar suas dúvidas em aulas síncronas mediadas por tecnologias e outros possuem dificuldade de manusear as tecnologias para fazerem perguntas que possam tirar suas dúvidas, como foi o caso ocorrido nos dois semestres do período de pandemia aqui relatado.

Situação similar ocorreu com Soares e Colares (2020), que explicaram em seu estudo que, apesar do uso de ferramentas como *Zoom*, *Skype* e *Hangouts* nas aulas terem proporcionado a interação em tempo real entre professores e alunos durante a pandemia, ainda se observou o desnivelamento quanto à usabilidade das ferramentas das tecnologias, principalmente ao que se refere às dificuldades que as pessoas apresentam em manusear essas tecnologias (Soares; Colares, 2020).

Dando seguimento, durante a correção da atividade em aula síncrona, os alunos que colocaram os valores dos ângulos formados em outra sequência e não ficaram inibidos, falaram que, a ordem de selecionar os átomos não importava, já que estavam selecionando os três átomos para saber o ângulo na Atividade 1. Nesse momento, abriu-se o *Google Jamboard* (um quadro virtual, no qual é possível escrever), desenhou-se a molécula na lousa interativa e foi explicado o porquê dos valores diferentes, pois tratava-se de ângulos diferentes. Assim, foi solicitado aos alunos que abrissem o aplicativo para desenharem novamente alguma molécula que erraram e submetê-las ao cálculo de otimização de geometria. Em seguida, pediu-se aos alunos para selecionarem os três átomos em diferentes ordens e observarem que os ângulos davam resultados diferentes em ordens de seleção diferente.

O erro nos valores que alguns alunos encontraram faz parte do processo de ensino-aprendizagem, que pode estar relacionado ao professor e/ou ao aluno. Em relação à professora, além de ter falado na explicação da aula e dos vídeos, poderia ter sido escrita, no próprio roteiro da Atividade 1, uma observação para que os

estudantes se lembrassem de que seleções diferentes resultam em ângulos com valores diferentes. Apesar da gravação, alguns alunos não assistiram aos vídeos. De forma geral, pode também ter consistido em um erro ou esquecimento, pois, mesmo observando a explicação da professora em aula síncrona e no vídeo para compararem com o valor experimental, não o fizeram. Apesar de haver uma tabela mostrando a ordem de seleção, ainda selecionaram de forma aleatória, e isso é algo que deve ser entendido como um aspecto que faz parte do processo de aprendizagem.

Por último, pode ainda ter sido um erro conceitual de como é formado um ângulo e, por isso, os alunos concluíram que qualquer seleção poderia ser feita para chegar ao resultado do ângulo formado entre carbono, oxigênio e carbono. Apesar disso, o processo de os alunos terem realizado a simulação, para chegar aos resultados dos valores de ângulos e comprimentos de ligação, foi mais importante. De acordo com Silva (2008), o erro pode ter uma função construtiva, pois sinaliza aspectos estruturais e processuais na formação de conhecimentos do aluno e permite ao professor ver a relação do aluno em sua aprendizagem.

Nesse contexto do erro, há uma concordância em realizar avaliações compatíveis com a ideia da questão da aprendizagem que ocorre permanentemente, mas infelizmente ainda se continua a fazer isso com um olhar de homogeneidade considerando quem errou e quem acertou para em seguida julgar (Nogaro; Granella, 2004). É sim importante verificar os erros que foram percebidos nas atividades realizadas no processo de ensino e aprendizagem, mas não para diminuir o discente e nem para considerá-lo menos inteligente que os alunos que acertaram, mas sim para refletir os possíveis porquês dos erros ocorridos. Em relação aos erros que estiverem ao alcance da correção dos docentes, que sejam revistos, repensados e algum processo ou método reelaborado para auxiliar melhor os alunos.

Nesse contexto, a seleção em ordens diferentes gerou, por exemplo, uma oportunidade de dialogar aprofundadamente com os alunos de como é um ângulo, sobre o conceito de ângulo e por que as diferentes seleções de átomos deram resultados diferentes. Foi possível também entender que não são todos os alunos que tiveram condições de assistirem ao vídeo com as explicações e que alguns alunos não estavam presentes na aula síncrona no dia que foi explicado sobre como usar o WebMO e fazer as atividades. Foi, assim, um momento de ensino-aprendizado e não de repreensão e de exclusão dos alunos que escreveram os

valores de ângulos formados por outras seleções de átomos, mas sim de inclusão e de contato com os alunos.

A avaliação, quando ocorre de maneira excludente, pode acabar contribuindo para a hierarquização do conhecimento. Esse modelo, que apenas classifica respostas como acertos ou erros, ignora a riqueza dos processos de aprendizagem, deixando a avaliação resumida a apenas uma forma de controle. Nesse contexto, o prazer de aprender se perde e a preocupação é exclusiva em relação a notas e provas, perpetuando o medo de falhar. É necessária uma avaliação que vá além disso, o professor deve acompanhar o aluno de forma contínua e dialógica. Essa abordagem permite ajustes no processo educativo, possibilitando que todos os estudantes revelem suas potencialidades (Nogaro; Granella, 2004).

Ainda na Atividade 1, os estudantes também observaram e compararam as estruturas desenhadas no aplicativo do *software* com as estruturas que estavam desenhadas no caderno por eles, utilizando o modelo VSEPR para prever as geometrias. Assim, compararam suas representações das geometrias desenhadas nos cadernos com a geometria representada no aplicativo. Durante a correção, os alunos que comentaram por meio do microfone e/ou escrevendo no *chat* do *Google Meet*, disseram que foi muito *“legal olhar as estruturas e poder rodar elas”*, já que, no caderno, não é possível tal movimento e que é bom saber *“que fui eu que enviei o cálculo no celular pra ver esses desenhos”*,

Nesse sentido, os estudantes podem usar duas formas de visualizar as representações de moléculas: o raciocínio imagético, que inclui representações na mente de como visualizar as estruturas 3D. Kiernan, Manches e Seery (2021) trazem referências e explicam que o raciocínio imagético está relacionado à visualização espacial, que envolve gerar e manipular imagens na mente, por exemplo, imaginar uma figura de um quadrado na mente e girar esse quadrado mentalmente. Pessoas da área da Química, geralmente, utilizam esse raciocínio para visualização e representação tridimensional de estruturas microscópicas a partir de ilustrações em duas dimensões que estão presentes nos livros, de modo que é possível realizar até mesmo rotações dessas estruturas mentalmente. Assim, algumas pessoas já imaginam as representações das moléculas na mente, imaginando como seria sua geometria no espaço.

Outras pessoas, para conseguirem essa visualização, utilizam a estratégia analítica como o modelo VSEPR, que usa um algoritmo de passo a passo para se

chegar a qual tipo de geometria pertence a espécie química. Cada indivíduo apresenta mais facilidade com uma ou outra forma. Kiernan, Manches e Seery (2021), fazendo uma pesquisa para saber qual forma preferem, mostraram que os estudantes utilizam várias estratégias de raciocínio nesse conteúdo de geometria molecular e, mesmo que se ensine a teoria VSEPR, alguns preferem usar estratégias de conhecimentos prévios e usar o raciocínio imagético (Kiernan; Manches; Seery, 2021). Antes da realização da atividade com o WebMO, os graduandos visualizaram a geometria das estruturas que, anteriormente, foram explicadas nas aulas e desenhadas no caderno por meio do modelo VSEPR, visualizando-as com a ajuda do modelo. Posteriormente, visualizaram as representações que eles geraram no aplicativo e, a partir dessa visualização, puderam começar a representar essas imagens mentalmente.

De acordo com Hargittai (2009), o modelo VSEPR é tanto uma ferramenta educacional quanto de pesquisa, porém é bem mais utilizado como uma ferramenta educacional. O modelo foi desenvolvido por Ronald J. Gillespie depois de uma revisão da estereoquímica inorgânica que fez conjuntamente com Ronald Nyholm, a partir dessa revisão, ele criou as regras que, posteriormente, seriam o modelo VSEPR. A essência do modelo de Gillespie afirma que são as interações de repulsão entre pares de elétrons na camada de valência, compartilhados e não compartilhados que determinam a forma de uma molécula. Mais tarde, o modelo foi aumentado, para incluir efeitos de ligações múltiplas, eletronegatividade do ligante, disponibilidade do orbital *d*, mas mantendo o princípio básico da repulsão dos pares de elétrons (Hargittai, 2009).

Vale destacar que, à época posterior ao desenvolvimento do modelo VSEPR, foram feitos cálculos químicos quânticos para verificar as distribuições de densidade eletrônica de pares de elétrons compartilhados e não compartilhados para observar e analisar o modelo. No entanto, verificaram-se diferenças mínimas, até mesmo para pares de elétrons ligantes de átomos de diferentes eletronegatividades que estavam ligados ao átomo central. Hargittai (2009) enfatiza que, se esses cálculos tivessem precedido o modelo VSEPR, este talvez nunca teria sido formulado:

Olhando para trás, pode-se concluir que se esses cálculos tivessem precedido quaisquer ideias sobre o estabelecimento de um modelo, o modelo VSEPR poderia nunca ter sido formulado. Isso não quer dizer que, em retrospectiva, não houve tentativas de colocar o modelo VSEPR em uma base sólida de mecânica quântica. Houve até sugestões para renomeá-la como Mecânica de Pauli para enfatizar a relação da interação de repulsão com o Princípio de Exclusão de Pauli. No entanto,

a base física do modelo VSEPR pode ser expressa em termos muito mais rudimentares (Hargittai, 2009, p.156).

Por mais que não tenha sido necessária a utilização de cálculos quânticos para o desenvolvimento do modelo VSEPR, *softwares* de Química os utilizam para calcular diversas propriedades da molécula. Sendo assim, se o modelo VSEPR pode ser entendido sem qualquer utilização e explicação de quântica aos estudantes para se chegar à geometria de cada molécula, pergunta-se: Por que usar o aplicativo do *software* WebMO, se este realizou cálculos mecânicos quânticos para a geometria de otimização e para geração de representações visuais?

Isso pode ser respondido, porque o aluno pode, além de só desenhar, realizar as etapas de submissão do cálculo da simulação e visualizar as moléculas, também pode conhecer diferentes metodologias para os cálculos, e que estes são feitos para determinar as propriedades das moléculas e até mesmo que podem prever alguma propriedade química sem que seja necessário realizar experimentação em laboratório e, partir disso, também participarem mais inteirados do processo de simulações químicas para gerar visualizações de espécies químicas. Isso foi dialogado com os alunos, tendo em vista que, na aula síncrona em que atividade foi solicitada, dois alunos da turma da EA comentaram que não sabiam que tinha como “fazer cálculos” para assim poder ver o desenho de um orbital molecular.

Ao apresentar a equação de Schrödinger, explicando cada termo e a que se refere cada método semiempírico para sua resolução, foi possível contextualizar as etapas de execução do *software* WebMO e a importância dessas equações e metodologias para as simulações de moléculas. Assim, explicar sobre simulações que usam a química quântica e os métodos semiempíricos, que ajudam a resolver as equações, e a propor as atividades em que os próprios alunos realizaram as simulações e todas etapas no aplicativo ao invés de só ver o desenho final da molécula, permitiu-se maior participação com perguntas sobre o assunto, possibilitando aos alunos saber que eles mesmos podem submeter cálculos das propriedades moleculares por meio de cálculos quânticos e que podem aprender usar essa ferramenta na disciplina de Química.

A possibilidade de fazer as próprias simulações, em um *software* de química quântica a partir do aplicativo do *software* WebMO, deixou os alunos mais ativos e não apenas sendo receptores de conceitos. Para além disso, puderam utilizar, realizar, enviar e acompanhar a realização dos cálculos das propriedades

moleculares e, ao final, puderam ver os resultados tanto em formato de texto quanto em imagem representando as moléculas que desenharam. Ressalta-se que, como apresentado anteriormente, quando se usa dispositivos móveis no ensino, tem-se uma modalidade denominada *mobile learning* e que esta apresenta a possibilidade de uma aprendizagem a partir de dispositivos como o celular.

No caso do presente trabalho, quando da realização do projeto, não se imaginava que ainda houvesse isolamento social. No entanto, caso as simulações realizadas no aplicativo WebMo fossem feitas em computador ou *notebook* durante a pandemia, possivelmente, alguns alunos não conseguiriam participar, pois nem todos alunos dispõem de computador ou *notebook* em suas casas. Isso possui importância quando se fala em tecnologia, pois esta deve ser uma ferramenta para ajudar os indivíduos, professores e alunos, e não é algo que deve excluir e nem algo a que devemos apenas nos adaptar. Mesmo sem ser intencional, o fato de se ter utilizado o aplicativo, acabou por ajudar durante a pandemia, porque a maioria dos alunos tinham acesso ao celular.

E, mesmo que os alunos não tiveram contato anterior com o aplicativo WebMO, que está no idioma em inglês, foram incentivados a usar, a testar, a desenhar as moléculas e a realizar todas as etapas para os cálculos quânticos. Isso auxilia os alunos a serem mais protagonistas durante o processo de ensino-aprendizagem e é um diferencial em relação ao uso de tecnologias para visualização de fenômenos microscópicos e conceitos abstratos na área de Química, ao invés de só observarem as estruturas, eles também as geraram. Antes, a educação vinha a partir de uma imposição de cima para baixo e de fora para dentro, sendo o professor a única forma de o aluno entrar em contato com o conhecimento e, por isso, o único papel da escola era passar as informações e habilidades de conhecimentos que foram desenvolvidas no passado. Criava-se, assim, um abismo entre o saber amadurecido e acabado do professor e a experiência e capacidade do aluno, de modo que essa situação impedia a participação mais ativa do aluno e no desenvolvimento do que lhe é ensinado (Dewey, 1979).

Com base nessa percepção, observou-se que os alunos se envolveram e interagiram com o WebMO, inicialmente, baixaram o aplicativo no celular e logo buscaram aprender como utilizá-lo, mesmo antes da explicação e após a explicação da professora, os estudantes também foram orientados a experimentar, testar e entender seu funcionamento. Percebeu-se que uma das formas de aprender a

utilização do aplicativo foi também experimentando e aprendendo por conta própria a utilizar cada funcionalidade.

Retomando Johnson (2001), inicialmente, a única forma de realizar alguma tarefa nos primeiros computadores era teclando comandos obscuros e, somente após a criação da interface gráfica do usuário e do *mouse*, o usuário podia interagir ele mesmo com o computador. Por exemplo, apontar para algo no computador e expandir conteúdos; poder clicar para abrir um arquivo em vez de pedir para o computador abrir digitando um comando, ou seja, poder interagir com um movimento no *mouse* e ver a mesma coisa acontecer no computador trouxe uma imediatez tátil para os usuários. Essas interações trouxeram a sensação para as pessoas de que as informações estavam mais próximas delas e de que estavam fazendo algo com os dados do computador, em vez de digitar o comando para o computador fazer tudo sozinho.

Fazendo uma analogia com os comandos dos computadores sem uma interface, os cálculos da química quântica, anteriormente, também eram realizados apenas com linhas de comando com as palavras-chave do que era para ser calculado para cada espécie química. Pode-se dizer que o aplicativo do *software* WebMO atuou como essa interface que possibilitou uma interação mais intuitiva e amigável com os alunos. Principalmente, quando se faz esse movimento de trazer o aplicativo do *software* WebMO para o uso com alunos de graduação que não são da área da Química, ou seja, facilitou a adaptação desses alunos por ser um aplicativo mais intuitivo, atuando como uma ferramenta de ensino-aprendizagem.

Após a realização da Atividade 1, a Atividade 2 foi apresentada durante a aula e, depois de explicado o roteiro da atividade e como proceder com o passo a passo da simulação desde seu início até a visualização, um aluno perguntou como ele diferenciaria, nos resultados, a energia correspondente ao orbital HOMO e a energia do orbital LUMO. Cabe salientar que, apesar do princípio parecer ser algo simples, ele não foi de fácil assimilação para alguns estudantes, considerando que tiveram o primeiro contato com o conceito de Teoria de Orbital Molecular (TOM) no momento desse estudo. Tanto, que o discente A32 menciona no questionário sua “*Dificuldade em achar o orbital*” durante a realização da Atividade 2.

Como foi estabelecido um prazo de duas semanas para a entrega da Atividade 2, os alunos que se sentiram à vontade para ativar o microfone tiveram tempo de perguntar e tirar dúvidas nas aulas síncronas. A Figura 21 ilustra como as

respostas são representadas depois de realizados os cálculos de energia dos orbitais moleculares.

Figura 21 - Resultado para o cálculo de orbitais moleculares da molécula CH₃OCH₃. Na tabela, a coluna da esquerda indica os orbitais ocupados e não ocupados, com a quantidade de elétrons em cada um. Na coluna à direita, a energia de cada orbital em elétron-volt.

2	-	-29.899	
2	-	-24.509	
2	-	-23.727	
2	-	-16.343	
2	-	-16.184	
2	-	-15.884	
2	-	-13.411	
2	-	-12.537	
2	-	-12.358	
2	-	-9.777	
0	-	2.568	
0	-	3.935	
0	-	5.100	
0	-	5.355	
0	-	5.377	
0	-	5.446	
0	-	5.783	
0	-	5.930	

Fonte: A partir do aplicativo do *software* WebMO.

Foi explicado que, na primeira coluna, constam quantos elétrons estão presentes em cada orbital molecular e, na coluna da direita, a energia do orbital em eV (elétron-volt). Assim, onde se encontra o número dois (2), significa que há dois elétrons ocupando um orbital e, onde se encontra o número zero (0), são orbitais desocupados. Com posse dessas informações, foi argumentado com os alunos que o orbital HOMO é aquele com maior valor de energia em eV e que está ocupado, o que levou ao questionamento de ser o valor -9,78 eV, valor este considerado segundo a teoria teorema de Koopmans (Mahan; Myers, 2000). Dessa forma, foi fornecido todo o suporte teórico para identificar o valor da energia para os alunos responderem à Atividade 2.

Considerando-se o teorema de Koopmans (Mahan; Myers, 2000), foi discutido que a energia do orbital HOMO é igual à energia de ionização (I) com o sinal

invertido ($I = -\epsilon\text{HOMO}$). Ressalta-se que estimativas de I , a partir das energias dos orbitais, são boas desde que a adição ou remoção de um elétron não altere os orbitais moleculares (OM). Esse critério não pode ser aplicado quando o OM envolvido na ionização consiste basicamente de um orbital d de elementos de transição. Nesse caso, um outro método deve ser empregado, como é o caso dos métodos pós-Hartree-Fock (Mahan; Myers, 2000).

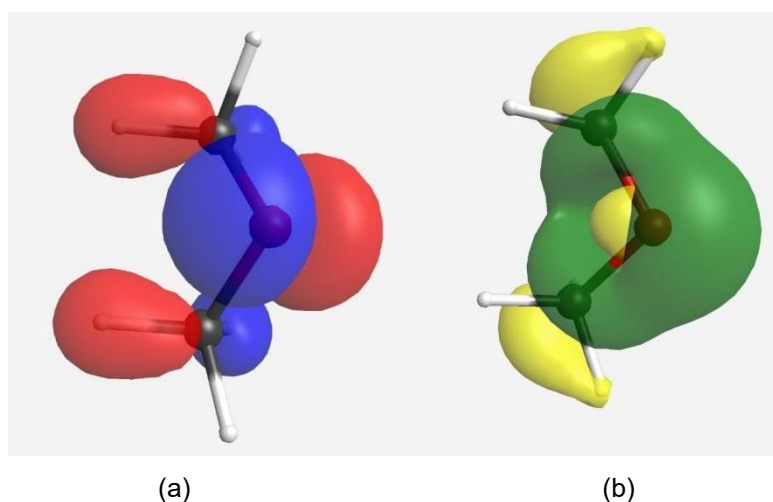
Verificou-se que os alunos das turmas de EA e EC vieram a ter o primeiro contato com os conceitos de orbitais de fronteira HOMO e LUMO nesse primeiro período da graduação, em que tiveram uma introdução à TOM. Como os alunos não têm conhecimento de um orbital molecular no ensino médio, isso pode justificar a dificuldade que alguns apresentaram em compreender orbital molecular ocupado de mais alta energia e orbital molecular não ocupado de mais baixa energia em relação a encontrá-los nos resultados da Tabela 21, ressalta-se novamente que foi explicado que, se estiver escrito 0, é porque são orbitais vazios e os que tem o número 2 são os orbitais ocupados por 2 elétrons. Além disso, é um conceito abstrato de uma região na molécula e que não se pode ver a não ser por meio de representações geradas por modelos realizados a partir dos cálculos da mecânica quântica.

No ensino médio, os sumários dos livros trazem itens dentro dos capítulos que falam sobre orbital e o que é um orbital atômico, como sendo as regiões dos átomos, nas quais a probabilidade de encontrar elétrons é maior. Nos livros didáticos, o conceito de orbital atômico também está implícito no diagrama de distribuição eletrônica de Linus Pauling e sobre os números quânticos que também está no diagrama, contudo os alunos não estudam sobre orbitais moleculares, tampouco sobre os orbitais de fronteira durante a ementa do ensino médio.

Após realizarem os cálculos das energias dos orbitais moleculares por meio dos métodos semiempíricos da mecânica quântica no aplicativo WebMO, os alunos não apenas visualizaram esses valores numéricos de energia, mas também puderam observar suas representações visuais e seus formatos calculados por esses modelos matemáticos. A representação dos formatos modelados pelas equações ajudou os estudantes a visualizarem as formas dos orbitais e não apenas seus conceitos. Poder visualizá-los também permite aos alunos interligarem o conceito de orbitais de fronteira às propriedades das moléculas, aprofundando mais o entendimento sobre ligações químicas.

A introdução da TOM com essas turmas de primeiro período, no conteúdo de ligações químicas, também ajudou a explicar propriedades das moléculas em que a TLV não consegue explicar. Salienta-se que o estudo e a compreensão dos conceitos de orbital de fronteira também auxiliam o entendimento do conteúdo que abrange mecanismos de reação na disciplina de Química Orgânica, no caso dos discentes de Agronomia, quando forem cursar o segundo período da graduação. Como mencionado, a partir da conclusão da atividade, foi possível visualizar a forma desses orbitais de fronteira ao clicar no ícone da lupa da Figura 21 e a Figura 22a e 22b ilustra os orbitais HOMO e LUMO para a molécula de CH_3OCH_3 .

Figura 22 - Representação do orbital HOMO (a) e orbital LUMO (b) visualizado no aplicativo do *software* WebMO após os resultados do cálculo para orbitais moleculares.



Fonte: Aplicativo do *software* WebMO.

No aplicativo WebMO, assim como em outros *softwares*, existem diferentes tipos de representação que melhor descrevem a informação a ser transmitida a partir de diferentes cores e desenhos. Nesse contexto, a linguagem Química além de utilizar símbolos para comunicação para melhor entendimento do mundo micro, também apresenta um apelo visual que, para além de informar, atrai quem irá entrar em contato com essa linguagem (Hoffmann; Laszlo, 1991).

As palavras átomo, soluções, mol, dentre outras são palavras que estão presentes no dia a dia, nas salas de aulas de professores de Química, e constituem conceitos presentes no processo de ensino-aprendizagem dos alunos. A elaboração desses conceitos é complexa e requer alguns fatores como a interação entre o professor, os alunos e conteúdo, de modo que o processo de conhecimento vai

sendo mediado pela linguagem. Nesse movimento da interação entre os alunos, os professores e o conteúdo de química, não é sempre que a linguagem consegue comunicar, nem sempre o que se fala será compreendido, haja vista que a química possui diferentes níveis de compreensão, como o macroscópico, e sua própria linguagem (Machado; Moura, 1995).

Nos anos de 1960, os professores de química achavam que tudo que os empolgava nas aulas também empolgaria seus alunos, o que não foi verdade, muitos alunos não se interessavam pelo conhecimento químico. Isso ocorreu porque preocupou-se apenas com a química e esqueceram um pouco da parte educacional, e essa parte é necessária de ser pensada, pois alguns padrões da aprendizagem humana não são compatíveis com a concepção da química (Johnstone, 1993). Isso ocorre, porque boa parte do nosso entendimento, como seres no mundo e na natureza, é acompanhado de fenômenos e situações que podemos ver e de objetos que podemos perceber pelos sentidos.

Já a química apresenta diferentes níveis: o representacional, o microscópico e o macroscópico. A macroquímica inclui o que é visível, a submicroquímica inclui as moléculas, os átomos e é um dos níveis que já foi o menos incluído no ensino da química, e a química representacional, que compreende os símbolos, as equações, estequiometria e a matemática. Geralmente, os químicos conseguem transitar por esses três níveis com mais facilidade, contudo, para a maioria das pessoas, isso não é fácil e o que ocorre é, às vezes, deixar de lado as partes mais complexas da química para que os alunos possam aprender. Apesar disso, os discentes são capazes de pensar em nível necessário para que aprendam, sendo possível ensinar os conceitos do micro para ir para o macro no sentido de desenvolvimentos de conceitos químicos mais abrangentes, sendo o contrário também possível, já que cada aluno tem sua forma de aprender (Johnstone, 1993).

O modo de pensar das pessoas geralmente é no macroscópico, devido ao que está ao nosso redor como casas, pessoas e rios e, por outro lado, conceitos abstratos como o conceito de elemento químico é algo diferente para se apresentar e explicar, por exemplo, pode-se até mostrar algo macroscópico aos alunos, como pó preto para representar o carbono e pó amarelo para representar o enxofre e dizer que são elementos. No entanto, não há algo que remeta aos sentidos para explicar o que é o conceito químico de elemento, bem como o conceito de átomo, ligações químicas ou de moléculas. De forma que o ensino-aprendizagem desses conceitos

se encontra no meio do triângulo dos níveis macroscópico, microscópico e representacional, ou seja, é algo e que não é fácil de se entender, entretanto a sua compreensão permite uma nova forma de ver o mundo (Johnstone, 1993).

Assim, como esses conceitos são importantes e como a química possui sua própria linguagem para abranger seus conteúdos nos três níveis, e que a inclusão do nível microscópico é uma das mais difíceis, tem-se as representações químicas que ajudam o aluno a visualizar o que não é possível a olho nu. Encontra-se, assim, uma linguagem que permite o ensino-aprendizado da linguagem química que, geralmente, precisa de modelos e representações para estudo de conteúdos microscópicos.

Os resultados aos quais os alunos chegaram neste trabalho, desde o desenho das moléculas até os cálculos finais, evidenciaram a importância das representações visuais criadas a partir de modelos matemáticos da química quântica com metodologia semiempírica. Os estudantes demonstraram entusiasmo ao desenhar as moléculas no aplicativo, o que estimulou seu interesse em estudar os conceitos de química. Além disso, eles próprios manipularam as estruturas moleculares para realizarem os cálculos dos valores de energia de ionização, comprimento de ligação e tamanhos dos ângulos. Esse envolvimento ajudou sua compreensão dos conteúdos, porque, ao participarem de todas as etapas, puderam aprender e conhecer também a importância das representações em química, incluindo-as em seu próprio aprendizado.

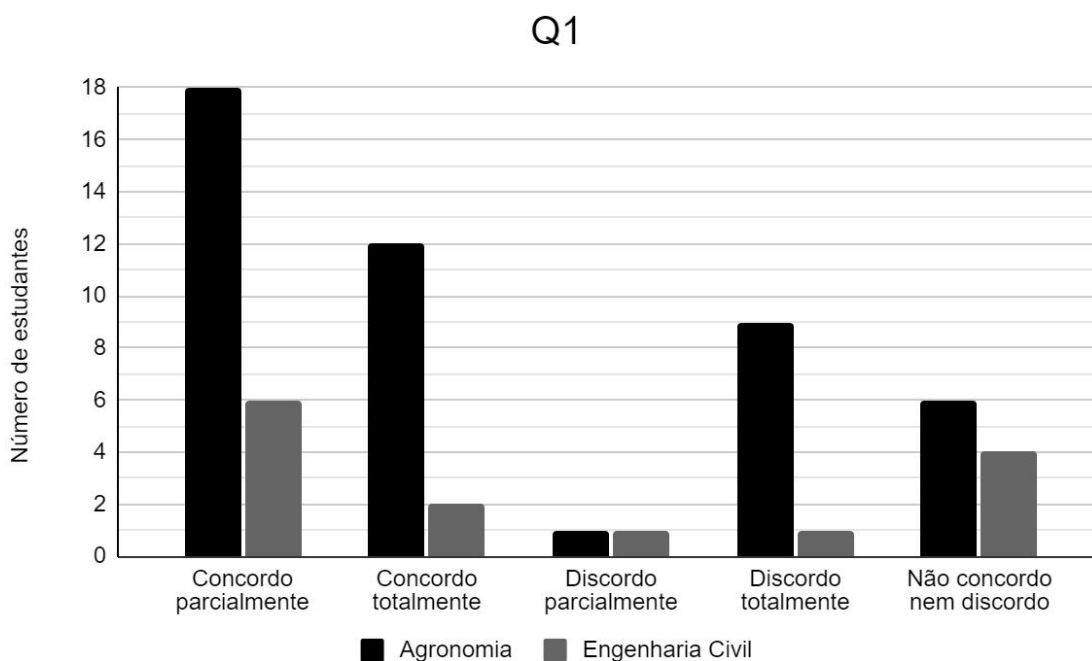
Em relação a como se daria a interação professor, aluno e conteúdo durante a época da emergência sanitária (COVID-19), uma das preocupações dos pesquisadores foi que as aulas fossem unicamente expositivas por meio de apresentações de slides via *PowerPoint*, o que não ocorreu. Tal receio não se mostrou verdade, porque o contexto enfrentado direcionou os professores a encontrarem diferentes ferramentas e tecnologias para aumentar o interesse do aluno (Bartolic *et al.*, 2022).

Foi necessária a adoção de Recursos Didáticos Digitais (RDD) para o Ensino no Isolamento Social (EIS) (Pereira; Leite; Basílio, 2021). Assim, plataformas de ensino e as redes sociais também passaram a ser mais utilizadas, seja para comunicação ou para videoaulas e/ou videoconferências durante a pandemia. Nesse contexto do EIS, os alunos se encontraram em um ambiente completamente diferente de uma sala de aula presencial, com uma rotina de estudos diferente, e

que exige um maior protagonismo e autonomia para usar os RDD. Ainda assim, poucos alunos ligaram as câmeras e os microfones para momentos direcionados a sanar as dúvidas durante as aulas não presenciais.

Ao final dos semestres de 2021/1 e 2021/2, os alunos responderam ao questionário com 9 questões para que fosse possível verificar melhor suas percepções para além das observações e além das falas durante as aulas síncronas. A partir da afirmação: *Achei muito difícil a utilização do aplicativo do software WebMO* (Q1), as respostas obtidas são mostradas na Figura 23.

Figura 23 - Resposta dos discentes (2021/1) de Agronomia e Engenharia Civil ao item: Achei muito difícil a utilização do aplicativo do software WebMO. (Q1).



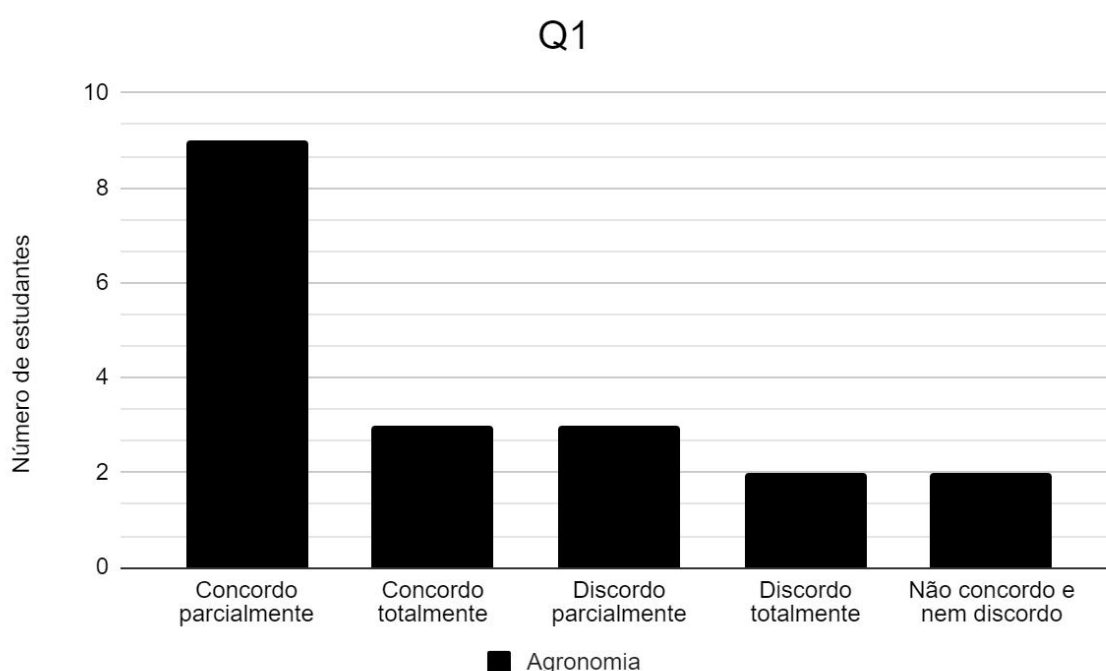
Fonte: Os autores.

Pode-se observar que dos 46 ingressantes do curso de EA (2021/1), 12 estudantes concordaram totalmente (26,1%); 18 estudantes concordaram parcialmente (39,1%); 6 estudantes não concordaram e nem discordaram (13%); 9 estudantes discordaram totalmente (19,6%) e 1 aluno discordou parcialmente (2,2%) deste item. Na mesma Figura 23, é possível observar que na EC (2021/1), dos 14 discentes, 2 estudantes concordaram totalmente (14,3%); 6 estudantes concordaram parcialmente (42,9%); 4 estudantes não concordaram e nem discordam (28,6%), (7,1%) 1 aluno discordou totalmente e 1 aluno discordou parcialmente (7,1%). Sendo

que mais de 50% dos estudantes das duas turmas responderam concordarem parcialmente ou totalmente com a afirmação.

No semestre de 2021/2, também foram propostas as Atividades 1 e 2 utilizando o aplicativo do *software* WebMO, participaram apenas uma turma do curso de Agronomia com 19 alunos. Nesse semestre de 2021, os alunos também responderam ao questionário com 10 itens. As respostas para Q1 se encontram na Figura 24.

Figura 24 - Resposta dos discentes de Agronomia (2021/2) ao item: Achei muito difícil a utilização do aplicativo do *software* WebMO. (Q1).



Fonte: Os autores.

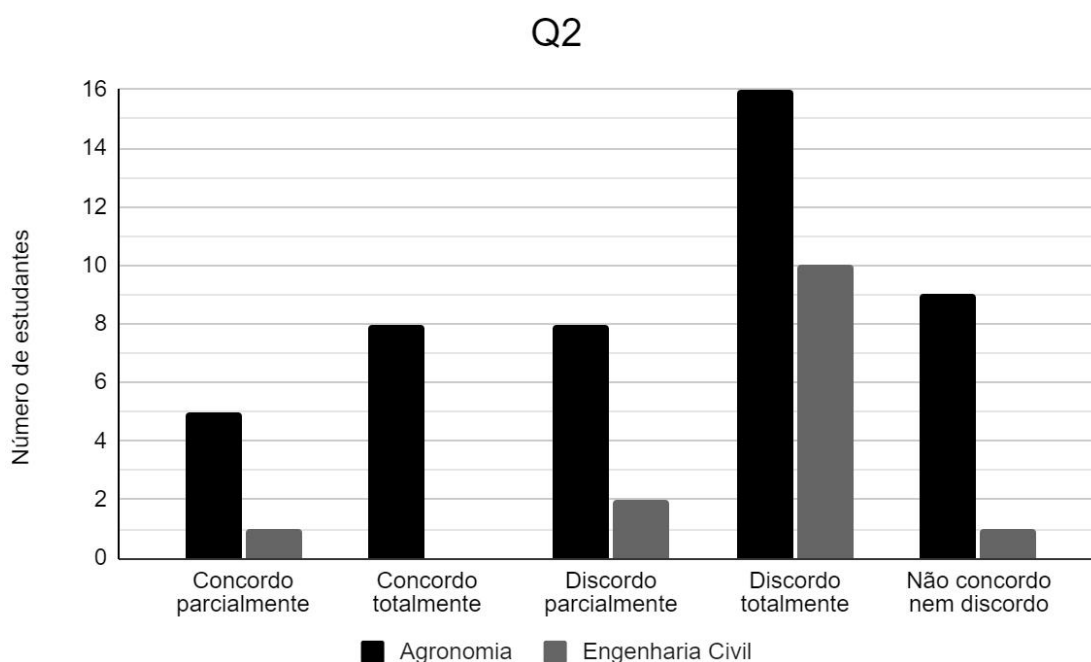
Das respostas, 47,4% (9 alunos) compreenderam àqueles que assinalaram concordo parcialmente; concordo totalmente foi um total de 15,8% (3 alunos); 10,5% (2 alunos) responderam não concordo e nem discordo; 15,8% (3 alunos) discordo parcialmente e 10,5% (2 alunos) responderam discordo totalmente, esses resultados podem também ser observados na Figura 24. Assim, mais da metade dos alunos continuou achando que utilizar o aplicativo é difícil.

Analisando as respostas às questões discursivas do questionário, percebeu-se que essa dificuldade estava relacionada ao idioma estar em inglês, contudo, como foi mencionado anteriormente, mesmo estando em inglês, após instalarem os aplicativos em seus celulares, os alunos foram tentando descobrir como usar e

perguntando como desenhava. Essa dificuldade operacional se mostrou apenas no início, devido ao fato de que os alunos foram se familiarizando com as palavras em inglês.

Nesse contexto, com a informação de que maioria dos estudantes achou difícil o uso do aplicativo, foi questionado aos alunos sobre dificuldades na utilização do celular e computador durante as aulas. No item do questionário: *Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador durante as aulas. (Q2)*, apesar de terem relatado dificuldade ao utilizar o aplicativo do *software* WebMO, mais de 50% dos estudantes disseram discordar parcialmente ou totalmente de apresentarem dificuldades na utilização do celular e computador (Figura 25). Supõe-se, assim, que os discentes não apresentaram dificuldades gerais em usar computador e celular, mas sim em usar o WebMO, marcadamente no início devido à língua inglesa.

Figura 25 - Resposta dos ingressantes da Agronomia e da Engenharia Civil (2021/1) ao item: Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador durante as aulas. (Q2).



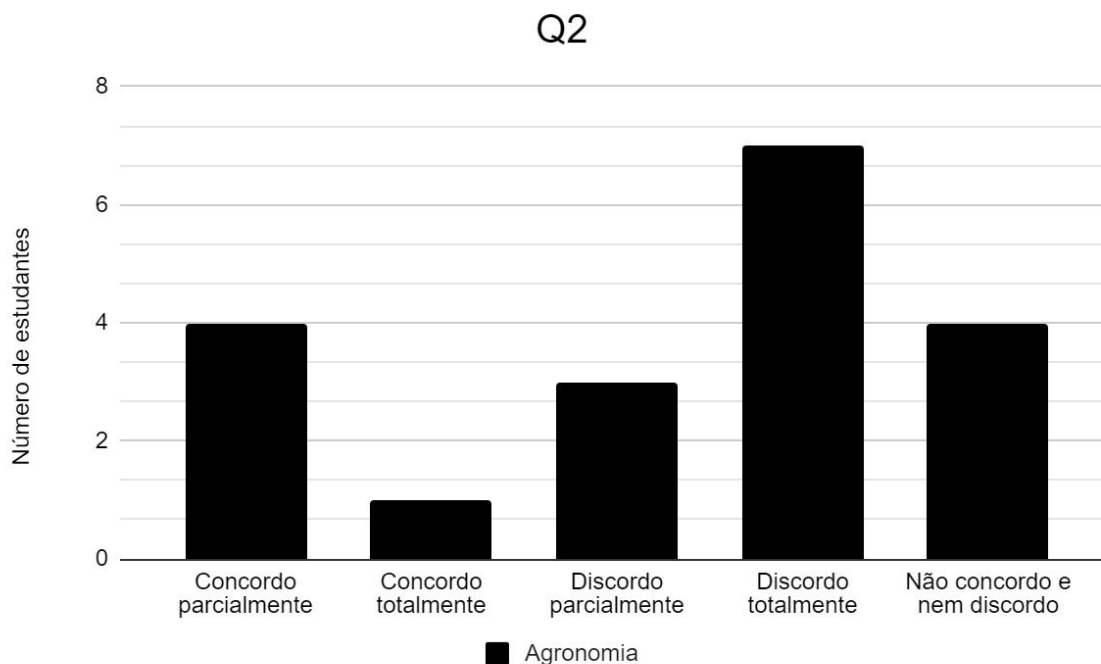
Fonte: Os autores.

De acordo com os dados da Figura 25, pode-se perceber que no curso de Agronomia: 8 estudantes concordam totalmente (17,4%); 5 estudantes concordam parcialmente (10,9%); 9 estudantes não concordam e nem discordam (19,6%); 16 estudantes discordam totalmente (34,8%) e 8 alunos discordaram parcialmente

(17,4%); e no curso de Engenharia Civil: 1 estudante concorda parcialmente (7,1%); 1 aluno não concorda e nem discorda (7,1%), 10 estudantes discordam totalmente (71,4%) e 2 estudantes discordam parcialmente (14,3%).

Em 2021/2, a maioria dos alunos também disse discordar da questão: *Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador durante as aulas.* (Q2), Figura 26, sendo que 52,6% dos alunos discordaram, ou seja, 10 alunos; 21,1% (4 alunos) responderam concordo parcialmente; 5,3% (1 aluno) concordo totalmente e 21,1% (4 alunos) não concordo e nem discordo.

Figura 26 - Respostas dos ingressantes da Agronomia (2021/2) ao item: Apresentei dificuldades na utilização de celular e computador durante as aulas. (Q2).



Fonte: Os autores.

Novamente, observou-se que a maioria dos alunos discorda totalmente da dificuldade em usar o celular e o computador. Infere-se que foi uma dificuldade específica em utilizar o aplicativo do *software* WebMO. Estudos mostram que existe um desempenho fácil em aplicativos básicos como *Whatsapp*, *Messenger*, *e-mail*, navegação pela *internet* dentre outros. Por outro lado, aspectos que envolvem planilhas eletrônicas, categorização de informação, configuração de *software*, criação de apresentações, exigem um letramento digital, um conhecimento maior

que o da utilização de aplicativos para comunicação. Tais usos são menos utilizados no ambiente educacional (Nascimento; Salviato-Silva; Dell’Agli, 2019).

No trabalho de Silva (2018) com o uso do *Google Classroom* no ensino de química, com participantes nascidos de 2000 em diante, a autora verificou que a maior parte dos alunos se avaliaram com uma nota entre 3 e 5 em uma escala de 0 a 5 para a capacidade e habilidade em manusear seus *smartphones*. Esses alunos utilizavam o aparelho, principalmente, para *YouTube*, *WhatsApp*, *Facebook* e, quando foram usar o *Google Classroom*, sentiram-se desconfortáveis, já que consideraram precisar ter novas competências e enfrentaram novas exigências em seu uso. A maioria dos estudantes deste estudo consideravam que o *smartphone* foi feito só para a diversão e lazer (Silva, 2018).

Importa salientar que, quando se trata de uso para fins que não seja as redes sociais, os estudantes da pesquisa de Silva (2018) acharam complicado usar o celular para fins acadêmicos e não se interessaram em realizar atividades. Isso, em um primeiro momento, poderia ser pensado em relação aos alunos utilizarem o WebMO, no entanto a dificuldade encontrada foi o idioma do aplicativo no início da utilização e não o interesse em usar, porque foi observado que os alunos possuíam capacidade e habilidade para manuseá-lo, tanto que já o foram manipulando e tentando descobrir como desenhar. Observa-se que a principal dificuldade encontrada nesta pesquisa que propôs atividades, nas quais o aluno fez a própria simulação com *software* do aplicativo WebMO, foi o idioma ser a língua inglesa.

De tal modo, em resposta ao item Q3: *Quais foram as dificuldades em utilizar o WebMO?* (Q3) foi recorrente queixas em relação ao aplicativo do *software* estar em inglês e, durante as aulas, alguns alunos também expuseram suas frustrações em não dominar o idioma e, por isso, constataram que deveriam entender até mesmo outro idioma para realizar os desenhos e os cálculos das propriedades moleculares, Quadro 2. Essas respostas, por terem sido recorrentes, constituíram uma categoria de respostas dos alunos identificada como: dificuldade com outro idioma, e ocorreu tanto no semestre de 2021/1 (Quadro 2) quanto no semestre de 2021/2 (Quadro 3).

Quadro 2 - Respostas dos alunos A37, A38, C4, A5, A14, A23 e A26 ao item Q3 do questionário (2021/1).

A37.	“Aplicativo em Inglês é confuso, necessário muita coisa para obter resultado.”
------	--

A38.	<i>“Ser em outra língua e não em Português.”</i>
C4.	<i>“A primeira dificuldade é que só de ele ser um aplicativo em Inglês é complicado.”</i>
A5.	<i>“As suas funções são um pouco confusas por serem de outro idioma.”</i>
A14.	<i>“Ele não estar em Português.”</i>
A23.	<i>“Ser em Inglês.”</i>
A26.	<i>“Estar em outra língua.”</i>

Quadro 3 - Respostas dos alunos A55, A57, e A60 ao item Q3 do questionário (2021/2).

A55.	<i>“Idioma.”</i>
A57.	<i>“Aplicativo em inglês.”</i>
A60.	<i>“App em inglês.”</i>

Apesar das dificuldades iniciais de uso do aplicativo por estar em inglês, A65 escreveu *“O WebMo é programa didático, que facilita a aprendizagem. Desse modo, a dificuldade é adaptar ao programa, encontrar todas as ferramentas e saber utilizá-las, mas quando coloca em prática, vai conhecendo e adaptando, e torna-se uma importante ferramenta que auxilia nos estudos”*. Além da dificuldade do idioma, alguns alunos disseram que o aplicativo do *software* estava travando e relataram ter dificuldade com a falta de *internet* nas aulas síncronas.

Cabe salientar que foi explicado aos alunos que a submissão dos cálculos do WebMO necessita de acesso à *internet* e que, se a conexão for ruim, pode ocorrer um atraso na obtenção dos resultados. Nos casos em que os alunos não conseguiram entregar as atividades no prazo estabelecido por causa da *internet*, foram disponibilizadas possibilidades de entrega posterior, contudo a maioria dos alunos conseguiu entregar as atividades nas datas. Os trechos das respostas dos alunos sobre o fato de o aplicativo do *software* travar podem ser lidos no Quadro 4. Os erros e travamentos, aos quais os alunos se referem, ocorrem devido à falta de *internet*, pois o aplicativo não calcula as propriedades e nem resulta nas representações visuais se não tiver *internet funcionando* no celular.

Quadro 4 - Respostas dos alunos C1, C3, C7 e A8 ao item Q3 do questionário.

C1.	<i>“No meu caso, ocorreram vários erros nos quais eu não soube resolver.”</i>
C3.	<i>“Quando o aplicativo dava erros nos resultados.”</i>
C7.	<i>“Às vezes ele travava ou não mostrava nenhum resultado.”</i>

A8.	<i>“Meu celular não ajuda, trava e vira bagunça.”</i>
-----	---

As questões de acesso à *internet* podem estar relacionadas a fatores socioeconômicos ou à cobertura de sinal na área onde o aluno reside e podem dificultar o uso do aplicativo WebMO, que requer conexão à *internet* em dispositivos móveis. É importante destacar que a falta de *internet* que levou a problemas de funcionamento do aplicativo, como travamentos e erros, não é de responsabilidade dos alunos, mas sim de variáveis, que estão além de seu controle. Os relatos do Quadro 5 mostram isso, a *internet* afeta o funcionamento ideal do aplicativo e pode até mesmo travar no momento de inserir o átomo em um desenho da estrutura da molécula. Como várias respostas relataram a dificuldade com *internet* e falta de energia, essa foi uma segunda categoria encontrada nas respostas ao questionário.

A imprevisibilidade do acesso à *internet* não impediu que os alunos realizassem as atividades, pois puderam fazer em outros horários e dias em que a *internet* estava com boa cobertura e com energia. No entanto, essas ocorrências evidenciaram que esse é um dos atravessamentos para o uso das Tecnologias Digitais da Comunicação e Informação no ensino de disciplinas. Por mais que o objetivo do trabalho não foi avaliar o acesso ou não à *internet* dos alunos, esse é um fator que influencia nas atividades quanto aos prazos de entrega pelos alunos contudo, ressalta-se que tiveram possibilidade de entrega em data posterior.

Com o propósito de analisar as respostas dos graduandos sobre como o WebMO atuou perante o estudo de conceitos de Química, foram questionados os seguintes itens: *A experiência de usar o aplicativo do software WebMO foi relevante para estudar a disciplina de Química Geral.* (Q4); *A utilização do WebMO facilitou na compreensão de ligações químicas e geometria molecular.* (Q5) e *A utilização do WebMO facilitou na compreensão dos conceitos de orbitais HOMO e LUMO.* (Q6). As respostas a esses itens dos questionários estão nos Quadros 5, 6 e 7, que mostra que maioria dos alunos concordaram com essas três afirmações.

Quadro 5 - Respostas dos estudantes de Agronomia (2021/1) sobre o uso do software WebMo, no aplicativo do celular.

Agronomia 2021/1	<i>A experiência de usar o aplicativo do software WebMO foi relevante para</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão de</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na</i>

	<i>estudar a disciplina de Química Geral. (Q4)</i>	<i>ligações químicas e geometria molecular. (Q5)</i>	<i>compreensão dos conceitos de orbitais HOMO e LUMO. (Q6)</i>
Concordo totalmente.	18 estudantes (39,1%)	23 estudantes (50%)	18 estudantes (39,1%)
Concordo parcialmente.	16 estudantes (34,8%)	15 estudantes (32,6%)	18 estudantes (39,1%)
Não concordo e nem discordo.	10 estudantes (21,7%)	4 estudantes (8,7%)	6 estudantes (13%)
Discordo totalmente.	1 aluno (2,2%)	2 estudantes (4,3%)	2 estudantes (4,3%)
Discordo parcialmente.	1 aluno (2,2%)	2 estudantes (4,3%)	2 estudantes (4,3%)

Fonte: Autores.

Quadro 6 - Respostas dos estudantes de Engenharia Civil (2021/1) sobre o uso do software WebMo, no aplicativo do celular.

Engenharia Civil 2021/1	<i>A experiência de usar o aplicativo do software WebMO foi relevante para estudar a disciplina de Química Geral. (Q4)</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão de ligações químicas e geometria molecular. (Q5)</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão dos conceitos de orbitais HOMO e LUMO. (Q6)</i>
Concordo totalmente.	6 estudantes (42,9%)	7 estudantes (50%)	9 estudantes (64,3%)
Concordo parcialmente.	7 estudantes (50%)	6 estudantes (42,9%)	3 estudantes (21,4)
Não concordo e nem discordo.	-	-	1 aluno (7,1%)
Discordo totalmente.	1 aluno (7,1%)	1 aluno (7,1%)	1 aluno (7,1%)
Discordo parcialmente.	-	-	-

Fonte: Autores.

Quadro 7 - Respostas dos estudantes de Agronomia (2021/2) sobre o uso do software WebMO, no aplicativo do celular.

Agronomia 2021/2	<i>A experiência de usar o aplicativo do software WebMO foi relevante para estudar a</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão de ligações químicas</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão</i>
-------------------------	---	--	---

	<i>disciplina de Química Geral e Analítica. (Q4)</i>	<i>e geometria molecular. (Q5)</i>	<i>dos conceitos de orbitais HOMO e LUMO. (Q6)</i>
Concordo totalmente.	9 estudantes (47,4%)	11 estudantes (57,9%)	6 estudantes (31,6%)
Concordo parcialmente.	6 estudantes (31,6%)	4 estudantes (21,4%)	9 estudantes (47,4%)
Não concordo e nem discordo.	2 estudantes (10,5%)	1 estudante (5,3%)	3 estudantes (15,8%)
Discordo totalmente.	2 estudantes (10,5%)	2 estudantes (10,5%)	1 estudante (5,3%)
Discordo parcialmente.	-	1 estudante (5,3%)	-

Fonte: Os autores.

O aplicativo WebMO, apesar de estar em inglês, apresentou uma interface amigável que possibilitou uma interação mais intuitiva para os alunos, permitindo que os próprios alunos realizassem simulações utilizando a mecânica quântica para calcular propriedades moleculares, principalmente no momento de selecionar os átomos na tabela periódica para desenhar as estruturas, como foi relatado pelos alunos em aulas síncronas. Isso apresentou-se como uma característica importante do aplicativo, considerando que a química quântica é composta por várias equações matemáticas que podem assustar os alunos.

Como já mencionado, existem *softwares* em que se precisa de digitar palavras-chave em uma linha de comando, para que o programa execute o cálculo das propriedades moleculares e gere os arquivos de representações visuais. O WebMO, contudo, mostrou-se aplicável para alunos do primeiro período do curso de Agronomia e Engenharia Civil realizarem suas simulações de propriedades das 8 estruturas das moléculas desenhadas. Ademais, foi uma forma de os alunos compreenderem melhor os conceitos de ligações químicas, geometria molecular e orbitais HOMO e LUMO. Como professora, foi possível perceber que os alunos não foram tão interessados e participativos quando se fez a aula expositiva dialogada sobre ligações químicas, modelo VSPER, sobre as geometrias e ângulos de ligação, antes de usar o aplicativo. Por outro lado, mesmo os alunos relatando o fato de o aplicativo ser em inglês, sentiram-se mais motivados com o uso do WebMO. Muitos disseram que foi uma metodologia muito legal e que “*poderia ter mais isso*” porque fica mais interessante de estudar, foi possível perceber os alunos mais interessados e participativos com o aplicativo do que nas aulas expositivas.

Esselman e Block (2018), utilizando o *software* WebMO, elaboraram uma abordagem curricular alternativa para a disciplina de Química Orgânica por meio da aprimoração do modelo VSEPR. Os autores desenvolveram esse método com os estudantes, porque o modelo VSEPR falha em descrever algumas geometrias moleculares que seriam estudadas detalhadamente com alunos de segundo ano da graduação, que precisavam de um modelo que previsse melhor essas estruturas. O modelo apresentou-se uma boa ferramenta e atendeu aos objetivos propostos.

Esselman e Block (2018) também discutiram que, com o menor custo dos *hardwares*, maior poder computacional e a elaboração de *softwares* mais amigáveis, tornar-se-á cada vez mais comum à comunidade de Educação em Química o uso da Química Computacional nos currículos de Química Inorgânica, Química Geral, Química Orgânica e no ensino médio também. No entanto, o trabalho dos autores foi realizado nos Estados Unidos e esta, ainda, não é uma realidade comum no ensino brasileiro em que os *softwares* específicos da química computacional estejam presentes no ensino médio. Ressalta-se também que, diferente do trabalho de Esselman e Block (2018) que utilizaram o aplicativo em um curso de Química, o presente estudo foi com a Agronomia e Engenharia Civil de uma cidade do interior de Goiás.

De acordo com os resultados dos Quadros 5, 6 e 7, mais de 50% dos discentes concordaram que a metodologia com a ferramenta WebMO auxiliou na compreensão dos conceitos, ainda que tenham apresentado dificuldades em sua utilização inicial. No intuito de identificar se os estudantes já tinham algum contato com alguma ferramenta no celular para o estudo de conteúdos químicos, perguntou-se: *Você já tinha usado algum aplicativo de celular relacionado à disciplina de Química?* (Q7). Dos estudantes de Agronomia (2021/1), 43 discentes (93,5 %) nunca tinham usado e 3 (6,5%) já tinham utilizado.

No que tange aos ingressantes do curso de Engenharia Civil (2021/1), 13 (92,2%) estudantes nunca utilizaram e 1 (7,1%) aluno já tinha utilizado. De acordo com as respostas, a maioria dos alunos não utilizaram aplicativos de celular como ferramenta de ensino-aprendizagem na disciplina de Química, sendo que o primeiro contato foi proporcionado durante este estudo na graduação, com o aplicativo WebMO. Em 2021/2, 100% dos alunos, ou seja, todos os 19 responderam “Não” ao item 7: *Você já tinha usado algum aplicativo de celular relacionado à disciplina de Química?*.

O uso de aplicativos na disciplina de Química pode atuar como ferramenta para facilitar no ensino-aprendizagem, como mencionado na introdução, tanto nos conteúdos que envolvem a parte laboratorial da química, como na parte que envolve conceitos abstratos. E não apenas para visualizar as simulações prontas, mas para fazer as simulações, entender e conhecer as equações envolvidas e como o *software* funciona para que os alunos possam se envolver com o processo e não só com o produto final.

Anteriormente, só era possível realizar simulações por meio de equações quânticas com metodologias semiempíricas se tivessem disponíveis computadores de alto processamento e programas pagos. Nos dias atuais, estão disponíveis aplicativos como o WebMO e que fazem isso ao alcance do celular, devemos então utilizá-los e propor metodologias de atividades nas quais nossos alunos possam colocá-los em prática em sala de aula, de modo a desmistificar que são tão complexos a ponto de que os alunos não consigam usá-los.

Nos Estados Unidos, Zdanovskaia e colaboradores (2018) utilizaram o WebMO como forma de possibilitar o acesso à Química Computacional em faculdades comunitárias (*Community college*) no segundo ano da graduação em Química na disciplina de Química Orgânica. Os conteúdos estudados foram isomeria conformacional, efeitos de grupos doadores e grupos retiradores de elétrons em anéis aromáticos e sobre basicidade em estruturas orgânicas. Cabe salientar que as faculdades comunitárias compreendem instituições públicas nos Estados Unidos, que disponibilizam ensino superior de menor duração (Zdanovskaia *et al.*, 2018).

Os autores discutiram também que, ainda, há ferramentas de Química Computacional no currículo dos cursos de Química, por meio de programas, que são pagos. No entanto, destacam que programas gratuitos podem ser utilizados com uma interface que simplifica a construção de moléculas e a execução de cálculos para o usuário, como é o caso do aplicativo do *software* WebMO. O trabalho dos autores permitiu aos alunos visualizar a relação entre estrutura e reatividade, o que permite entender várias reações ou fenômenos químicos. A proposta foi realizada com alunos matriculados em cursos introdutórios de laboratório de Química Orgânica com o *Kirkwood Community College* e a *University of Wisconsin-Waukesha* (Zdanovskaia *et al.*, 2018).

Os trabalhos de Mcnaught (2011), de Esselman e Block (2018) e de Zdanovskaia e colaboradores (2018), que utilizaram, especificamente, o *software*

WebMO no ensino, estão em um contexto de alunos de graduação do curso de Química de outros países, ou seja, uma realidade diferente do contexto brasileiro e do trabalho que foi realizado em Goiatuba-GO. Mas ainda assim, foi possível utilizar o aplicativo do *software* WebMO no 1º período de Agronomia e no 1º período de Engenharia Civil, para ajudar no estudo dos conteúdos de ligações químicas, orbitais moleculares e energia de ionização e com os alunos motivados e interessados a utilizá-lo.

Para entender o que os alunos acharam da metodologia utilizada com o aplicativo nas aulas não presenciais, no item 8, pediu-se que escrevessem uma resposta dissertativa para a questão: *A seguir, deixe seus comentários e sugestões sobre a disciplina. Elogios ou críticas. Quais suas maiores dificuldades com as aulas não presenciais? Acesso à internet? Uso do celular ou computador?* (Q8). Da análise das respostas, foi possível verificar que se encaixaram em quatro temáticas principais: a apropriação de conhecimento; o foco de interesse maior do que as aulas expositivas dialogadas, (essas duas categorias relacionadas principalmente ao fato de ser possível visualizar os conceitos e fazer a própria simulação); sobre as aulas não presenciais e questões relacionadas à *internet* e aos dispositivos tecnológicos.

Em suas respostas, apresentadas no Quadro 8, os alunos consideraram o uso do WebMO uma ferramenta interessante e eficaz para a apropriação de conhecimento em química. A possibilidade de interagir e visualizar os conceitos despertou o interesse dos estudantes e facilitou a compreensão das matérias estudadas por meio do aplicativo que foram: ligações químicas, energia de ionização e orbitais moleculares de fronteira. O aluno A61 escreveu que: *“As aulas são bastante produtivas, e graças aos métodos fica mais fácil pra entender a matéria!”*.

Quadro 8 - Respostas dos alunos C7, C10, A7, C4 e C8 ao item Q8 do questionário. (2021/1)

C7.	<i>“achei interessante o método do aplicativo, tirando a parte que algumas vezes dava erro, pois através dele pude entender melhor sobre as matérias.”</i>
C10.	<i>“Aplicativo pode apresentar alguns erros e falhas durante seu uso, mas tirando isso ele pôde sim ajudar bastante.”</i>
A7.	<i>“Achei muito bom estudar Química, aprendi várias coisas com o aplicativo.”</i>
C4.	<i>“Gostei bastante da utilização do app, para somar conhecimento.”</i>
C8.	<i>“A disciplina de Química desde a escola foi uma disciplina em que eu sempre tive dificuldade na matéria, e com a professora super me adaptei a matéria e consegui aprender os conteúdos gerados na disciplina durante o período.”</i>

Dessa forma, foi possível verificar, de acordo com as respostas dos alunos, que o WebMO auxiliou no estudo dos conteúdos abordados apesar das dificuldades relatadas. E, mesmo com as dificuldades iniciais em utilizar um aplicativo que não está em sua língua nativa, os alunos consideraram o aplicativo como ferramenta para ajudar no ensino dos conteúdos apresentados durante as aulas ministradas. Muito se deve ao fato de os alunos acharem interessante e diferente usar o celular para estudar conteúdos, tendo assim um foco de interesse maior do que apenas ouvir a explicação, alguns extratos do Quadro 9 expressam esse contexto.

Quadro 9 - Respostas dos alunos C2, A22, A27, A31, C8, A3 e C10 ao item Q8 do questionário.

C2.	<i>“Eu achei umas das matérias mais fáceis de lidar nesse ensino remoto, uma didática que me identifiquei muito.”</i>
A22.	<i>“foi incrível seu modo de ensino, nunca tive uma forma de ensino desse jeito.”</i>
A27.	<i>“O ensino remoto em si, traz muitas dificuldades, uma vez que a aprendizagem não é a mesma. Entretanto, na disciplina de Química, foi trabalhado da melhor maneira.”</i>
A31.	<i>“A forma da professora trabalhar é muito boa, pois são aulas diferentes, sempre buscando formas de inovar.”</i>
A3.	<i>“Foi muito interessante, o método de ensino aplicado via remotamente, nenhuma dificuldade relacionada ao ensino remoto.”</i>
C10.	<i>“Não tive dificuldade e gostei muito do jeito que a professora aplicou a disciplina, não tenho nada a reclamar.”</i>

No Quadro 9, conforme a escrita dos alunos C2, A27 e A3, é possível ler que se referem às aulas não presenciais que ocorreram durante o período pandêmico como “ensino remoto”. No entanto, Moreira e Schlemmer (2020, p.7) afirmam que, no contexto da pandemia, as tecnologias digitais “foram e estão a ser utilizadas numa perspectiva meramente instrumental, reduzindo as metodologias e as práticas a um ensino apenas transmissivo”, e que a denominação correta para as aulas não presenciais não é Ensino Remoto, como ficou popularizado, mas que, na verdade, foi um modelo temporário para auxiliar nas aulas que não poderiam ocorrer presencialmente, e que este modelo envolveu:

o uso de soluções de ensino totalmente remotas idênticas às práticas dos ambientes físicos, sendo que o objetivo principal nestas circunstâncias não é recriar um ecossistema educacional online robusto, mas sim fornecer acesso temporário e de maneira rápida durante o período de emergência ou crise (Moreira; Schlemmer, 2020, p.9).

Nesse contexto, nas aulas não presenciais que ocorreram na pandemia, muitos alunos escreveram em resposta ao item Q8, sobre sua preferência por aulas presenciais e a dificuldade em ficar focado nas aulas síncronas que foram realizadas por meio do *Google Meet*. Foram recorrentes respostas dos alunos em relação às aulas não presenciais, evidenciando sua vontade e preferência por aulas presenciais, isso pode ser observado no Quadro 10. Analisar sobre aulas presenciais ou remotas na pandemia não foi um objeto da pesquisa, mas foi um contexto pelo qual os alunos estavam passando e que perpassou o processo deste trabalho, em pesquisas que consistem de estudo de caso, é importante conhecer esse contexto.

Quadro 10 - Respostas dos alunos C3, A4, A11, A14, A15, A22, A27, A31 e A32 ao item Q8 do questionário.

C3.	<i>“O ensino remoto é difícil para todos, se fosse presencial seria muito mais fácil.”</i>
A4.	<i>“Aulas presenciais facilitam o aprendizado de fórmulas e cálculos.”</i>
A11.	<i>“Não é o mesmo que estar na sala de aula, pois tive um pouco de dificuldade.”</i>
A14.	<i>“Não tenho reclamações em relação ao método de ensino utilizado, mas preferia as aulas presenciais.”</i>
A15.	<i>“A maior dificuldade é ficar totalmente focado.”</i>
A22.	<i>“Única dificuldade mesmo foi a distância e não poder ter esse contato de aluno e professor, porém, nessas circunstâncias, sabemos o porquê não aconteceu, o ensino remoto é muito mais difícil por necessidades de prestar atenção por estar em um ambiente de conforto. Contudo foram ótimas aulas, e amei seu modo de ensino.”</i>
A27.	<i>“O ensino remoto em si, traz muitas dificuldades, uma vez que a aprendizagem não é a mesma. Entretanto, na disciplina de Química, foi trabalhado da melhor maneira.”</i>
A31.	<i>“A maior dificuldade é não perder o foco nas aulas, por ser virtual acabamos nos distraindo com algum acontecimento no local e às vezes não prestando muita atenção na aula.”</i>
A32.	<i>“Dificuldade em concentração.”</i>

Quando se fez perguntas em aulas síncronas, muitos alunos disseram que, durante as aulas, às vezes, era difícil concentrar porque tinha barulho em suas casas, televisão ligada, às vezes, distraiam-se e tinham atenção múltipla, olhando ao mesmo tempo as redes sociais e mensagens recebidas. As autoras Martins e Castro (2011) trazem referências e discutem que, anteriormente, os estudantes e as crianças não se condicionavam a modos de modelização múltipla, ficavam em uma atividade por vez. No contexto das atualidades, Demo (2007) argumenta que os

estudantes se interessam por inúmeras linguagens, como a digital, às vezes, até demais a ponto de não se interessarem pela escola. E é isso que Martins e Castro (2011) observaram, os alunos não conseguiam se concentrar, tendo que logo fazer algo para se distraírem (Martins; Castro, 2011).

Como ocorreu no primeiro semestre de 2021, os alunos do semestre de 2021/2 também disseram apresentar dificuldades nas aulas não presenciais por meio do *Google Classroom* e disseram também preferir que as aulas estivessem presenciais. No Quadro 11, A64 indicou a “*dispersão*”, “*dificuldade para assimilar a matéria*”; “*muitos exercícios de outras matérias*” e “*falta de local apropriado para assistir as aulas*” como suas principais dificuldades. O Quadro 11 do semestre de 2021/2 também traz as falas dos alunos nesse contexto de aulas não presenciais.

Quadro 11 - Respostas dos alunos A48, A49, e A64 ao item Q8 do questionário (2021/2)

A48.	“a questão das aulas serem online, acaba dificultando o aprendizado, pois infelizmente não é a mesma coisa que a aula presencial.”
A49.	“Ótima professora, sempre explica o que não é entendido, só acredito que se as aulas fossem presenciais seria muito melhor.”
A64.	“Online - Dispersão, dificuldade para assimilar a matéria, muitos exercícios de outras matérias que acaba acumulando as tarefas de química e falta de local apropriado para assistir as aulas.”

Porque as aulas foram ministradas via *Google Meet*, relatos incluíram falas de estudantes que disseram não ter *internet* há alguns dias ou ter serviço de *internet* instável, pois usavam apenas dados móveis. Outros disseram que foi difícil acompanhar algumas aulas, porque não tinham *notebook*. Cabe ressaltar que, mesmo com a relevância de inserir aplicativos para estudar conteúdos, muitos alunos informaram não ter computador ou *notebooks* ou *internet*, então é necessário também ter a *internet* no aparelho para que possam assistir às aulas e usar o aplicativo do *software* WebMO. O conhecimento das condições que o aluno tem para acessar as aulas faz-se necessário para a compreensão de suas limitações em acompanhar algum conteúdo, e isso serve para que o professor faça adequações nos prazos ou na perda de conteúdo por parte de algum aluno.

Levando-se em conta as respostas dos alunos no item Q8, percebeu-se que os maiores empecilhos nas aulas foram: a falta de acesso à *internet*, a falta de energia e a falta de habilidade em usar o *Classroom* no celular, excetuando

aplicativos de redes sociais. Como as atividades foram enviadas no *Google Classroom*, às vezes, por falta de *internet* ou por dificuldade de enviá-las por celular, os estudantes acharam mais fácil realizar o envio pelo *notebook* ou computador, no entanto, como alguns alunos tinham apenas celular, pegaram emprestado equipamentos de conhecidos. O aluno A50 escreveu que a dificuldade das atividades foi *“Apenas a disponibilidade de energia na cidade. Sem problemas com internet.”* e A59 que *“ensino remoto e mais complicado de aprender mais com um esforço da certo usei o celular pra as aulas”*. Outros extratos que descrevem essas dificuldades com *internet* estão transcritos no Quadro 12.

Quadro 12 - Respostas dos alunos A17, A18, C13, A33, C11, A30, e A31 ao item Q8 do questionário.

A17.	<i>“A disciplina apesar de ser difícil, com o método utilizado acabou sendo mais fácil de compreender, algumas atividades ficavam difíceis de fazer porque só tenho celular aí quando precisava de computador tinha que ir usar de alguém, mas o método de ensino e as explicações em aula acabavam sempre facilitando.”</i>
A18.	<i>“Ótimas aulas, aprendi muito. As dificuldades foram o acesso à internet por que às vezes cai muito.”</i>
C13.	<i>“Aqui na minha casa acaba a energia quase todos os dias durante as aulas, acho isso ruim pois, tem dia que acaba e volta ou se não acaba e tenho que assistir a aula pelo celular e só escutar sem fazer anotações, mas acaba sendo um custo do nosso ensino remoto.”</i>
A33.	<i>“No começo foi complicado pois só estava com meu telefone, mas depois fiz a aquisição de um notebook, hoje minha principal dificuldade é com a energia e a internet da fazenda.”</i>
C11.	<i>“Utilizei apenas o celular, foi um pouco mais complicado de realizar as atividades, mas no final deu tudo certo.”</i>
A30.	<i>“Encontrei algumas dificuldades pois às vezes não consegui enviar as atividades.”</i>
A31.	<i>“Quanto ao acesso à internet é tranquilo, mas às vezes a internet está muito ruim e acaba travando a aula.”</i>

Na pesquisa de Limeira, Batista e Bezerra (2020), realizada com professores e alunos de uma universidade pública do Ceará, 95% dos alunos utilizaram *smartphones*, 53% utilizaram *notebook* e 6% o computador. A pesquisa também revelou que 14% dos alunos não tinham acesso à *internet* e utilizavam de vizinhos e parentes. Os autores apontam que “mesmo no ensino superior, há desigualdade nas condições de acesso à rede mundial de computadores” (Limeira; Batista; Bezerra, 2020, p.6). Assim, como no presente trabalho, não são todos os alunos que possuem *internet* e *notebook* em casa, o que caracterizou uma das principais

dificuldades apresentadas durante o ensino na pandemia. Outra dificuldade verificada pelos alunos foi a necessidade de trabalhar e ao mesmo tempo ter que estudar.

Dessa forma, por trabalharem, justificaram a falta de tempo para dedicação aos estudos da disciplina, como relatado por A20: “*A disciplina é fácil, porém foi colocado dificuldade com tantos trabalhos no aplicativo, não tenho muito tempo devido meu trabalho*”. E por A28: “*Aplicativo, estava trabalhando e achei muito complicado mexer nele infelizmente*”, que evidenciou sua dificuldade de utilização do aplicativo por ter pouco tempo devido ao trabalho.

Novamente, esses fatores da falta de energia e *internet* e os alunos trabalharem foram situações que ocorreram e que não estão sob o controle da professora nem dos alunos. No entanto, é necessário considerar, como forma de entender a realidade das dificuldades quando se trabalha a proposta de simulações computacionais realizadas pelos próprios alunos a partir de seus celulares e em suas residências.

No intuito de conhecer se os discentes das turmas de Agronomia e Engenharia Civil são egressos de escolas públicas ou particulares, no item 9, foi questionado: *Você concluiu o ensino médio em* (Q9), eles poderiam selecionar: *Rede pública de ensino* ou *Rede particular de ensino*. Esse item é importante, pois, em geral, os estudantes de cada rede apresentam perfil socioeconômico diferente, o que pode ter influência quanto aos recursos e tempo que os discentes possuem para estudar e, conseqüentemente, sua trajetória no ensino superior. No curso de Engenharia Civil, em 2021/1, 92,9 % dos estudantes ingressantes saíram de escolas públicas, isto é, 13 estudantes de escola pública e um de escola particular. No curso de Agronomia, 45 estudantes cursaram seus estudos do ensino médio em escola pública e apenas um em escola particular. Em 2021/2 63,2% (12 alunos) responderam ter concluído na rede pública de ensino, enquanto 36,8% (7 alunos) responderam em rede particular de ensino.

Essa pergunta não está necessariamente relacionada a ter acesso à *internet* e a ter *notebook* ou computador, mas pode se relacionar com a situação socioeconômica do estudante. Durante a pandemia, foram verificadas diferenças quando se considerou rede particular e rede pública. Na rede particular, sabe-se que os estudantes possuem melhores condições socioeconômicas, já que pertencem às classes mais elevadas, excetuando estudantes que recebem bolsa. Com melhores

condições podem ter acesso à *internet 4G* (*4th-Generation Wireless*: quarta geração de telefonia móvel) em dispositivos móveis, *internet* banda larga (que utiliza fios) e *Wi-fi* (*wireless field*, área sem fio) em casa para *notebooks*, televisão, dentre outros recursos. Isso facilita o ensino, seja presencial ou remoto. Essa realidade não foi vista em escolas públicas em que a maioria dos estudantes apresenta classes sociais mais baixas (Soares *et al.*, 2020). Estudos da Cetic.br, apresentados na introdução, mostraram a diferença do uso de computador entre as diferentes classes sociais.

A trajetória da educação superior brasileira é determinada pelo contexto socioeconômico, que, desde seu início, privilegiava a formação de integrantes das famílias da elite brasileira. No entanto, ainda se percebe a desigualdade ao acesso ao ensino superior nos aspectos de classe, gênero e etnia/raça (Gisi, 2006), sendo notória a disparidade do perfil dos estudantes de escolas públicas e de escolas particulares. Com objetivo de reparação a esse histórico, foram implementadas políticas afirmativas como a lei n.º 12.711, de 29 de agosto de 2012, que reserva 50% das vagas para estudantes que integralizaram o ensino médio em escolas públicas e vagas para negros, pretos e pardos (Brasil, 2012).

Nesse contexto, existem diferenças de oportunidade não só quanto ao acesso no ensino superior e da disponibilidade de tempo para estudar que alguns alunos apresentaram, mas também em relação às TDIC, que foram observadas com a dificuldade de acesso à *internet* e de acesso ao *notebook* ou computador. Essa diferença no acesso às tecnologias ainda permeiam o sistema educacional brasileiro e também afetou alguns alunos durante o período de pandemia.

Por mais que os roteiros das atividades para uso no WebMO não tenham sido inicialmente propostos com a finalidade de serem usadas especificamente nas aulas não presenciais na pandemia, mas sim presencialmente como uma ferramenta de ensino para estudar conteúdos abstratos, conclui-se que o aplicativo também auxiliou no contexto pandêmico, pois os alunos, ao contrário de só assistirem aulas síncronas não presenciais, puderam fazer uso de um aplicativo e aprender seu funcionamento para visualizarem estruturas estudadas durante o semestre, desenharam as estruturas, verificaram qual átomo liga em qual átomo e até mesmo que existe uma ordem para ligar os átomos e verificar os ângulos de ligação. Dessa forma, o estudo conseguiu, por meio das atividades do aplicativo utilizadas com as

turmas de Agronomia e Engenharia Civil, auxiliar na apropriação e interesse pelos conteúdos abstratos de química que são de difícil entendimento.

Na submissão dos cálculos semiempíricos, os alunos se mostraram curiosos e surpresos com o fato de que o aplicativo usaria aquelas equações que foram apresentadas nas aulas síncronas para calcular as distâncias de ligação, os ângulos de ligação e as energias dos orbitais. Em seguida, eles puderam ver quando o cálculo terminou e, com alguns cliques na tela do celular, conseguiram ver os valores numéricos dos resultados. A partir dos resultados, eles disseram que é muito prática a atividade, já que, no caderno, os átomos das moléculas que desenharam não tinham cor e nem podiam girar.

Observando a participação, as reações e comportamentos dos alunos com e sem o uso do WebMO, foi muito mais fácil explicar sobre os conceitos a partir do aplicativo, porque ele atuou como um diferencial a mais para os alunos fazerem e participarem das simulações e como um auxiliar para a professora ministrar os conteúdos de ligações químicas e orbitais moleculares, que são conceitos que, apenas na linguagem oral das explicações expositivas-dialogadas, não ficam fáceis de demonstrar. Ao proporcionar uma representação visual e interativa, o WebMO possibilitou que os alunos recebessem explicações acerca de conteúdos abstratos. O aplicativo facilitou a demonstração de como os átomos se conectam e ajudou a demonstrar a ideia dos orbitais moleculares e seus formatos.

Foi possível abordar conteúdos como ligações químicas, energia de ionização e orbitais moleculares por meio da simulação computacional em química quântica realizada pelos alunos. Essa abordagem permitiu que eles pudessem estudar esses conceitos de maneira a visualizá-los, sendo viável trabalhar com simulações a partir de programas da Química Computacional e promover o interesse e curiosidade dos alunos.

No primeiro semestre de (2023/1), as Atividades 1 e 2 com o uso do aplicativo do *software* WebMO foram realizadas com turmas de primeiro período de Agronomia, envolvendo um total de 53 alunos, que participaram das atividades e foram denominados de A66 a A118. Pode-se observar na Figura 27 a resposta do aluno A72 à Tabela de comprimentos e ângulos de ligação da Atividade 1.

Figura 27 - Resposta à Atividade 1 enviada pelo um aluno A72.

Comprimentos e ângulos de ligação

Tabela 1 - Moléculas e informações estruturais obtidas nos cálculos teóricos.

Molécula	Comp. Ligação (Å)	Ângulo Lig. (°)	MNDO		AM1		RM1		PM3		PM6		PM7		Experimental	
			Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)	Å	(°)
CH ₃ OCH ₃	C-O	C-O-C	1,439	113,496	1,417	112,926	1,402	113,433	1,406	114,108	1,439	113,496	1,439	113,496	1,416	112,0
CH ₃ SCH ₃	C-S	C-S-C	1,814	102,734	1,806	102,581	1,801	102,526	1,801	102,589	1,821	102,381	1,807	99,1	1,807	99,1
H ₂ O	O-H	H-O-H	0,967	103,533	0,956	103,548	0,956	103,548	0,956	103,548	0,955	103,538	0,958	104,5	0,958	104,5
H ₂ S	H-S	H-S-H	1,340	92,9	1,336	92,9	1,336	92,9	1,336	92,9	1,336	92,9	1,336	92,1	1,336	92,1
H ₂ Se	Se-H	H-Se-H	1,480	91,9	1,477	91,9	1,477	91,9	1,477	91,9	1,477	91,9	1,477	91,0	1,477	91,0
PF ₃	P-F	F-P-F	1,780	97,8	1,780	97,8	1,780	97,8	1,780	97,8	1,780	97,8	1,780	97,8	1,780	97,8
PCl ₃	P-Cl	Cl-P-Cl	2,050	109,471	2,049	109,471	2,049	109,471	2,049	109,471	2,049	109,471	2,049	109,471	2,049	109,471
ZnCl ₂	Zn-Cl	Cl-Zn-Cl	2,240	180	2,240	180	2,240	180	2,240	180	2,240	180	2,240	180	2,240	180

Fonte: Resposta do discente.

Assim como A72, os demais alunos realizaram a seleção de átomos na ordem correta para, posteriormente, verificarem os valores dos ângulos. De forma geral, ocorreram menos erros na ordem de seleção se comparado aos dois semestres de 2021. Entende-se que a atividade realizada, presencialmente, em sala de aula pode ter sido um aspecto importante para esses resultados obtidos, por isso coloca-se os resultados das atividades separadamente daquelas realizadas em 2021, período pandêmico.

Após a pandemia, as atividades puderam ser desenvolvidas presencialmente, no entanto, em 2021, elas não puderam ser desenvolvidas em sala de aula com os alunos e a professora devido às recomendações de não aglomeração e não ficar em espaços pequenos com muitas pessoas. Em 2023, os alunos fizeram as atividades no espaço físico da sala de aula com a presença da professora e dos colegas de turma. Depois de pedir para os alunos baixarem o aplicativo, instalando-o em seus celulares, eles começaram a clicar nas opções. Alguns alunos falaram: “*ah não professora, é em inglês?!*”, expressando uma entonação de descontentamento. Foi respondido que sim, era em inglês, mas que as duas atividades teriam orientação na sala de aula, com a professora falando as traduções das palavras e eles ficaram mais tranquilos.

A partir da Atividade 1, quando surgia alguma dúvida sobre o aplicativo perguntavam na hora, no momento da própria realização da tarefa, também interagiram entre si, um ajudando o outro na sala de aula. Alguns alunos

apresentaram muita facilidade em utilizar o aplicativo e entenderam o inglês, auxiliando outros colegas a utilizá-lo. Cabe ressaltar que essa presença física foi importante, porque cada aluno teve uma dificuldade, uma dúvida, que foi diferente da dos demais, ressaltando a importância da presença do professor e dos pares no processo de ensino-aprendizagem. Na pandemia, durante as aulas síncronas e assíncronas, os alunos relataram não mantiveram contato para pedir ajuda com o aplicativo do *software* WebMO.

Foi observada, então, essa diferença entre o presencial e o não presencial, as interações foram diferentes, devido ao contexto da pandemia, devido às diferentes interações aluno-aluno, aluno-professor e, conseqüentemente, a interação com o aplicativo e a forma de o aluno lidar com o aplicativo, durante as aulas não presenciais até a socialização foi limitada. Percebeu-se que os alunos estavam mais motivados nas aulas presenciais, em relação às aulas não presenciais, que ocorreram por meio do *Classroom*.

Em continuidade, os 53 alunos também responderam um questionário ao término do semestre. Para o item 1 do questionário: *Achei muito difícil a utilização do aplicativo do software WebMO* (Q1), 58,5% (31 alunos) dos estudantes discordaram totalmente e 41,5% (22 alunos) concordaram totalmente com a afirmação, ou seja, mais da metade dos alunos não consideraram muito difícil a utilização do aplicativo, resultado diferente de 2021/1 e 2021/2. Quando se perguntou: *“Quais foram as dificuldades em utilizar o WebMO?”*, 14 alunos escreveram a palavra *“nenhuma”* como resposta, por outro lado, outros alunos escreveram o que pode ser lido no Quadro 13.

Quadro 13 - Respostas dos alunos A67, A71, A72, A77, A79, A92, A97, A110, A111 e A117 ao item Q3 do questionário.

A67.	<i>“Somente no início, pois é em inglês. Mas com o auxílio da professora, consegui entender.”</i>
A71.	<i>“Apenas no começo, mas depois das informações na folha impressa, nenhuma dificuldade.”</i>
A72.	<i>“Com a explicação é fácil de utilizar.”</i>
A77.	<i>“As dificuldades foram somente até o momento de aprender a como manusear o app.”</i>
A79.	<i>“Foi um pouco difícil mas, depois de entender, ficou mais fácil.”</i>
A92.	<i>“Após a explicação da professora ficou fácil de fazer.”</i>
A97.	<i>“Não ocorreu dificuldade.”</i>
A110.	<i>“A professora auxiliou em tudo, zero dificuldades.”</i>
A111.	<i>“No começo não entendi muito bem, porém depois peguei a prática e</i>

	<i>consegui normalmente.”</i>
A117.	<i>“No começo tava muito difícil, mas com a professora ajudando ficou mais fácil.”</i>

Conforme as transcrições das respostas contidas no Quadro 13, é possível verificar que em 2023/1 muitos dos alunos não concordaram que o uso do WebMO é muito difícil e outros, mesmo considerando a atividade difícil no início, após a utilização e explicação do uso do aplicativo, acharam mais fácil. Ressalta-se aqui que, como mencionado, os alunos puderam perguntar suas dúvidas enquanto realizavam as atividades e elas eram respondidas e explicadas no exato momento, segundo afirma A110, *“A professora auxiliou em tudo, zero dificuldades.”*. Apesar de no ano de 2021 as dúvidas também terem sido sanadas quando solicitadas, essas eram feitas nas aulas síncronas e sem a presença física da professora. Durante o ano de 2021, os alunos também puderam perguntar, mas destaca-se que foi uma configuração diferente da que os alunos estavam acostumados, de ir para a instituição de ensino e estudar em sala de aula. Além disso, existe o fato de que, até presencialmente em sala de aula, alguns alunos, mesmo com dúvidas, não perguntam à professora com receio das críticas dos colegas e do julgamento da professora, porém as perguntas e dúvidas dos demais podem contribuir para o aprendizado desses alunos.

Percebeu-se também que realizar a atividade presencialmente permitiu explicar de forma mais imediata aquilo o aluno teve dificuldade, bem como conduzir melhor o roteiro de utilização do aplicativo e ver as expressões dos alunos, já que, nas aulas não presenciais de 2021, os alunos não ligavam as câmeras e outros não tinham a câmera funcionando. Nesse contexto, com a comparação das respostas dos alunos foi possível verificar que a metodologia aplicada apresentou menos erros na Atividade 1 se comparado aos semestres em que a atividade foi realizada via *Classroom*.

Ainda no item 3 do questionário, dentre as dificuldades relatadas em 2023/1 em utilizar o WebMO para realizar a simulação, também está o fato de o idioma do aplicativo ser inglês, A73 disse que a dificuldade foi *“Pelo app estar em inglês.”*, assim como o aluno A74 que relatou: *“Ele é em inglês.”*. A116 disse que queria a *“Tradução em português.”* do aplicativo WebMO. Outras dificuldades escritas nas respostas foram as dos alunos A109 na *“Montagem.”* e A115 *“Na hora de ver os valores.”* Quando perguntado sobre qual a dificuldade da montagem, o aluno A109

explicou que foi quando teve dúvidas para desenhar a estrutura da molécula de CH_3OCH_3 e perguntou para a professora, pois não sabia quem ligava com quem. Quando o aluno apresentou essa dúvida em sala de aula, pediu-se para ele abrir o caderno e encontrar as anotações sobre o modelo VSPER, foi explicado para ele que a ligação era da mesma forma da estrutura feita anteriormente, com a diferença que, quando desenhasse no aplicativo, seriam pequenas esferas de cores diferentes que apareceriam na tela.

Já a dificuldade do aluno A115 foi em como observar os valores de comprimento de ligação e de ângulo de ligação, ele não entendeu onde clicava no aplicativo para ver os valores, de tal modo foi explicado que era na aba *Adjust* (ícone de uma régua) e que, em seguida, clicava nos átomos para então os valores serem exibidos na parte inferior da tela.

No que tange às respostas aos questionamentos dos itens Q4, Q5 e Q6, os resultados mostrados no Quadro 14, mostraram que 90,6% dos 53 estudantes concordaram totalmente ou parcialmente com as afirmações de que utilizar o aplicativo ajudou nas aulas e nos conteúdos de ligações químicas, geometria molecular e orbitais de fronteira.

Quadro 14 - Respostas dos estudantes de Agronomia (2023/1) sobre o uso do software WebMO, em aplicativo do celular.

Agronomia 2023/1	<i>A experiência de usar o aplicativo do software WebMO foi relevante para estudar a disciplina de Química Geral e Analítica. (Q4)</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão de ligações químicas e geometria molecular. (Q5)</i>	<i>A utilização do aplicativo do software WebMO facilitou na compreensão dos conceitos de orbitais HOMO e LUMO. (Q6)</i>
Concordo totalmente.	37 estudantes (69,8%)		
Concordo parcialmente.	11 estudantes (20,8%)		
Não concordo e nem discordo.	2 estudantes (3,77%)		
Discordo totalmente.	2 estudantes (3,77%)		
Discordo parcialmente.	1 estudante (1,89%)		

Fonte: Os autores.

Sobre terem utilizado algum aplicativo de celular de Química, 79,2% dos estudantes disseram nunca ter utilizado, evidenciando que, assim como nos semestres anteriores, a prática do uso de aplicativos como um recurso nas aulas de química não foi uma realidade vista pelos alunos da presente pesquisa. No Quadro 15, estão dispostos extratos do que os alunos escreveram sobre Q8: *“A seguir, deixe seus comentários e sugestões sobre a disciplina. Elogios ou críticas. Quais suas maiores dificuldades com as aulas não presenciais? Acesso à internet? Uso do celular ou computador?”*. Alguns alunos escreveram que o aplicativo os auxiliou a visualizar as ligações e ajudou a entender como se desenha as estruturas das moléculas, como pode ser observado nas respostas dos alunos A68, A72, A80, A105 e A110.

Quadro 15 - Respostas dos alunos A68, A72, A73, A80, A92, A102, A105 e A110 ao item Q8 do questionário.

A68.	<i>“Foi bom para ver melhor.”</i>
A72.	<i>“Ajudou a visualizar como são formadas as ligações.”</i>
A73.	<i>“O app é bastante interessante. Fazer as ligações e entender como funciona.”</i>
A80.	<i>“App ajudou a entender como ela é “montada”.”</i>
A92.	<i>“Olha, na verdade foi a minha primeira experiência e achei muito interessante.”</i>
A102.	<i>“Ajudou bastante na hora da prova.”</i>
A105.	<i>“Ajudou a desenhar as ligações química.”</i>
A110.	<i>“Ajudou mostrando formatos de desenhos.”</i>

Ressalta-se aqui que foi explicado aos alunos que as representações, desenhadas por eles e visualizadas no aplicativo, são modelos que representam as estruturas químicas. Perante ao exposto, dialogou-se com eles que a Química compreende aspectos microscópicos, macroscópicos e modelos representacionais (Johnstone, 1993). Sendo que os modelos são “constructos teóricos da interpretação química da realidade e sua criação está intimamente relacionada com o processo histórico que os desenvolve” (Benite; Benite; Silva Filho, 2011, p.71).

São, portanto, representações da realidade, não são a própria realidade e apresentam limitações. Esses modelos permeiam atividades acadêmicas e de pesquisa e que também possuem papel no ensino-aprendizagem, já que muitos conceitos químicos tratam de conceitos abstratos (Benite; Benite; Silva Filho, 2011). Ressalta-se a importância de dizer aos alunos que os modelos tentam representar, da melhor forma, as estruturas, porém não são a realidade em si, ou seja, são

representações visuais. No caso das simulações, podem ser chamadas de representações virtuais construídas a partir de modelos matemáticos e que possibilitam “ver” o que antes não seria visto. E foram essas visualizações que deixaram os alunos mais interessados, porque, até mesmo no momento de desenhar as estruturas, alguns alunos expressaram interesse e disposição em realizar a atividade: “Olha, tem cor vermelha o oxigênio”; “Dá pra dar zoom”, “Consegui girar a molécula”.

4.2 RESULTADOS E DISCUSSÕES SOBRE O USO DO ANCORAMENTO MOLECULAR

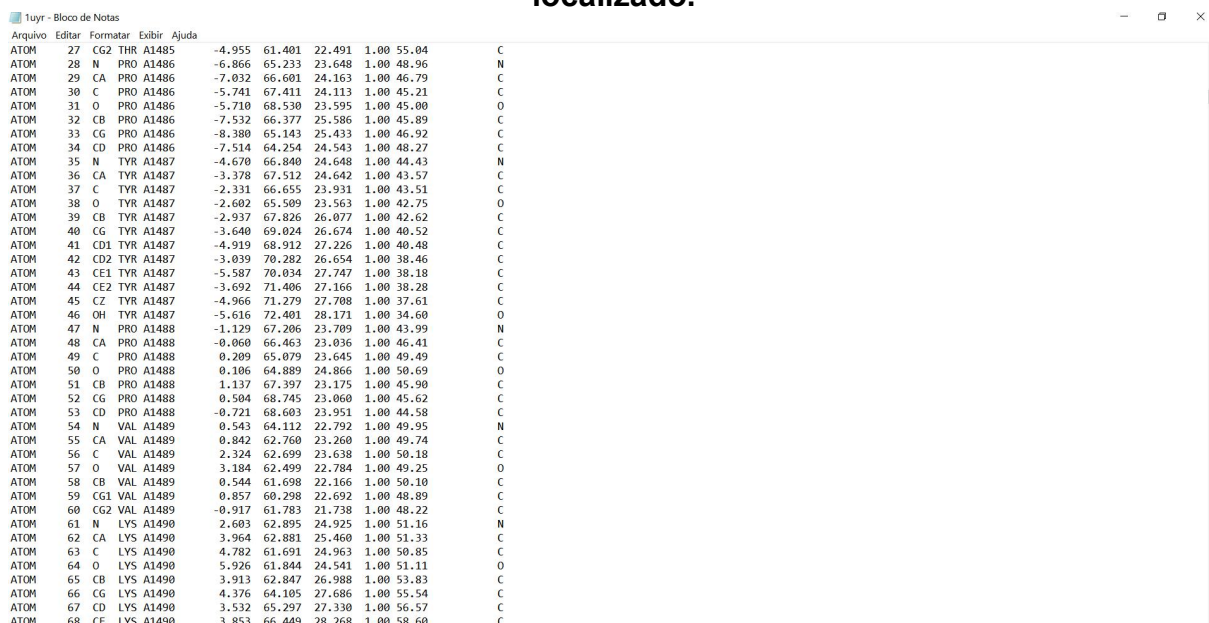
Depois da aula expositiva dialogada, na qual foi explicada a teoria e as equações envolvidas na metodologia do ancoramento molecular, a turma da disciplina de Química Orgânica foi dividida em dois grupos. Cada grupo desenhou a estrutura de um herbicida, sendo um o glifosato e o outro o clefoxidim e salvaram as estruturas com a extensão de arquivo .pdb. Esse arquivo pode ser aberto em um editor de texto, onde se vê uma matriz, que mostra as ligações entre os átomos ou pode ser aberto em programas de química computacional para que suas estruturas sejam visualizadas.

Depois de salvarem os arquivos das estruturas, foram instruídos a abrirem estes arquivos no bloco de notas e no programa AutoDock4. O arquivo da enzima em formato .pdb também foi aberto no bloco de notas (Figura 28) para terem contato com um arquivo de *input* de realização de ancoramento molecular. Em seguida, abriram no programa AutoDock4 e deram prosseguimento à realização do ancoramento.

Os dois grupos realizaram o ancoramento molecular com a enzima acetil-coenzima A carboxilase (ACCase): sendo um que fez o ancoramento da enzima com o herbicida clefoxidim e o outro com a enzima e o herbicida glifosato. Para isso, os discentes executaram o programa AutoDock4 com interface AutoDockTools e selecionaram o arquivo da enzima ACCase para adicionar os hidrogênios polares, as cargas parciais e os tipos de átomos. Em seguida, salvaram a estrutura no formato .pdbqt. No momento em que a enzima apareceu na tela, os alunos ficaram curiosos pela quantidade de átomos que foi mostrada, e perguntaram se cada um daqueles “risquinhos” era um átomo. Eles destacaram “*que é muito bom isso*” (poder

ver a enzima), porque é uma estrutura imensa e poder visualizar uma enzima virtualmente foi uma experiência que não tiveram antes. Essa imagem da enzima pode ser vista nas Figura 9, 11 e 12, apresentadas anteriormente.

Figura 28 - Arquivo da estrutura da enzima aberto no editor de texto bloco de notas, pode-se ver o nome do átomo e em qual resíduo de aminoácido está localizado.



ATOM	ID	NAME	X	Y	Z	OC	RES
ATOM	27	CG2 THR A1485	-4.955	61.401	22.491	1.00	55.04
ATOM	28	N PRO A1486	-6.866	65.233	23.648	1.00	48.96
ATOM	29	CA PRO A1486	-7.032	66.601	24.163	1.00	46.79
ATOM	30	C PRO A1486	-5.741	67.411	24.113	1.00	45.21
ATOM	31	O PRO A1486	-5.710	68.530	23.595	1.00	45.00
ATOM	32	CB PRO A1486	-7.532	66.377	25.586	1.00	45.89
ATOM	33	CG PRO A1486	-8.380	65.143	25.433	1.00	46.92
ATOM	34	CD PRO A1486	-7.514	64.254	24.543	1.00	48.27
ATOM	35	N TYR A1487	-4.670	66.840	24.648	1.00	44.43
ATOM	36	CA TYR A1487	-3.378	67.512	24.642	1.00	43.57
ATOM	37	C TYR A1487	-2.331	66.655	23.931	1.00	43.51
ATOM	38	O TYR A1487	-2.602	65.509	23.563	1.00	42.75
ATOM	39	CB TYR A1487	-2.937	67.826	26.077	1.00	42.62
ATOM	40	CG TYR A1487	-3.640	69.024	26.674	1.00	40.52
ATOM	41	CD1 TYR A1487	-4.919	68.912	27.226	1.00	40.48
ATOM	42	CD2 TYR A1487	-3.039	70.282	26.654	1.00	38.46
ATOM	43	CE1 TYR A1487	-5.587	70.034	27.747	1.00	38.18
ATOM	44	CE2 TYR A1487	-3.692	71.406	27.166	1.00	38.28
ATOM	45	CZ TYR A1487	-4.966	71.279	27.708	1.00	37.61
ATOM	46	OH TYR A1487	-5.616	72.401	28.171	1.00	34.60
ATOM	47	N PRO A1488	-1.129	67.206	23.709	1.00	43.99
ATOM	48	CA PRO A1488	-0.060	66.463	23.036	1.00	46.41
ATOM	49	C PRO A1488	0.209	65.079	23.645	1.00	49.49
ATOM	50	O PRO A1488	0.106	64.889	24.866	1.00	50.69
ATOM	51	CB PRO A1488	1.137	67.397	23.175	1.00	45.90
ATOM	52	CG PRO A1488	0.504	68.745	23.060	1.00	45.62
ATOM	53	CD PRO A1488	-0.721	68.603	23.951	1.00	44.58
ATOM	54	N VAL A1489	0.543	64.112	22.792	1.00	49.95
ATOM	55	CA VAL A1489	0.842	62.760	23.260	1.00	49.74
ATOM	56	C VAL A1489	2.324	62.699	23.638	1.00	50.18
ATOM	57	O VAL A1489	3.184	62.499	22.784	1.00	49.25
ATOM	58	CB VAL A1489	0.544	61.698	22.166	1.00	50.10
ATOM	59	CG1 VAL A1489	0.857	60.298	22.692	1.00	48.89
ATOM	60	CG2 VAL A1489	-0.917	61.783	21.738	1.00	48.22
ATOM	61	N LYS A1490	2.603	62.895	24.925	1.00	51.16
ATOM	62	CA LYS A1490	3.964	62.881	25.460	1.00	51.33
ATOM	63	C LYS A1490	4.782	61.691	24.963	1.00	50.85
ATOM	64	O LYS A1490	5.926	61.844	24.541	1.00	51.11
ATOM	65	CB LYS A1490	3.913	62.847	26.988	1.00	53.83
ATOM	66	CG LYS A1490	4.376	64.105	27.686	1.00	55.54
ATOM	67	CD LYS A1490	3.532	65.297	27.330	1.00	56.57
ATOM	68	CE LYS A1490	3.853	66.449	28.268	1.00	58.60

Fonte: Os autores a partir do bloco de notas.

Posteriormente, os estudantes abriram a estrutura do herbicida clefoxidim e conseguiram identificar que era a estrutura do herbicida que tinham desenhado. Ao inserir a estrutura da ACCase e do herbicida, dialogou-se com eles que é a partir dessas duas estruturas que se faz o ancoramento molecular, isso já havia sido explicado em aula expositiva. Após as duas estruturas estarem dispostas no programa AutoDock4, os alunos abriram a caixa de grade para posicioná-la no sítio ativo da enzima.

Enquanto os alunos colocavam a caixa na região do sítio ativo, conversou-se que o local onde ela estava posicionada é o local no qual acontecerá o cálculo do ancoramento molecular. Depois disso, explicou-se para a turma de Química Orgânica que, a partir disso, é que foram gerados os mapas de grade, arquivos de texto que possuem as informações dos átomos do herbicida e dos átomos presentes nessa região do sítio ativo da enzima. Esses arquivos servem para calcular as interações intermoleculares, que ocorrem entre o herbicida e o sítio ativo da enzima.

O grupo comentou que é muito inteligente um programa poder calcular essas interações utilizando as equações que lhes foram explicadas.

O outro grupo realizou as mesmas etapas da simulação por ancoramento molecular, só que com o herbicida glifosato. Nesse momento, os alunos foram perguntados “*Vocês acham que haverá alguma diferença nos valores de energia das melhores conformações dos herbicidas clefoxidim e glifosato?*” Responderam que sim, e o grupo 2 falou que o glifosato não é inibidor da ACCase e, por isso, teria diferença nos valores das energias de interação, ressaltando que os resultados deles provavelmente teriam diferença com o do grupo que ficou com o ancoramento do clefoxidim e a ACCase.

Em continuidade às etapas, os discente selecionaram os herbicidas como o ligante (.pdbqt) e a enzima ACCase (.pdbqt) como o receptor e selecionaram primeiro o *Run AutoGrid* e depois o *Run AutoDock*. A partir dessa etapa, o AutoDock4 começou a verificar as interações intermoleculares entre os dois e as melhores conformações em que a estrutura do herbicida faz essas interações. Com isso, as melhores conformações dos herbicidas (com as interações intermoleculares e que liberaram maior quantidade de energia) foram calculadas pelo AutoDock4. Na presente pesquisa, foram dez melhores conformações de cada herbicida, que consistiram no resultado do ancoramento molecular. Esse resultado foi dado em um arquivo de texto com a extensão .dlg e que pôde ser visualizado no programa AutoDock4.

Logo após, os alunos abriram esse arquivo .dlg no bloco de notas, no qual estava o resultado do ancoramento com os valores de energia liberada a partir da interação intermolecular do herbicida clefoxidim e do herbicida glifosato. Depois de aberto o arquivo, os dois grupos verificaram o valor de energia livre de interação e o valor da constante de inibição para cada uma das dez conformações do clefoxidim e do glifosato. Em seguida, abriram o mesmo arquivo no AutoDock4 para visualizarem as dez conformações de cada herbicida. Nessa etapa, os alunos verificaram a molécula do herbicida se movimentando e mudando sua conformação em cada uma das dez estruturas, o que lhes chamou a atenção, deixando-os motivados para a aula.

Isso permitiu que pudessem visualizar as estruturas dos herbicidas, as quais tinham sido já estudadas na disciplina, localizadas no sítio ativo da ACCase e cada uma das dez conformações. Essa visualização auxiliou no ensino-aprendizagem, na

explicação sobre as estruturas dos herbicidas e suas aplicações dentro da Agronomia, pois o funcionamento de um herbicida, dentro de uma enzima, não pode ser visto a olho nu. O uso do AutoDock foi um facilitador para a explicação da estrutura dos herbicidas e de seu funcionamento como um composto que atua nas plantas daninhas.

No trabalho de Teruya *et al.* (2013), os autores falam sobre esse aspecto da importância da visualização, sendo que os três conteúdos mais mencionados em pesquisas da área de visualização no Ensino de Química foram a estrutura da matéria, propriedades moleculares e bioquímica. Conteúdos que envolvem, por exemplo, a interação de um composto com uma enzima estão nesse contexto, como o caso do presente trabalho, dentro da disciplina de Química Orgânica, tendo em vista que os alunos visualizaram estruturas de herbicidas e sua interação com a macromolécula ACCase. No entanto, para além da visualização, os 39 alunos que participaram desse presente estudo realizaram também a simulação computacional que lhes permitiu a visualização final. Retoma-se aqui as denominações que foram dadas aos alunos de Agronomia da disciplina de Química Orgânica que participaram do ancoramento: D1 a D39.

Dando seguimento, ao término de dois ancoramentos, tanto com o clefoxidim quanto com o glifosato, os alunos de cada grupo ranquearam as dez melhores conformações resultantes de cada herbicida complexado à enzima, de acordo com o menor valor de energia. Estes valores das energias livres e dos valores de energia de interação foram dispostos pelos alunos em uma tabela no *Word*, exposta a seguir (Tabela 3). Durante esse momento, os alunos dos grupos conversaram entre si, e comentaram que os valores de energia das conformações do herbicida clefoxidim foram valores melhores, comparados ao do grupo que fez com o glifosato.

Tabela 3 - Resultados das estimativas de energia de ligação livre de interação para os complexos ACCase-clefoxidim e ACCase-glifosato após o ancoramento molecular.

Herbicida ancorado com a enzima ACCase			
clefoxidim		Glifosato	
Valor da energia livre de interação (kcal/mol)	Constante de inibição, K_i nmol.L ⁻¹	Valor da energia livre de interação (kcal/mol)	Constante de inibição, K_i
-9,22	173,21 nmol.L ⁻¹	-4,23	790,93 μ mol.L ⁻¹

-9,22	174,84 nmol.L ⁻¹	-3,97	1,23 mmol.L ⁻¹
-5,34	121,65 µmol.L ⁻¹	-3,66	2,08 mmol.L ⁻¹
-5,21	151,24 µmol.L ⁻¹	-3,62	2,22 mmol.L ⁻¹
-3,88	1,44 mmol.L ⁻¹	-3,59	2,32 mmol.L ⁻¹
-3,76	1,76 mmol.L ⁻¹	-3,54	2,53 mmol.L ⁻¹
-2,93	7,16 mmol.L ⁻¹	-3,47	2,84 mmol.L ⁻¹
-2,22	23,74 mmol.L ⁻¹	-3,37	3,36 mmol.L ⁻¹
+4,65	0	-3,28	3,96 mmol.L ⁻¹
+5,92	0	-2,94	7,00 mmol.L ⁻¹

Fonte: Resultados obtidos a partir do ancoramento realizado pelos discentes.

Conforme pode ser observado na Tabela 3, os discentes colocaram as 10 melhores conformações do clefoxidim e do glifosato ancorado à enzima ACCase de acordo com os valores de energia, do maior valor de energia liberada para a menor energia liberada. Conversou-se, então, que se pode observar os valores de energia livre de interação mais favoráveis para o clefoxidim do que para o glifosato. Eles então comentaram que *“realmente a atração do clefoxidim e a ACCase é melhor do que a atração do glifosato”*, ou seja, a energia de Gibbs foi melhor para o ancoramento feito entre ACCase/clefoxidim, já que o glifosato não é um herbicida específico da ACCase.

Dialogou-se com a turma que os valores de energia livre de interação menos favoráveis para o glifosato ocorrem, porque o glifosato é um inibidor da enzima 5-enolpiruvilshiquimato-3- fosfato sintase (EPSPs), enzima que participa da síntese dos aminoácidos aromáticos fenilalanina, tirosina e triptofano e desempenha sua função no cloroplasto da planta (Kruse; Trezzi; Vidal, 2000), sendo assim, não é inibidor da ACCase. Os alunos comentaram, ainda, que os valores de energia são menores e melhores para o clefoxidim, pois este é um herbicida da classe dos fops e faz interações intermoleculares específicas com a enzima ACCase. Nesse momento, D8 comentou que é *“por isso que precisa de menor quantidade do herbicida presente no sítio ativo”* para que ocorra a inibição da ACCase.

Essa fala de D8 se refere aos valores da constante de inibição, que também foi um dado dos resultados do ancoramento molecular. Os valores de constante de inibição são mostrados na Tabela 3, na coluna ao lado dos valores de energia livre de interação. Nessa coluna, pode-se ver que, quanto menor o valor numérico da energia (quanto mais negativo) menor é o valor da concentração da constante de inibição. Na sequência, explicou-se que a conformação do clefoxidim que liberou mais energia ao interagir com a enzima ACCase na simulação computacional, -9,22 kcal/mol, foi aquela com a menor constante de inibição de 173,21 nmol.L⁻¹. Comparando-se à conformação estrutural do glifosato, que teve a energia de interação mais favorável, a constante de inibição foi da ordem de micromol, ou seja uma concentração maior, 790,93 µmol.L⁻¹, assim como D8 comentou. Teoricamente, pelo cálculo do ancoramento molecular, haveria necessidade de menor quantidade do herbicida clefoxidim para ocorrer as interações intermoleculares que inibem a enzima na região do seu sítio ativo.

Esses conhecimentos sobre a inibição da enzima ACCase, os melhores valores de energia livre de interação e as interações melhores com o clefoxidim em relação ao glifosato não são inéditos, bem como o entendimento de que herbicidas, que são inibidores específicos apresentam interações intermoleculares específicas. Esse conhecimento não foi descoberto com a simulação dos alunos, eles a fizeram em um processo do uso da metodologia do ancoramento voltado para o ensino. Pesquisadores (Xiang *et al.*, 2009) já realizaram estudos sobre essa enzima, mas não com o intuito de aplicação no ensino de Química em sala de aula, e sim para o desenvolvimento de novos compostos e de nanobiossensores. Contudo, pode-se fazer uma Transposição Didática desses conhecimentos produzidos por meio da química computacional para ensinar conceitos químicos a alunos de graduação, permitindo que eles possam visualizá-los.

Sob essa ótica, esses saberes dos pesquisadores e que são descritos pela química computacional, sobre o fato de que os herbicidas “fops” (ariloxifenoxipropionatos) e “dims” (ciclohexanodionas) fazem interações específicas, podem ser transpostos e utilizados para preparar metodologias também em sala de aula, mas não apenas para falar em uma turma de Agronomia que a ACCase e os herbicidas possuem interações intermoleculares, mas para que também os alunos façam essas simulações, que as conheçam e que vejam como é seu funcionamento.

Na realização das atividades com a turma de segundo período da Agronomia, os alunos se mostraram participativos e interessados em usar o programa AutoDock4 e foi possível que eles fizessem algo que é feito na academia por pesquisadores. Realizar as mesmas simulações em sala de aula permitiu que eles participassem de um processo de uma simulação computacional, objetivando auxiliar seu processo de ensino-aprendizado,

Depois de os estudantes organizarem os dados de energia de interação e constante de inibição, o que pode ser visualizado na Tabela 3, ranqueando os valores de energia livre, foram apresentados para eles também outros dados (Tabela 4) com valores para outros herbicidas dims e fops, bem como de herbicidas não específicos da ACCase, a fim de que se expandisse a explicação sobre a relação entre energia de interação e herbicidas específicos e não específicos.

Tabela 4 - Estimativas de energia de ligação para os complexos formados com a ACCase, a partir da estrutura cristalográfica.

Classes	Herbicidas	ACCase (<i>crist.</i>)*	
		Energia livre do ancoramento (kcal/mol)	Constante de inibição, K_i
dims	clefoxidim (ânion)	-10,23	31,55 nmol.L ⁻¹
	clefoxidim	-9,22	173,21 nmol.L ⁻¹
	cletodim	-8,47	617,20 nmol.L ⁻¹
fops	clodinafop	-7,62	2,58 µmol.L ⁻¹
	clodinafop-propargil	-7,20	5,31 µmol.L ⁻¹
	propaquizafop	-7,32	4,31 µmol.L ⁻¹
	quizalofop	-7,63	2,55 µmol.L ⁻¹
não específicos	bispiribac	-5,43	103,96 µmol.L ⁻¹
	bispiribac (ânion)	-4,95	236,58 µmol.L ⁻¹
	etoxisulfuron	-6,96	7,96 µmol.L ⁻¹
	glifosato	-4,23	790,93 µmol.L ⁻¹
	imazaquin	-7,42	3,62 µmol.L ⁻¹
	metsulfuron	-7,03	7,04 µmol.L ⁻¹
	metsulfuron-metil	-7,10	6,30 µmol.L ⁻¹
	oxasulfuron	-7,66	2,43 µmol.L ⁻¹
	piritiobac	-5,84	52,48 µmol.L ⁻¹
	piritiobac (ânion)	-6,31	23,85 µmol.L ⁻¹

Fonte: (MENDES, 2014)

Muitos alunos comentaram que conhecem alguns desses herbicidas da tabela, trabalham com eles em campo e não imaginavam que poderiam ver a estrutura de um herbicida com movimento, cores e, ainda mais, interagindo com uma enzima,

nem que iriam poder visualizar, computacionalmente, esses herbicidas dentro de uma enzima e ver como eles atuam na planta daninha. Em conversa com a turma sobre a metodologia do ancoramento molecular, foi perguntado se eles conheciam essa metodologia, todos disseram que *“nunca tinham ouvido falar disso”* e que deveria *“ser muito difícil esses estudos dos cientistas”*. No entanto, conforme as explicações e as etapas do ancoramento foram sendo realizadas, os alunos foram percebendo que não é algo completamente fora do alcance da compreensão deles. Também conseguiram reproduzir e entender essas simulações computacionais, bem como entender melhor os conceitos de química.

A partir da Tabela 4, foi discutido com os alunos que, da mesma forma que o herbicida clefoxidim apresentou energia livre mais favorável para as interações intermoleculares com a enzima ACCase, os herbicidas cletodim, clodinafop, clodinafop-propargil, propaquizafop e quizalofop também apresentam, justamente por serem herbicidas que inibem especificamente a enzima da ACCase, quando comparado com os herbicidas não específicos: bispiribac, etoxisulfuron, glifosato, imazaquin, metsulfuron, metsulfuron-metil, oxasulfuron, piritiobac.

Nesse contexto, foi explicado para a turma do segundo período que, quando se diz que os herbicidas são específicos, é porque eles possuem estruturas químicas que apresentam átomos e grupos químicos que interagem mais efetivamente com os resíduos de aminoácidos que estão presentes na região do sítio ativo da enzima. A intensidade da força dessas interações intermoleculares atua como um elemento de identificação para saber se o herbicida é específico ou não. E isso sucede, porque existem interações específicas no sítio ativo da ACCase que ocorrem com dims e fops, mas que não ocorrem com os herbicidas que são não específicos, como o glifosato.

Por conseguinte, essas interações intermoleculares da ACCase com seus herbicidas inibidores foram apresentadas aos estudantes: ligação de hidrogênio com os átomos de oxigênio e nitrogênio do grupo amida dos resíduos de aminoácidos GLY-1998, ILE-1735, ALA-1627 e VAL-1967; grupos propil ou etil da parte oxima dos herbicidas da classe dos dims se localizarem na região hidrofóbica (VAL-2001, SER-1708, LEU-1705, Val-2024 e ALA-1627) do sítio ativo da ACCase; interações do tipo CH- π ou π - π com o resíduo de aminoácido TYR-1738 da enzima (Mendes, 2014). Xiang e colaboradores (2009) também encontraram o grupo alquila do tepaloxymid em uma região hidrofóbica do sítio ativo da ACCase, região composta

pelos resíduos ALA-1627, LEU-1705, SER-1708, VAL-2001 e VAL-2024 (Xiang *et al.*, 2009).

Ao visualizarem o herbicida no sítio ativo, os alunos puderam verificar essas interações intermoleculares específicas que ocorrem no complexo entre o herbicida e a enzima. Nesse contexto, foi possível retomar o conteúdo de Interações Intermoleculares que esses alunos estudaram no 1º período na disciplina de Química Geral e Analítica, pois as interações que resultaram nas menores energias de interação incluíram ligações de dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido, ligações de hidrogênio e interações do tipo π - π , e foi preciso relembrar esses conceitos com os alunos.

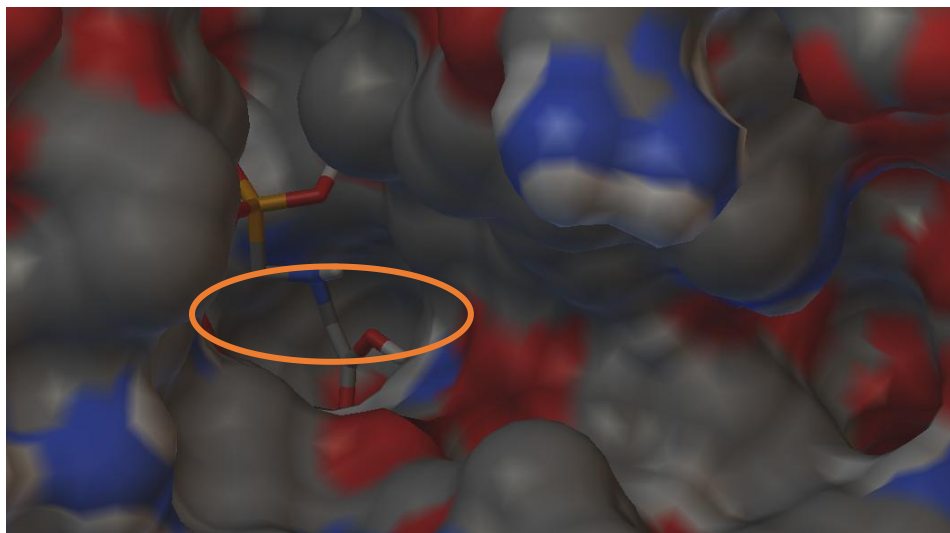
Vale ressaltar que as interações entre espécies químicas apolares ou entre regiões de moléculas e macromoléculas apolares incluem interações intermoleculares por forças de dispersão. Na Figura 29 (a), pode-se visualizar essas interações.

Figura 29 - Representação dos herbicidas clefoxidim (a) e o glifosato (b) no sítio ativo da enzima ACCase. Acima: complexo ACCase-clefoxidim. Abaixo: complexo ACCase-glifosato. Em laranja destaque para a região hidrofóbica do sítio ativo da enzima na qual o grupo propil do clefoxidim interage. Para o glifosato não há interação nessa região.

(a)



(b)



Fonte: AutoDockTools (Morris *et al.*, 2009b).

Em (a) da Figura 29 está representada a interação do grupo alquila do herbicida clefoxidim com a região hidrofóbica do sítio ativo (VAL-2001, SER-1708, LEU-1705, VAL-2024 e ALA-1627), em destaque de cor laranja, essa região apresenta caráter apolar. Acredita-se que esta seja uma das interações principais de reconhecimento de classes específicas de inibidores da ACCase e um elemento importante de inibição da enzima (Xiang *et al.*, 2009; Mendes, 2014). Em (b) o glifosato não apresenta grupamento alquila que interage hidrofobicamente nessa região da ACCase.

Conforme pode ser observado em (b), não ocorre a interação da estrutura do glifosato com a região do sítio ativo, que possui os resíduos de aminoácidos VAL-2001, SER-1708, LEU-1705, VAL-2024 e ALA-1627 da enzima ACCase, como destacado em cor laranja na Figura 29 (b). Foi explicado aos alunos que interações intermoleculares como essas são consideradas elementos de reconhecimento entre uma enzima e seu ligante, como em um modelo de chave na fechadura. Se a interação estiver presente ocorre a inibição de forma efetiva, por isso a interação ocorre apenas com o herbicida específico clefoxidim.

De acordo com o que foi explicado em 2.4 da seção 2, a interação específica que ocorre entre uma molécula e uma enzima é dada pelo modelo de chave-fechadura, esse conceito foi conversado em sala de aula para explicar como o herbicida inibe a enzima em conjunto com as interações que ocorrem. Mostrou-se, no quadro, que existem três tipos de “chaves” que podem interagir com o sítio ativo,

a primeira delas pode ser entendida como uma chave original: o agonista natural, ela pode ser uma molécula endógena ou um substrato natural, que quando interage com o sítio ativo desencadeia uma resposta biológica correspondente com a função daquela enzima. O segundo tipo de chave é uma modificada, ela tem uma estrutura molecular e propriedades similares que permitem o acesso ao sítio ativo e leve a enzima a ter a resposta biológica, pode ser uma molécula natural ou sintética. O último tipo de chave corresponde a uma chave falsa, ela também tem estrutura e propriedades que permitem entrar e interagir no sítio ativo, porém não ativa a função biológica da enzima, mas sim a bloqueia fazendo com que deixe de funcionar como o esperado, esta chave pode ser um ligante endógeno ou sintético (Barreiro; Fraga, 2015).

Assim, foi explicado que o herbicida é a chave falsa que se liga ao espaço da fechadura, o sítio ativo da enzima ACCase, e devido às interações específicas ela bloqueia o funcionamento da enzima e não a deixa cumprir seu papel biológico de converter acetil-CoA para a molécula de malonil-CoA, este último necessário para a síntese de ácidos graxos nas plantas daninhas. Toda essa teorização não é inédita, já é conhecida pelos professores e pesquisadores, contudo foi necessário explicar esses conceitos aos alunos para que pudessem compreender melhor sobre os resultados do ancoramento molecular. O próprio ancoramento molecular não é uma metodologia computacional inédita, mas foi utilizado neste trabalho como uma ferramenta de ensino para auxiliar no estudo de conteúdos químicos.

Para além de só utilizar imagens prontas do herbicida com a enzima, o fato de os alunos terem realizado os passos do ancoramento molecular, já atua como uma instrução, foi uma forma de os alunos interpretarem e entenderem o que estavam visualizando, pois eles mesmos realizaram as etapas da simulação que permitiram um melhor entendimento entre o microscópico e o macroscópico, como foi o caso do ancoramento molecular entre a ACCase e os herbicidas.

No que tange a visualizações moleculares, que são geradas por computador, Jonas e Kelly (2015) afirmam que:

Os químicos agora estudam e comunicam conceitos químicos explorando visualizações moleculares geradas por computador. Quando os químicos visualizam uma estrutura molecular, tendemos a refletir metacognitivamente sobre como a compreensão se encaixa tanto em modelos em movimento quanto em modelos estáticos. Como o modelo se encaixa ou funciona com nossa compreensão, então, influencia como usamos o modelo em nossa instrução. Os primeiros designers de visualizações costumavam construir animações com base

em sua compreensão e percepções. No entanto, os aprendizes que visualizavam essas animações tinham dificuldades em conectar o nível molecular ao visível e podiam ter experimentado sobrecarga em sua memória de trabalho; ou seja, os aprendizes eram apresentados a informações demais ao mesmo tempo. Pesquisadores indicaram a necessidade de suporte instrucional adicional para estudantes que utilizam animações do nível particulado da matéria. (Jones; Kelly, 2015 p.133).

Nessa perspectiva, as representações geradas por computador são baseadas em modelos teóricos e, quando os químicos veem essas representações, refletem sobre como seu conhecimento se encaixa tanto nos modelos que apresentam moléculas com movimentos, como naqueles que são representações paradas e estáticas. Como as representações são baseadas na compreensão dos primeiros químicos, muitos alunos tinham dificuldade de compreender e de conectar essas representações com o nível macromolecular. No presente trabalho, percebeu-se que os próprios alunos, desenvolvendo o ancoramento com o suporte da professora, puderam compreender as representações visuais, porque no decorrer do ancoramento, eles já viram as representações separadas antes do resultado final do ancoramento e se mostraram participativos e curiosos. Sendo assim, desenvolver a simulação já foi uma instrução sobre as representações de estruturas não visíveis a olho nu.

Após explicar e mostrar as interações intermoleculares específicas para os alunos e de dialogar sobre o modelo chave-fechadura e os tipos de ligantes, foi entregue a cada um uma atividade com duas questões a serem respondidas em folha separada e entregue à professora. Na aula seguinte, a atividade foi corrigida e discutida em sala. A primeira questão foi: *“De acordo com as aulas e a realização do ancoramento molecular, escreva como o ancoramento molecular pode auxiliar no entendimento da inibição de uma enzima”*. Para essa questão, foi possível agrupar respostas em três contextos: 1. respostas que descreveram a definição ou função do que é o ancoramento; 2. respostas que falaram sobre a visualização; 3. respostas que abordaram aspectos químicos das interações intermoleculares.

Dentro desse contexto, D3 e D15 escreveram uma resposta que forneceram uma definição do que é o ancoramento, como pode ser lido a seguir no Quadro 16, a partir das transcrições das respostas dos alunos.

Quadro 16 - Respostas dos alunos D3 e D15 à questão 1).

D3.	<i>“O ancoramento molecular é uma ferramenta usada para encontrar a melhor forma do herbicida se encaixar na enzima.”</i>
-----	---

D15.	<i>“Ele é uma metodologia dentro do programa de computador com a finalidade de nos fazer entender como o herbicida age na enzima.”</i>
------	--

Ao explicar que o ancoramento molecular é uma ferramenta e uma metodologia para *“encontrar a melhor forma do herbicida se encaixar na enzima”* e tem a *“finalidade de nos fazer entender como o herbicida atua na enzima”*, os alunos encontraram uma forma de explicar como o ancoramento pode auxiliar a entender a inibição de uma enzima a partir do que é o ancoramento. A partir dessas definições, pode-se deduzir que realmente foi uma metodologia computacional que mostra como o herbicida se encaixou no sítio ativo. De modo que, por essa metodologia/ferramenta, encontra-se a melhor forma ou a melhor conformação estrutural do herbicida, conseqüentemente, auxiliou na compreensão da inibição.

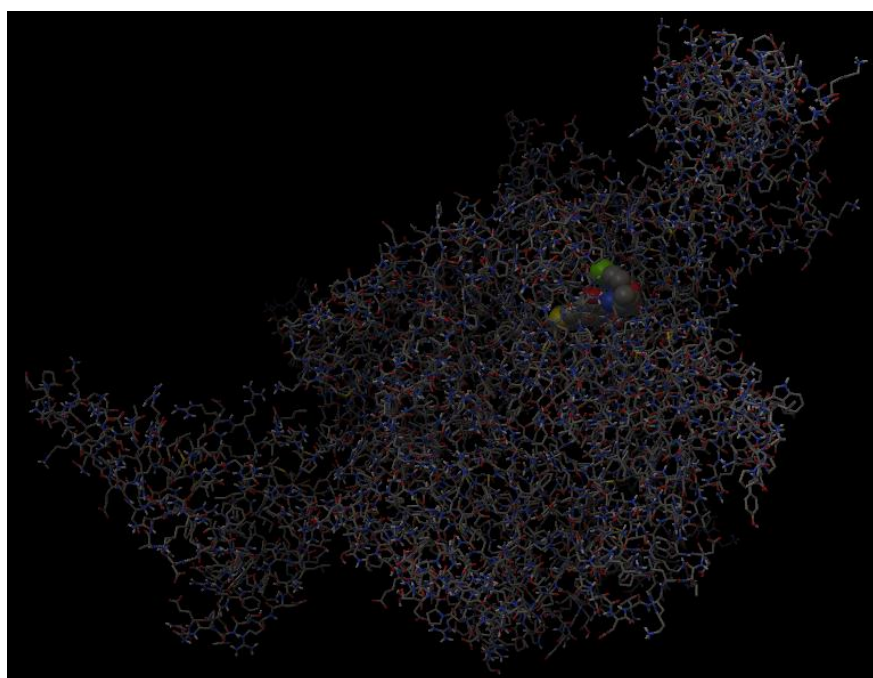
Além disso, foi possível encontrar respostas dos alunos que escreveram suas respostas à primeira questão dizendo que o ancoramento molecular auxilia no entendimento da inibição, porque permite a visualização de como o herbicida se liga à enzima. D13 escreveu que *“não tem como ver as interações a olho nu”*, no programa de ancoramento molecular as interações intermoleculares são calculadas *“para explicar como será o funcionamento do herbicida na enzima”*.

Como o estudo da química perpassa pelos níveis macroscópico, microscópico e o representacional, e considerando que o microscópio é um dos mais difíceis de ser entendido devido ao fato de não podermos vê-lo a olho nu, a visualização dos resultados do ancoramento molecular apresentou-se como uma ferramenta potencial no processo de estudo dos fenômenos microscópicos da química, que estão envolvidos no processo de inibição da enzima ACCase pelo herbicida clefoxidim. Podemos, assim, com a realização do ancoramento molecular em disciplinas de Química ter uma ferramenta para realização de simulação pelos discentes, além de visualização de imagens de conceitos químicos.

Em consonância com Joly (1996), as imagens são representações de coisas do mundo real. Assim, com a realização do ancoramento molecular, temos imagens do complexo formado entre a enzima e o herbicida e das interações que ocorrem entre eles. Os alunos visualizaram as imagens de cada conformação do herbicida clefoxidim e do herbicida glifosato, como apresentado a seguir na Figura 30, que mostra a representação da conformação que fez as melhores interações com o sítio ativo da enzima ACCse. Esse momento de visualizar os resultados foi o que mais

chamou a atenção dos alunos, além disso, o AutoDock permite que seja possível selecionar o tipo de representação e o tipo de cores, de modo que os dois grupos modificaram e observaram cada uma dessas representações. Na Figura 30, está uma representação da enzima por linhas e o herbicida em esferas. A cor cinza representando os carbonos, vermelho os oxigênios, azul os nitrogênios, branco representa os hidrogênios, verde o cloro e amarelo os enxofres.

Figura 30 - Enzima ACCase com o herbicida clefoxidim (-9,22 kcal/mol) em seu sítio ativo.



Fonte: AutoDockTools.

Posto isso, a temática visualização no ensino de Química é importante para o estudo da disciplina, porque essa ciência compreende tanto fenômenos que são observáveis macroscopicamente, quanto aqueles que não são. Essa impossibilidade de enxergar acaba por tornar processos submicroscópicos difíceis para os alunos entenderem. Assim, os trabalhos que envolvem o estudo de representações visuais trazem a possibilidade de ferramentas que atuam como recursos didáticos para a visualização de conteúdos químicos com o objetivo de auxiliar o discente a estudar os conceitos que envolvem contextos não observáveis (Teruya *et al.*, 2013).

Nas respostas dos estudantes (Quadro 17), eles ressaltaram a importância da visualização, dizendo que o ancoramento auxiliou na “*visualização do sítio ativo*” (D28); “*por ele proporcionar visualização dos átomos existentes e nos mostra o local*

onde a molécula do herbicida tem ação eficaz na enzima ACCase” (D33) e “O uso dela permite a visualização da ligação do inibidor e enzima do nível atômico” (D35) reiterando o papel que a visualização possui no estudo de química.

Quadro 17 - Respostas dos alunos D1, D11, D13, D28, D33 e D35 à questão 1.

D1.	<i>“O ancoramento com a ajuda de um programa auxilia em mostrar como ocorre a “penetração” da molécula de herbicida na molécula da planta, mostra onde ela se encaixa para matar a planta.”</i>
D11.	<i>“O ancoramento molecular auxilia na visualização do lugar correto que o herbicida precisa entrar para atuar na enzima.”</i>
D13.	<i>“Não tem como ver as interações intermoleculares a olho nu, então é usado um programa computacional, que quando lançada a estrutura que deseja ser inibida é calculado essas interações para explicar como será o funcionamento do herbicida na enzima.”</i>
D28.	<i>“O ancoramento molecular auxilia pelo fato de ele ajudar na visualização do sítio ativo.”</i>
D33.	<i>“O ancoramento molecular auxilia o entendimento por ele proporcionar visualização dos átomos existentes e nos mostra o local onde a molécula do herbicida tem ação eficaz na enzima ACCase.”</i>
D35.	<i>“É a técnica de modelagem molecular que auxilia no entendimento do aspecto de inibição da enzima. O uso dela permite a visualização da ligação do inibidor e enzima do nível atômico e determina as interações químicas envolvidas.”</i>

Assim, a utilização do aplicativo do software WebMO, a do AutoDock também pode ser entendida como um RDD para o ensino de Química, e Leite (2019) afirma que os RDDs “são ferramentas que permitem a passagem de diversas formas de linguagem (texto, imagens, sons, etc.), facilitando uma construção do conhecimento por parte do aprendiz” (Leite, 2019, p. 330).

Em outras respostas, o aluno D31 respondeu a questão descrevendo que o ancoramento molecular auxilia a entender a inibição enzimática porque é uma técnica de modelagem molecular que ajuda a entender a parte química da inibição de uma enzima. D31: *“O docking molecular é uma técnica de modelagem molecular que pode auxiliar no entendimento de aspectos químicos da inibição de uma enzima.”* Isso porque o ancoramento faz simulações e cálculos e que, posteriormente, possibilitam a entender quais as interações intermoleculares estão presentes.

O aluno D5 além de dizer que o ancoramento é uma técnica de modelagem molecular que faz simulação e cálculos, também fala do aspecto de ser um fenômeno que não se pode ver a olho nu: *“Porque esse programa computacional*

quando é lançado os herbicidas e as estruturas dos ativos, ele cria uma simulação e calcula, através destes cálculos é possível saber e entender sobre as interações intermoleculares e observar como funciona o processo da inibição da enzima, pois não se vê a olho nu. Em mais uma resposta, vê-se a importância que os alunos verificaram na parte da visualização.

O aluno D31 diz que, com o ancoramento, é possível o auxílio “*no entendimento de aspectos químicos da inibição de uma enzima*”. A metodologia de ancoramento molecular ajuda a ter uma nova forma de olhar os aspectos químicos, como as interações intermoleculares que são importantes no modelo chave e fechadura. Em outro estudo (Silva *et al.*, 2023), os autores também utilizaram a metodologia do ancoramento molecular para compreender essas interações na disciplina de Química Farmacêutica do curso de Farmácia da Universidade Federal do Amazonas, durante o semestre de 2020/1.

É importante ressaltar que os estudantes utilizaram o ancoramento molecular para propor uma estrutura candidata a fármaco para tratar ou prevenir a infecção causada pelo vírus SARS-CoV-2, o vírus causador da Covid-19. Para isso, deveriam escolher o fármaco baseado em seus conhecimentos de bioquímica, essa utilização do ancoramento auxiliou os alunos no estudo da disciplina e a entender os aspectos dos mecanismos de ação de um fármaco (Silva *et al.*, 2023). Do mesmo modo, o ancoramento tem sua utilização em cursos da área de Química ou Farmácia, por exemplo, as simulações podem ajudar um químico orgânico na síntese de medicamentos, sendo que este também imagina como uma molécula se encaixaria no sítio ativo de uma macromolécula, como uma proteína ou enzima (Kiernan; Manches; Seery, 2021). Nesta pesquisa o ancoramento molecular pôde ser utilizado no ensino de Química do curso de Agronomia com a turma de segundo período, ou seja, seu uso pôde ser transposto para a área de educação.

Dando continuidade à atividade sobre ancoramento molecular, na questão número 2) *Explique, em termos de interações intermoleculares, por que os herbicidas fops e dims apresentam os menores valores de energia livre de ligação com a enzima ACCase e as menores constantes de inibição* foram encontradas respostas que se encaixaram em explicações que falaram de: 1. termos energéticos e de liberação de energia; 2. das interações específicas; 3. da constante e inibição e 4. porque eles são herbicidas que matam as plantas daninhas.

Os alunos D8, D24 e D34 (Quadro 18) responderam que fops e dims apresentaram menores valores de energia em razão de liberar mais energia por serem herbicidas específicos e assim “*gastam menos*” energia e sua constante de energia é menor (D8); D24 explica que é por causa de os herbicidas fazerem “*uma combinação melhor*” entre a relação de gasto de energia que precisa para ser ativado e também por terem a região propil o “*desgaste energético é menor*” (D34).

Quadro 18 - Respostas dos alunos D8, D24 e D34 à questão 2).

D8.	<i>“Quando eles interagem com a enzima acabam liberando mais energia, isso porque é um herbicida específico e por isso em relação à quantidade de energia eles gastam menos, e assim sua constante de inibição será menor.”</i>
D24.	<i>“Porque eles fazem uma combinação melhor entre a relação de gasto de energia que precisa para ser ativado, então quanto menor a energia de interação melhor vai ser a inibição.”</i>
D34.	<i>“Os herbicidas fops e dims tem na molécula a ramificação propil que interage com a enzima ACCase em perfeita sintonia, com isto não ocorre desgastes energéticos, tendo menores valores de energia de interação, com menores constantes de inibição.”</i>

Com efeito, por serem herbicidas específicos liberam energia, ou seja, é uma interação favorável espontânea, caso o valor da energia fosse positivo, seria um processo não espontâneo tendo que fornecer energia para a reação ocorrer, ou seja, para reações espontâneas, a energia livre de Gibbs é menor que zero (Kotz *et al.*, 2016). Os alunos D6 e D14 (Quadro 19) responderam explicando a questão: 2) em termos da comparação dos valores de energia livre de ligação das Tabelas 3 e 4.

Quadro 19 - Respostas dos alunos D6 e D14 à questão 2.

D6.	<i>“Porque quanto maior a distância do zero, maior a eficiência desses ativos na inibição da enzima, ex (-10, -8), significa que a interação foi mais intensa, e as constantes de inibição quanto menores demonstram maior eficiência dos ativos na inibição enzimática.”</i>
D14.	<i>“A eficiência desses ativos dependem de uma interação mais intensa para maior eficácia e quanto mais o valor da energia estiver longe do zero mais eficaz e as constantes de inibição precisam ser menores.”</i>

Como os fops e dims são inibidores específicos da ACCase, quando estes “entram” no sítio ativo da enzima eles realizam interações intermoleculares

específicas, ligando-se, assim, à enzima e impedindo seu funcionamento (Zhu *et al.*, 2006). Se o herbicida não for um fop ou um dim, as interações intermoleculares que ocorrem não são específicas para que se verifique a inibição. A relevância de se ter dividido a turma em dois grupos para que um fizesse o ancoramento com o clefoxidim e o outro com o glifosato, está justamente no fato de ser um herbicida específico e um herbicida não específico, respectivamente. Desse modo, os alunos puderam constatar as diferenças nas energias livres de interação, nas constantes de inibição e nas interações intermoleculares existentes quando cada herbicida está ligado ao sítio ativo da enzima.

De acordo com explicações dadas aos alunos em sala de aula, os menores valores de energia mostram as melhores interações e melhores valores de energia, quanto menor o valor de energia menor a constante de inibição. Assim, espera-se que os herbicidas fops e dims apresentem os menores valores de energia, ou seja, espera-se que esses herbicidas possam inibir a enzima com uma menor concentração do que herbicidas não específicos. Como enfatiza o aluno D12: *“Quando eles entram na enzima, eles fazem as interações certas, se encaixam bem, e dessa forma eles liberam mais energia.”*

Os alunos D2, D4, D10, D18 e D39 (Quadro 20) escreveram sobre as interações intermoleculares que são possíveis elementos de reconhecimento que a enzima faz perante o ligante. Também escreveram sobre os resíduos de aminoácidos que constituem a região hidrofóbica da ACCase, citando, assim os aspectos químicos da inibição. Um dos tipos de interação intermolecular, no contexto químico da inibição da ACCase pelos herbicidas da classe das ciclohexanodionas e dos ariloxifenoxipropionatos, são as interações CH- π e as interações π - π .

Quadro 20 - Respostas dos alunos D2, D4, D10, D18 e D39 à questão 2.

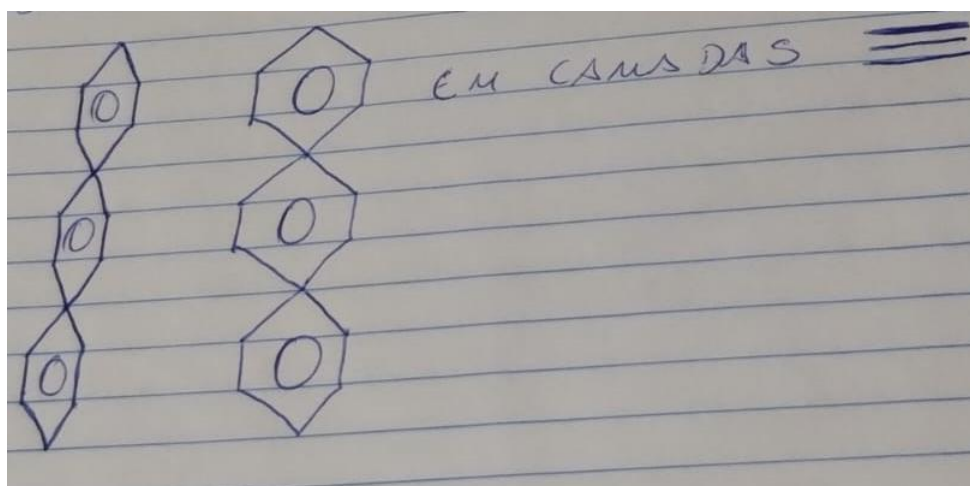
D2.	<i>“Pois o menor valor será a interação do herbicida na planta e isso acontece pois quanto menor o valor ele encaixa melhor na molécula, fica perto dos resíduos valina, leucina serina e alanina, faz ligação com átomos de oxigênio e nitrogênio e interação com π.”</i>
D4.	<i>“Tem ligação de hidrogênio e tem ligação π-π tornando-se mais negativo do que os outros na tabela.”</i>
D10.	<i>“Os herbicidas fops e dims são ativos da ACCase, pois fazem interações do tipo π e ligações de hidrogênio e ficam em lugar que contém serina, alanina, valina e leucina.”</i>

D18.	<i>“Porque eles formam uma interação mais forte e eles têm menores valores pois interagem melhor, pela ligação π, e precisam entrar e ficar na região que tem valina, leucina, serina, alanina.”</i>
D39.	<i>“Dime e fops quanto menor o valor da energia de ligação maior é o efeito contra a planta daninha. E porque tem ligação de hidrogênio e os resíduos VAL-2021 VAL-2024 e ALA-1627.”</i>

A interação CH- π é chamada de interação alquila-arila e é considerada como um tipo de ligação de hidrogênio não clássica com anel aromático. Ela ocorre quando uma ligação C-H de um grupo alquila é polarizada pela presença de um anel com sistema π e de forma geral, a disposição dessa interação ocorre com o grupo CH perpendicular ao sistema π . Essa é considerada uma interação de dipolo-dipolo induzido fraca, contudo tem importância na conformação e estabilidade de estruturas de complexos, como complexos de enzima-ligante (Fokoue *et al.*, 2020).

O aluno D4 escreveu em sua resposta à pergunta 2: *“Tem ligação de hidrogênio e tem ligação π - π tornando-se mais negativo do que os outros na tabela”* e fez um desenho (Figura 31) sobre o empilhamento π - π em que os anéis encontram-se “em pé” na esquerda, mas ao lado o aluno escreveu do lado direito do desenho que estão em camadas, como em um sanduíche.

Figura 31 - Desenho do empilhamento π - π feito pelo discente.



Fonte: Resposta do discente.

Essa interação π - π é do tipo dipolo-dipolo, ou quadrupolo-quadrupolo, entre os anéis aromáticos e heteroaromáticos, devido à polarização das nuvens eletrônicas. Nesta interação, as nuvens π podem estar paralelas uma em relação a outra com os átomos dos anéis bem alinhados, o que se chama de empilhamento

sanduíche, ou podem estar deslocados, com os átomos dos anéis não alinhados e formar anéis de até 90° (Fokoue *et al.*, 2020).

Pode-se verificar assim que, enquanto alguns alunos elaboraram sua resposta em termos energéticos e a partir da comparação em relação de quais valores de energia livre de interação eram mais negativos que outros, outros discutiram sobre questões de interações intermoleculares. De modo que alguns alunos preferiram explicar em termos da descrição das interações intermoleculares e outros em termos dos valores das energias livres de ligação e as duas formas responderam à questão corretamente.

Por outro lado, outros estudantes já responderam a questão 2 no que tange às constantes de inibição, assim como D29: *“Quando os fops e dims interagem com a enzima liberam mais energia devido a serem herbicidas específicos, devido a isso eles agem com menor quantidade”*. Este extrato remete à constante de inibição, que é um valor para a formação do complexo-inibidor e pode expressar o grau de interação entre um ligante inibidor e a enzima (Marques; Yamanaka, 2008).

Durante a discussão sobre as questões, posteriormente aos alunos já terem entregado suas respostas, foi dialogado mais uma vez com a turma que, quanto menor o valor de K_i , menor a quantidade de inibidor é necessária para bloquear a ação biológica da enzima, por exemplo, para o clefoxidim esse valor é 173,21 nmol.L⁻¹ e para o glifosato este valor é de 790,93 µmol.L⁻¹. Sendo assim, é necessária uma concentração na ordem de nmol.L⁻¹ do herbicida clefoxidim, por ser um inibidor específico.

Além das respostas que abrangeram as interações intermoleculares, a energia livre de ligação e constante de inibição, em algumas respostas dos alunos, encontram-se trechos que se referem também ao contexto macroscópico de que ocorre morte da planta daninha, já que os herbicidas são agrotóxicos utilizados com essa função de controlar e matar diferentes tipos de plantas daninhas (Marchi; Marchi; Guimarães, 2008).

A partir da transcrição da resposta de D16 lê-se a seguinte afirmação: *“Quando se encaixam nos sítios ativos e fazem as interações corretas consequentemente libera mais energia e então há eficácia e as plantas daninhas morrem”* (grifo dos autores), dessa forma, o aluno escreve sobre o efeito macroscópico que a inibição da enzima pelo herbicida causa. D1 também se refere à

morte da planta daninha em: *“O ancoramento com a ajuda de um programa auxilia em mostrar como ocorre a “penetração” da molécula de herbicida na molécula da planta, mostra onde ela se encaixa para matar a planta”* (grifo dos autores). Esses dois alunos trouxeram termos que remetem ao cotidiano da área de atuação da Agronomia.

Assim, a importância de ter trabalhado essa metodologia com os alunos utilizando uma enzima presente na área da Agronomia, além de possibilitar aos alunos desenhar as estruturas dos herbicidas; reconhecer funções orgânicas presentes; lembrar e estudar novas interações intermoleculares, essas aulas puderam trazer vistas à teoria de algo que eles utilizam na prática.

Muitos alunos relataram já estarem em trabalho na área Agrônômica, alguns na revenda de agrotóxicos, outros atuando no campo na aplicação de herbicidas em culturas agrícolas, e disseram que foi bom entender como é a teoria que existe por trás de um herbicida inibindo uma enzima. Esses alunos já tinham visto em seu dia a dia a ação do herbicida, com as plantas daninhas morrendo e dando o resultado satisfatório que o produtor espera, porém disseram que não sabiam que era assim que funcionava a inibição da enzima pelo herbicida, e que não pensavam que a Química estava tão envolvida na inibição da enzima. Essa interação entre o conhecimento cotidiano e o conhecimento científico foi importante, pois mostrou o porquê de ocorrer, e como a disciplina de Química está presente em nosso cotidiano.

Partindo desse pressuposto, Crepalde e Aguiar (2013) afirmam que as relações entre conhecimento científico e conhecimento cotidiano é um tema muito presente em pesquisas e nas práticas pedagógicas. Nessas pesquisas, fala-se sobre valorizar o conhecimento prévio dos estudantes para se chegar ao conhecimento científico. Nesse sentido, os alunos já tinham um conhecimento prévio cotidiano sobre o efeito macroscópico de um herbicida, e essa experiência, na prática, traz sentido e explicação para os alunos. Observou-se que eles estavam interessados em fazer uma simulação molecular de algo que veem os resultados práticos no dia a dia, é uma realidade diferente para eles que não sabiam nem que existia.

Mesmo dada a importância existente, tanto nos conhecimentos cotidianos quanto nos científicos, o conhecimento cotidiano era tido como um conhecimento empobrecido. Assim, os autores Crepalde e Aguiar (2013) falam da importância dos dois conhecimentos e discutem que o conceito cotidiano se desenvolve de baixo

para cima, enquanto os conceitos científicos se desenvolvem de cima para baixo, “das propriedades mais complexas e superiores para as mais elementares e inferiores” (Crepalde; Aguiar, 2013, p. 311).

Dessa forma, aprender é estabelecer relações entre “o velho” e “o novo”, de tal modo que o aluno traga o que ele já sabe para gerar significado e reconstrução do conhecimento (Balduino, 2012). Então, nesse processo, é necessário considerar as concepções dos alunos, dialogar com eles e aproximá-los dos conhecimentos científicos que serão trabalhados, “incorporando novos elementos às representações existentes, reorganizando-as se necessário” (Perrenoud, p.30, 2000).

Ainda em relação à questão 2 da Atividade proposta sobre a metodologia do ancoramento molecular, os alunos D22 e D32 responderam que os herbicidas fops e dims apresentam menor valor de energia, porque possuíam interações intermoleculares mais fracas e porque não tiveram interações específicas com a enzima. É exatamente o contrário, possivelmente esses dois alunos possam ter se confundido devido aos valores serem negativos. Os extratos de suas respostas podem ser lidos no quadro a seguir (Quadro 21).

Quadro 21 - Respostas dos alunos D22 e D32 à questão 2.

D22.	<i>“Os herbicidas fops e dims apresentam os menores valores de energia de interação e as menores constantes de inibição porque eles interagem principalmente por meio de interações intermoleculares mais fracas.”</i>
D32.	<i>“Os herbicidas fops e dims têm baixos valores de interação e constantes de inibição devido à sua estrutura molecular, que não favorece interações específicas com o sítio ativo da enzima.”</i>

Quando foi feita a correção em sala de aula, perguntou-se a esses alunos sobre suas respostas para depois poder ser realizada discussão sobre a relação entre baixos valores de energia livre de ligação. Realmente, eles associaram os valores negativos a interações não específicas, então foi explicado que os menores valores de constante de inibição são do clefoxidim, porque ele apresentou as interações intermoleculares específicas. D32 disse que achava que os valores da energia livre de ligação davam valores negativos e a constante de inibição é menor, porque os herbicidas fops e dims possuem estruturas que não favorecem interações específicas com o sítio ativo. O aluno associou os valores negativos com interações não específicas. Então, foi explicado que é o contrário, energia com valores mais

negativos significam processos e reações espontâneas e, se são espontâneas, indicam que as estruturas dos herbicidas favorecem interações específicas.

O aluno D22 registrou, em sua resposta, que os fops e dims *“interagem por meio de interações intermoleculares mais fracas”*, e D32 escreveu que a estrutura dos fops e dims *“não favorece interações específicas com o sítio ativo da enzima”*. D22 disse que escreveu que as interações intermoleculares de fops e dims eram mais fracas não comparadas com os herbicidas não específicos como o glifosato, mas falou que queria dizer que *“interações intermoleculares são forças mais fracas que a força das ligações químicas”*, contudo explicou que não soube escrever de outra forma. Sua fala abriu espaço para conversar novamente sobre os tipos de interações intermoleculares e que as ligações químicas existentes dentro das moléculas, realmente, são mais fortes que as interações intermoleculares que ocorrem dentro e entre as moléculas. Essas interações podem ser mais “fortes ou mais fracas” dependendo das espécies químicas envolvidas, por exemplo, a interação intermolecular denominada ligação de hidrogênio é tão forte que é entendida como uma ligação química.

No momento da discussão sobre os valores de energia das conformações estruturais do clefodixim e do glifosato, explicou-se que quatro tipos de forças de interações que existem entre as partículas do universo, são elas: as interações fortes, que ocorrem em prótons e nêutrons; as interações fracas, que ocorrem em nível nuclear; as eletromagnéticas, que medeiam as interações que ocorrem entre partículas elementares carregadas; e as interações gravitacionais, que ocorrem com corpos com massa a nível macroscópico como entre planetas, galáxias e estrelas. No que tange às interações que ocorrem na química a nível atômico e molecular, as interações puramente eletrostáticas (consideradas fracas) são as principais. Isso se dá, pois os sistemas são entendidos como ligados ou não covalentes, de modo que átomos se ligam para formar moléculas e moléculas alcançam condições eletrônicas para formarem estruturas estáveis (Oliveira; Araújo, 2012).

Retomou-se a explicação com a turma de que uma das interações, que dá estabilidade à determinada configuração entre moléculas, é a ligação de hidrogênio, que ocorre entre uma região da molécula com alta densidade eletrônica (base de Lewis), com pares de elétrons não compartilhados, elétrons π ou hidretos com outra região, que é doadora de prótons (ácido de Lewis), a atração entre essas duas

regiões resulta na ligação de hidrogênio, que apresenta energias de ligação maiores do que as interações de Van der Waals (Oliveira; Araújo, 2012).

No trabalho de Junqueira e Maximiano (2020), os autores apontam que, em alguns estudos, muitos estudantes possuem algumas ideias incorretas e dificuldades em compreender as interações intermoleculares. Alguns alunos, por exemplo, têm dificuldade de relacionar interação intermolecular e propriedades físicas, outros acreditam que as interações intermoleculares são mais fortes do que as intramoleculares e alguns alunos confundem qual tipo de ligação se rompe durante mudanças de estado físico e até mesmo acham que as interações intermoleculares são influenciadas pela gravidade.

Nos resultados desses autores sobre as interações intermoleculares e solubilidade, eles verificaram que cerca de 45% dos alunos que participaram da pesquisa apresentaram algum tipo de dificuldade para identificar e explicar as interações intermoleculares, que estão envolvidas no processo de solubilidade (Junqueira; Maximiano, 2020). Isso mostra a importância de estudar as interações intermoleculares com alguma ferramenta de visualização, como o ancoramento molecular, que pode ser um facilitador para o entendimento desses conceitos que não são tangíveis aos sentidos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir dos resultados da pesquisa, pode-se concluir que é possível para os alunos realizarem as etapas das simulações computacionais, seja com metodologia computacional baseada na mecânica quântica ou na mecânica molecular. No caso desta pesquisa, o estudo foi realizado com os alunos de graduação da Engenharia Civil e de Agronomia. Nesse sentido, se estiverem inseridas disciplinas de Química na matriz curricular do curso, as simulações computacionais podem ser utilizadas e adaptadas para o contexto educacional.

Um dos receios iniciais da pesquisa era o de que talvez os alunos não conseguissem realizar as simulações, porque elas envolvem programas específicos e equações que, geralmente, são vistas como muito complexas. Isso não se mostrou verdadeiro, os alunos foram muito proativos em buscar entender e usar o aplicativo e o *software*.

Assim, não abordar e aprofundar o uso de *softwares* de química computacional e as equações relacionadas ao uso destes apresenta-se, a partir desta pesquisa, um equívoco. Desse modo, o conhecimento sobre esse universo pode levar os estudantes a se aproximarem de conteúdos sobre cálculos computacionais que permitem identificar propriedades moleculares. Isso mostra-se importante, pois além de aprenderem sobre a parte teórica das simulações, eles puderam entender aspectos conceituais inerentes às estruturas moleculares e suas configurações.

Esse conhecimento possibilita uma autonomia ao aluno e faz com que ele esteja mais presente no processo da geração de uma representação visual que irá ajudá-lo em sala de aula. Assim, os estudantes podem, para além de visualizar simulações prontas, participar de todas as etapas das simulações, eles podem fazer as simulações e depois ver os resultados, visualizar as representações em três dimensões das moléculas, de suas propriedades e de suas interações. É importante dizer que as ferramentas e temáticas da química computacional, com metodologia quântica ou molecular, podem ser trabalhadas como um recurso didático nas aulas de Química.

Observou-se, neste trabalho, que os alunos têm capacidade de realizá-las, indo além de simplesmente observar os resultados visuais. Esse recurso didático permite que os estudantes se envolvam mais ativamente no processo de

aprendizagem, o que auxilia mais na compreensão de conceitos abstratos da química.

Neste trabalho, o uso do aplicativo do *software* WebMO e do ancoramento molecular puderam atuar como uma metodologia que facilita o estudo de conteúdos de química. Percebeu-se que ter associado esses dois *softwares* como ferramentas nas aulas mostrou-se um recurso adicional para outras possibilidades de interação com o conteúdo; para a interação entre professora e aluno, da interação da professora com a tecnologia de uma forma voltada ao ensino com um caráter didático; e da interação dos alunos com as tecnologias na sala de aula, já que eles estavam fazendo as simulações.

O uso das ferramentas WebMO e AutoDock4 possibilitou aprofundar abordagens sobre ligações químicas permitindo a visualização tridimensional de ligações químicas, ângulos e geometrias. Para a pesquisadora, que atua nas disciplinas nos cursos de graduação mencionados, esse movimento de uso do aplicativo nas aulas, no desenvolvimento da pesquisa, mudou a dinâmica das aulas evidenciando mais interesse e empolgação por parte dos estudantes. Isso foi observado nas atividades, principalmente para ver as cores dos átomos e das moléculas, das representações das ligações, das geometrias e dos orbitais. Como foram oito moléculas desenhadas e tendo as propriedades calculadas pela mecânica quântica, a cada desenho os alunos se empolgavam ao ver as cores dos novos átomos. A curiosidade em acompanhar o término do cálculo para ver como iria ficar a geometria da molécula também foi observada nos alunos.

Assim, para os docentes, dispor desses *softwares* para os alunos simularem fenômenos que incluem conceitos químicos, é ter uma ferramenta facilitadora, um recurso/apoio didático que ajuda em conteúdos que, geralmente, são explicados apenas por metodologias expositivas-dialogadas. Durante o processo, os alunos aprenderam desenhando, retomando modelo VSPER, desenhando as ligações, e descobrindo eles mesmos que, ao usar as ferramentas, clicando duas vezes saíam duas ligações, onde não deveria e o resultado dava erro. Ao observarem as equações que regem o cálculo, os estudantes viram que são capazes de reproduzir simulações que já foram feitas por pesquisadores, isso foi novo e motivador para eles.

Geralmente, os *softwares* específicos da química computacional são utilizados para descobrir novos compostos, novos fármacos, novas metodologias de

análises de detecção, de funcionamento de biomoléculas, descobertas de novos tipos de ligações e interações moleculares. Por meio deles são desenvolvidos trabalhos inéditos que são realizados por pesquisadores do mundo todo e, geralmente, a maioria desses *softwares* são em inglês para que haja uma universalização do idioma desses programas.

Esse aspecto dos *softwares* da química computacional serem em inglês foi justamente uma das dificuldades observadas neste trabalho, contudo esse obstáculo foi contornado realizando a tradução das palavras e, posteriormente, os alunos já compreenderam o que significava conforme iam utilizando o aplicativo. Esse é um aspecto que pode ser melhorado, considerando que, à medida que essas tecnologias forem sendo mais voltadas ao ensino e não somente para o meio acadêmico, pode-se desenvolver a tradução do aplicativo e do *software* para o português. Ademais, pode-se também elaborar manuais sobre a utilização desses programas e da teoria envolvida, para os professores que não têm tanto contato com a área da química computacional orientarem os estudantes a fim de que tenham mais autonomia por conseguirem entender o seu idioma.

Ressalta-se a importância em dar continuidade ao uso da química computacional na área do ensino de química como uma ferramenta didática, a partir do aprimoramento das metodologias computacionais e da transposição didática, pois esse uso possibilita alçar novos olhares para o processo de ensino e aprendizagem de conceitos químicos. Nesse sentido, buscar a possibilidade de melhorias didáticas nos aplicativos, como a versão em português, pode ajudar para que sejam mais adequados ao uso na área de educação entre alunos e professores, tornando-os mais acessíveis, portanto, no contexto da sala de aula. Para trabalhos futuros, existem diversos outros *softwares* da Química Computacional podem ser explorados em sala de aula com diferentes conteúdos e conceitos químicos. Além disso, pretende-se desenvolver a metodologia em outras disciplinas da Química na graduação e também iniciar seu uso no ensino médio.

REFERÊNCIAS

- ABREU, Fernanda de; CLAUDINO, Livio Sergio Dias. “Isso vem de uma aprendizagem”: discutindo o conceito de tecnologia a partir de diferentes perspectivas. *Revista Tecnologia e Sociedade*, Curitiba, v. 16, n. 42, p. 22-37, 2020. <https://doi.org/10.3895/rts.v16n42.10339>
- AGOSTINETTO, Dirceu *et al.*. Resistência de plantas aos herbicidas inibidores da enzima acetil coenzima A carboxilase (ACCase). *Revista Brasileira de Herbicidas*, [Londrina], v. 3, n. 2/3, p. 155, 2002. <https://doi.org/10.7824/rbh.v3i2-3.388>
- APRÀ, Edoardo *et al.* NWChem: past, present, and future. *The Journal of chemical physics*, Melville, NY, v. 152, n. 18, apr. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0004997> Acesso em: 12 ago. 2023. <https://doi.org/10.1063/5.0004997>
- ARAUJO, Annelita Pereira de *et al.* Aprendizagem baseada em projeto. Aplicação ao desenho de fármacos no ensino da disciplina química farmacêutica e medicinal: Desenho de novo fármaco antiinflamatório análogo do diclofenaco e inibidor seletivo da ciclooxigenase-2. *Infarma - Ciências Farmacêuticas*, [S. l.], v. 24, n. 1/3, p. 136–142, 2013. Disponível em: <https://cff.emnuvens.com.br/infarma/article/view/371>. Acesso em: 23 set. 2024.
- ARROIO, Agnaldo; FERREIRA, Celeste; REZENDE, Daisy de Brito. Uso de modelagem molecular no estudo dos conceitos de nucleofilicidade e basicidade. *Química Nova*, São Paulo, v. 34, n. 9, p. 1661-1665, 2011. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422011000900030>
- AYRES, Cláudia; ARROIO, Agnaldo. Um simulador aplicado ao estudo de interações intermoleculares. *Enseñanza de las ciencias: revista de investigación y experiencias didácticas*, n. Extra VIII. Congreso Internacional sobre Investigación en Didáctica de las Ciencias, Barcelona, p. 2445-2450, 2009. Disponível em: <http://ensciencias.uab.es/congreso09/numeroextra/art-2445-2450.pdf> Acesso em: 29 ago. 2024.
- AYRES, Claudia; ARROIO, Agnaldo. Aplicação de uma sequência didática para o estudo de forças intermoleculares com uso de simulação computacional. *Experiências em Ensino de Ciências*, [Cuiabá], v. 10, n. 2, p. 164-185, 2015.

BALDOINO, Eduardo Ferreira. Ensinar e aprender na educação superior: possibilidades de uma prática progressista. *Revista de Ensino, Educação e Ciências Humanas*, Londrina, v. 13, n. 2, 2012.

BAKER, Jon *et al.*. Recent developments in the PQS program. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, Nova Jersey, v. 02, n. 01, p. 63-72, jan. 2012. Disponível em: <https://wires.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/wcms.80> Acesso em: 12 ago. 2023.
<https://doi.org/10.1002/wcms.80>

BARCA, Giuseppe M. *et al.* Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system. *The Journal of chemical physics*, Melville, NY, v. 152, n. 15, apr. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0005188> Acesso em: 12 ago. 2023.
<https://doi.org/10.1063/5.0005188>

BARREIRO, Eliezer J.; FRAGA, Carlos Alberto Manssour. *Química Medicinal: as bases moleculares da ação dos fármacos*. 3 ed. Porto Alegre: Artmed Editora, 2015.

BARTOLIC, Silvia K. *et al.* A multi-institutional assessment of changes in higher education teaching and learning in the face of COVID-19. *Educational Review*, London, v. 74, n. 03, p. 517-533, mar. 2022.
DOI: 10.1080/00131911.2021.1955830 Disponível em:
<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00131911.2021.1955830> Acesso em: 03 jul. 2022.
<https://doi.org/10.1080/00131911.2021.1955830>

BENITE, Anna M. Canavarro; BENITE, Claudio Roberto Machado; SILVA FILHO, Supercil Mendes da. Cibercultura em ensino de química: elaboração de um objeto virtual de aprendizagem para o ensino de modelos atômicos. *Química Nova na Escola*, São Paulo, v. 33, n. 2, p. 71-76, maio. 2011.

BRETANHA NETO, Nelson. *Métodos semiempíricos: princípios básicos e aplicações*. 2015. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Estadual Paulista, São Paulo, 2015. Disponível em:
<https://repositorio.unesp.br/server/api/core/bitstreams/ddf87cc6-567f-4fb9-9bf8-137828036cb1/content> Acesso em: 25 jan. 2021.

BRASIL. *Decreto 12.711, de 29 de agosto de 2012*. Dispõe sobre o ingresso nas universidades federais e nas instituições federais de ensino técnico de nível médio e dá outras providências. 2012. Disponível em:
https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_ato2011-2014/2012/lei/l12711.htm Acesso em: 23 out. 2022.

BRASIL. Lei Geral de Proteção de Dados Pessoais (LGPD). (2018). Lei nº 13.709, de 14 de agosto de 2018. Diário Oficial da União.

Cetic.br. Resumo Executivo: Pesquisa TIC Domicílios 2020. São Paulo: Comitê Gestor da *Internet* no Brasil, 2021. Disponível em: https://cetic.br/media/docs/publicacoes/2/20211124201505/resumo_executivo_tic_domicilios_2020.pdf Acesso em: 04 ago. 2024.

Cetic.br. Pesquisa sobre o uso das tecnologias de informação e comunicação nas escolas brasileiras [livro eletrônico] : TIC Educação 2022 Núcleo de Informação e Coordenação do Ponto BR. 1. ed. São Paulo : Comitê Gestor da *Internet* no Brasil, 2023a. Disponível em: https://cetic.br/media/docs/publicacoes/2/20231122132216/tic_educacao_2022_livro_completo.pdf Acesso em: 13 jul. 2024.

Cetic.br. Pesquisa sobre o uso das tecnologias de informação e comunicação nos domicílios brasileiros: TIC Domicílios 2022 [livro eletrônico] Núcleo de Informação e Coordenação do Ponto BR. -- 1. ed. -- São Paulo: Comitê Gestor da *Internet* no Brasil, 2023b. Disponível: https://cetic.br/media/docs/publicacoes/2/20230825143720/tic_domicilios_2022_livro_eletronico.pdf Acesso em: 14 jul. 2024.

CHANG, Raymond; GOLDSBY, Kenneth A. *Química*. Porto Alegre: AMGH Editora, 2013.

ChemSketch, (Freeware) version 2019.2.2, Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs), Toronto, ON, Canada, 2019. Disponível em: www.acdlabs.com. Acesso em: 13 fev. 2023.

CHEVALLARD, Yves. *La transposición didáctica: Del saber sabio al saber enseñado*. Ciudad de Buenos Aires: Aique, 1991.

CREPALDE, Rodrigo. dos Santos; AGUIAR, Orlando Jr. G. A formação de conceitos como ascensão do abstrato ao concreto: Da energia pensada à energia vivida. *Investigações em Ensino de Ciências*, [S. l.], v. 18, n. 2, p. 299–325, 2013.

DEMO, Pedro. Alfabetizações: desafios da nova mídia. *Ensaio: Avaliação e Políticas Públicas em Educação*, Rio de Janeiro, v. 57, n. 15, p. 543-564, 2007. <https://doi.org/10.1590/S0104-40362007000400006>

DEWEY, John. *Experiência e educação*. 3. ed. São Paulo: Companhia Editora Nacional, 1979. Coleção Atualidades Pedagógicas, v. 131.

ESSELMAN, Brian J.; BLOCK, Stephen B. VSEPR-plus: correct molecular and electronic structures can Lead to better student conceptual models. *Journal of Chemical Education*, Washington DC, v. 96, n. 01, p. 75-81, nov. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00316> Acesso em: 05 maio 2021.
<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00316>

EUQUERES, Jander Silva. Estimativa dos pKa da Rutina empregando modelos semi-empíricos de cálculo mecânico-quântico. 2009. 82 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Exatas e da Terra) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2009.

FLORES, Álvaro Dall Molin; RIBEIRO, Luciano Maciel; ECHEVERRIA, Evandro Luiz. A tecnologia da informação e comunicação no ensino superior: Um olhar sobre a prática docente. *Spacios*, [Venezuela], v. 38, n. 5, p. 1-14, 2017.

FRANCO, Maria Laura Puglisi Barbosa. *Análise de conteúdo*. 5. ed. Campinas: Autores Associados, v. 6., 2018.

FRISCH, Mike E. *et al.* Gaussian 16, revision C. 01., Wallingford CT, 2016.

FROIMOWITZ, Mark. HyperChem: a software package for computational chemistry and molecular modeling. *Biotechniques*, England, v. 14, n. 6, p. 1010-1013, 1993.
 FOKOUE, Harold H. *et al.* Há Algo Novo no Reconhecimento Molecular Aplicado à Química Medicinal?. *Química Nova*, São Paulo, v. 43, p. 78-89, 2020.
<https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170474>

FOGEL, David. B. *Evolutionary computation: toward a new philosophy of machine intelligence*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 1995.

GIANNOZZI, Paolo *et. al.* Quantum ESPRESSO toward the exascale. *The Journal of chemical physics*, Melville, NY, v. 152, n. 15, apr. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0005082> Acesso em: 12 ago. 2023.
<https://doi.org/10.1063/5.0005082>

GILBERT, John. K. Visualization: a metacognitive skill in science and science education. In: *Visualization in science education*, Dordrecht, v. 1, p. 9–27, 2005.
https://doi.org/10.1007/1-4020-3613-2_2

GILBERT, John K.; REINER, Miriam; NAKHLEH, Mary (Ed.). *Visualization: Theory and practice in science education*. Springer, 2008.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4020-5267-5>

GILLMOR, Dan. *We the media*: Grassroots journalism by the people, for the people. Sebastopol: "O'Reilly Media, Inc.", 2004.
<https://doi.org/10.1145/1012807.1012808>

GISI, Maria L. A Educação Superior no Brasil e o caráter de desigualdade do acesso e da permanência. *Revista Diálogo Educacional*, Curitiba, v. 06, n. 17, p. 97-112, jan.-abr. 2006.

<https://doi.org/10.7213/rde.v6i17.6740>

GOLDBARG, Elizabeth Ferreira Gouvêa; GOLDBARG, Marco Cesar; LUNA, Henrique Pacca Loureiro. *Otimização combinatória e meta-heurísticas: algoritmos e aplicações*. Barueri. SP: Grupo GEN, 2015.

GONZÁLEZ-PATIÑO, Javier. Rutinas de la infancia urbana mediadas por la tecnología: Un análisis visual. *Papeles de Trabajo sobre Cultura, Educación y Desarrollo Humano*, [Espanha], v. 7, n. 2, p. 1-16, 2011.

HAFNER, Jurgen. Ab-initio simulations of materials using VASP: density-functional theory and beyond. *Journal of computational chemistry*, London, v. 29, n. 13, p. 2044-2078, jul. 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/jcc.21057> Acesso em: 12 ago. 2023.

<https://doi.org/10.1002/jcc.21057>

HARGITTAI, István Ronald J. Gillespie; the VSEPR model; and molecular symmetry. *Struct Chem*, [Dordrecht], 20, p. 155–159, apr. 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11224-009-9439-7> Acesso em: 12 ago. 2023.

<https://doi.org/10.1007/s11224-009-9439-7>

HOFFMANN, Roald; LASZLO, Pierre. Representation in Chemistry. *Angew. Angewandte Chemie International Edition*, German, v. 30, p. 01-16, jan. 1991. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/anie.199100013> . Acesso em: 11 jul. 2022.

<https://doi.org/10.1002/anie.199100013>

HUEY, Ruth *et al.* A semiempirical free energy force field with charge-based desolvation. *Journal of computational chemistry*, New York, v. 28, n. 6, p. 1145-1152, 2007.

<https://doi.org/10.1002/jcc.20634>

IBGE - Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Goiatuba. Censo Brasileiro de 2022. Disponível em: <https://www.ibge.gov.br/cidades-e-estados/go/goiatuba.html> Acesso em: 28 jul. 2024.

IRIGARAY, Fernando. *Territorialidade Expandida en el Documental Transmedia*. In: IRIGARAY, Fernando; GOSCIOLA, Vicente; PIÑERO-OTERO, Teresa (Orgs.). *Dimensões transmídia*. 1. ed. Aveiro: Ria Editorial, 2019. 475 p.

JOHNSON, Steven. *Cultura da interface*. Rio de Janeiro: Jorge Zahar, p. 32-33, 2001.

JOHNSTONE, Alex H. The development of chemistry teaching: a changing response to changing demand. *Journal of Chemical Education*, Boston, v. 70, n. 09, p. 701–710, 1993. Disponível em: doi:10.1021/ed070p701 Acesso em: 13 out. 2024.
<https://doi.org/10.1021/ed070p701>

JOLY, Martine. *Introdução à análise da imagem*. Campinas: Papirus editora, 1996.

JONES, Loretta L.; KELLY, Resa. M. Visualization: The key to understanding chemistry concepts. In: Sputnik to smartphones: A half-century of chemistry education. *American Chemical Society*, Washington, p. 121-140, 2015.
<https://doi.org/10.1021/bk-2015-1208.ch008>

JUNQUEIRA, Mariana Mafra; MAXIMIAMO, Flávio Antônio. Interações intermoleculares e o fenômeno da solubilidade: explicações de graduandos em Química. *Química Nova*, São Paulo, v. 43, n. 01, p. 106–117, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170449> Acesso em: 12 fev. 2024.
<https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170449>

KIERNAN, Nicola A.; MANCHES, Andrew; SEERY, Michael K. The role of visuospatial thinking in students' predictions of molecular geometry. *Chemistry Education Research and Practice*, London, v. 22, n. 03, p. p. 626-639, nov. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/D0RP00354A>. Acesso em: 23 jul. 2022.
<https://doi.org/10.1039/D0RP00354A>

KOTZ, John C. *et al. Química Geral e Reações Químicas - Volume 2 - Tradução da 9ª edição norte-americana*. Cengage Learning Brasil, 2016.

KRUSE, Nelson D.; TREZZI, Michelangelo M.; VIDAL, Ribas A. Herbicidas inibidores da EPSPS: revisão de literatura. *Revista Brasileira de Herbicidas*, Londrina, v. 1, n. 2, p. 139-146, 2000.
<https://doi.org/10.7824/rbh.v1i2.328>

KRYLOV, Anna I.; GILL, Peter M. Q-Chem: an engine for innovation. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, Nova Jersey, v. 03, n. 03, p. 317-326, nov. 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/wcms.1122>. Acesso em: 12 ago. 2023.
<https://doi.org/10.1002/wcms.1122>

KUKULSKA-HULME, Agnes; TRAXLER, John. *Mobile learning: A handbook for educator and trainers*, London, 2005.

LEITE, Bruno Silva. Tecnologias no ensino de química: passado, presente e futuro. *Scientia Naturalis*, Acre, v. 1, n. 3, 2019.

LEWARS, Errol G. An outline of what: computational chemistry is all about. In: LEWARS, Errol G. *Computational Chemistry*: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics. Boston: Springer International Publishing Switzerland, 2004. https://doi.org/10.1007/0-306-48391-2_1 Acesso em: 29 jan. 2024.
https://doi.org/10.1007/0-306-48391-2_1

LEWARS, Errol. G. *An Outline of What Computational Chemistry Is All About. Computational Chemistry*, [Dordrecht], 2016. https://doi.org/10.1007/978-3-319-30916-3_1 Acesso em: 29 jan. 2024.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-30916-3_1

LI, Zhaoyan; CAO, Yuan; LUO, Jiancheng. Application of virtual simulation technology in chemistry teaching. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ENERGY SCIENCE AND CHEMICAL ENGINEER; 7, 2021, S. L. *Anais Eletrônicos* [...]. [S. l.] : ICESCE, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202126702067> Acesso em: 15 abr. 2021.
<https://doi.org/10.1051/e3sconf/202126702067>

LIMEIRA, George N.; BATISTA, Maria E. P.; BEZERRA, Janete de S. Desafios da utilização das novas tecnologias no ensino superior frente à pandemia da COVID-19. *Research, Society and Development*, Vargem Grande Paulista, v. 09, n. 10, p. e2219108415-e2219108415, set. 2020.
<https://doi.org/10.33448/rsd-v9i10.8415>

MACIEL, Thamyres Pinheiro *et al.* Pós-modernidade e vertigem existencial entre jovens: influência da mídia pela teoria do enquadramento. In: PÔRTO JR, Gilson *et al.* (Orgs.). *Media effects: ensaios sobre teorias da Comunicação e do Jornalismo, Vol. 1: Teorias do agendamento, priming e framing* [recurso eletrônico]. Porto Alegre, RS: Editora Fi / Boa Vista: Editora da UFRR, 2018. Disponível em: https://www.editorafi.org/_files/ugd/48d206_46c1d3a02dee4863a5184cfdc64d364c.pdf Acesso em: 14 jul. 2024.

MACHADO, Andréa Horta; MOURA, André Luis Alves. Concepções sobre o papel da linguagem no processo de elaboração conceitual em Química. *Química Nova na Escola*, São Paulo, v. 1, n. 2, 1995.

MAGALHÃES, Camila Silva. *Algoritmos genéticos para o problema de docking proteína-ligante*. 2006. 261f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC, Petrópolis – RJ, 2006.

MAHAN, Breuce; MYERS, Rollie. J. *Química: um curso universitário*. São Paulo: Editora Blucher, 2000.

MALTA, Marcio Melo. Uma imagem vale mais: o uso das imagens na educação como elemento potencializador. *Conhecimento & Diversidade*, Rio de Janeiro, v. 5, n. 9, p. 130-139, 2013.

MARQUES, Paulo Roberto Brasil de Oliveira; YAMANAKA, Hideko. Biossensores baseados no processo de inibição enzimática. *Química Nova*, São Paulo, v. 31, n. 07, p. 1791–1799, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422008000700034> Acesso em: 29 mar. 2024.

MARCHI, Giuliano; MARCHI, Edilene Carvalho Santos; GUIMARÃES, Tadeu Gracioli. *Herbicidas: mecanismos de ação e uso*. Planaltina: Embrapa Cerrados, 2008.

MARTINS, Luana Timbó; CASTRO, Lucia Rabello de. Crianças na contemporaneidade: entre as demandas da vida escolar e da sociedade tecnológica. *Revista Latinoamericana de Ciencias Sociales, Niñez y Juventud*, Manizales, v. 9, n. 2, p. 619-634, 2011.

MATTAR, João; RAMOS, Daniela. K. *Metodologia da pesquisa em educação: abordagens qualitativas, quantitativas e mistas*. Coimbra: Edições 70, 2021.

McKERNAN, James. *Investigación-acción y currículum: métodos y recursos para profesionales reflexivos*. Madrid: Ediciones Morata, 1999.

MCNAUGHT, Ian J. Testing and Extending VSEPR with WebMO and MOPAC or GAMESS. *Journal of Chemical Education*, Washington DC v. 88, n. 04, p. 421-425, abr. 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ed900038a> Acesso em: 22 maio 2021.

MENDES, Carla Cristina Alves. Estudo teórico da seletividade e do solvente em um nanobiossensor de herbicidas inibidores da acetil-coenzima a carboxilase. 2014. 93 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Exatas e da Terra) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2014.

MEYER, Emily E.; ROSENBERG, Kenneth J.; ISRAELACHVILI, Jacob. Recent progress in understanding hydrophobic interactions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, USA, v. 103, n. 43, p. 15739-15746, 2006.

MOREIRA, José A.; SCHLEMMER, Eliane. Por um novo conceito e paradigma de educação digital onlife. *Revista UFG*, Goiânia, v. 20, n. 26, maio 2020.
<https://doi.org/10.5216/revufg.v20.63438>

MORENO, Esteban Lopez; HEIDELMANN, Stephany Petronilho. Recursos instrucionais inovadores para o ensino de química. *Química Nova na Escola*, São Paulo, v. 39, n. 1, p. 12-18, 2017.
<https://doi.org/10.21577/0104-8899.20160055>

MORGADO, José Carlos. *O Estudo de Caso na Investigação em Educação*. Portugal: De Facto Editores. 5 ed. 2022.

MORRIS, Garrett. M. , *et al.* AutoDock. *Automated docking of flexible ligands to receptor-User Guide*. La Jolla, CA: The Scripps Research Institute; 2001. Disponível em:
<https://citeseerx.ist.psu.edu/document?repid=rep1&type=pdf&doi=e992478dcbeaec5be4850f4b9f46218306e36a4e> Acesso em: 02 fev. 2024.

MORRIS, Garrett. M. *et al.* *Autodock User Guide: Automated Docking of Flexible Ligands to Receptors*, Version 4.2. La Jolla, CA: Scripps Research Institute, Department of Molecular Biology, 2009a.

MORRIS, Garrett M. *et al.* AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. *Journal of Computational Chemistry*, USA, 30(16), 2785–2791. 2009b.
<https://doi.org/10.1002/jcc.21256>

MOURA, Adelina. Mobile learning: Tendências tecnológicas emergentes. In: *Aprender na era digital: Jogos e Mobile-Learning*, Santo Tirso: De Facto Editores p. 127-147, 2012.

NASCIMENTO, Wagner R. D.; SALVIATO-SILVA, Ana C.; DELL'AGLI, Betânia A. V. O desempenho em tecnologias digitais para aprendizagem: um estudo com universitários. *ETD-Educação Temática Digital*, Campinas, v. 21, n. 01, p. 182-201, jan.-mar. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.20396/etd.v21i1.8651482> Acesso em: 21 set. 2022.

NEESE, Frank. The ORCA program system, *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, Nova Jersey, v. 02, p. 73-78, jun. 2011.
<https://doi.org/10.1002/wcms.81>

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 8254*, Dimethyl Ether. 2023a. Disponível

em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Dimethyl-Ether>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 1068*: Dimethyl sulfide. 2023b. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Dimethyl-sulfide>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 962*: Water. 2024a. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Water>. Acesso em: 17 abr. 2024.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 402*: Hydrogen sulfide. 2023c. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Hydrogen-Sulfide>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 533*: Hydrogen selenide. 2023d. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Hydrogen-selenide>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 62665*: Phosphorus trifluoride. 2023e. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Phosphorus-trifluoride>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 24387*: Phosphorus trichloride. 2023f. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Phosphorus-trichloride>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NCBI. NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem Compound Summary for CID 5727*: Zinc Chloride. 2023g. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Zinc-Chloride>. Acesso em: 28 mar. 2023.

NOGARO, Arnaldo; GRANELLA, Eliane. O erro no processo de ensino e aprendizagem. *Revista de Ciências Humanas*, Frederico Westphalen, v. 5, n. 5, p. 31-56, 2004.

OLIVEIRA, Boaz G.; ARAÚJO, Regiane. C. M. U.. (2012). SAPT: ligação de hidrogênio ou interação de van der Waals?. *Química Nova*, São Paulo, v. 35, n. 10, p. 2002-2012, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422012001000021> Acesso em: 28 jan. 2024.

<https://doi.org/10.1590/S0100-40422012001000021>

PATTON, Michael Q. *Qualitative research & evaluation methods: integrating theory and practice*. 4. ed. Thousand Oaks, CA: Sage, 2015.

PEREIRA, Jocimario A.; LEITE, Bruno S.; BASÍLIO, João. A. Percepções dos estudantes do ensino médio sobre o ensino no isolamento social. *Revista EDaPECI*, São Cristóvão, SE, v. 21, n. 02, p. 83-97, jul. 2021.

<https://doi.org/10.29276/redapeci.2021.21.215628.83-97>

PERRENOUD, Philippe. Dez novas competências para ensinar. Porto Alegre: Artmed, 2000.

POLIK, William F.; SCHMIDT, Jordan. R. WebMO: Web-based computational chemistry calculations in education and research. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, Nova Jersey, v. 12, n. 01, p. 01-22, mar. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/wcms.1554> Acesso em: 24 jun. 2023.

<https://doi.org/10.1002/wcms.1554>

PULITA, Edemir José; SANTOS, Gilberto Lacerda dos. As novas perspectivas da imagem na era digital e os impactos na educação formal. *Educação em Foco*, Belo Horizonte, v. 19, n. 27, p. 97-122, 2016.

<https://doi.org/10.24934/eef.v19i27.1202>

QUINN, Clark N. *The mobile academy: mLearning for higher education*. Nova Jersey, John Wiley & Sons, 2011.

RACKERS, Joshua. A. *et al.* Tinker 8: Software tools for molecular design. *Journal of chemical theory and computation*, Nova Orleans, v. 14, n. 10, p. 5273-5289, set. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00529> Acesso em: 12 ago. 2023.

<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00529>

RAMOS, Caroline Andresa do Carmo de Lima. *O modelo RM1 para Boro e Selênio*. 2016. 288 f. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Química Fundamental, Recife, 2016. Disponível em: <https://repositorio.ufpe.br/bitstream/123456789/26610/1/DISSERTAC%c3%83O%20Caroline%20Andresa%20do%20Carmo%20de%20Lima%20Ramos.pdf>. Acesso em: 08 abr. 2024.

RAMPAZZO, Sandra Regina dos Reis; JESUS, Adriana Regina de. *Instrumentos de avaliação: reflexões e possibilidades de uso no processo de ensino e aprendizagem. Produção Didático-Pedagógica apresentada ao Programa de Desenvolvimento*

Educacional. NRE Londrina: Universidade Estadual de Londrina; Governo do Estado de Londrina, 2011.

RODRIGUES, Ricardo Batista. *Novas Tecnologias da Informação e da Comunicação*. Recife: IFPE, 2016. 86 p. Disponível em: https://www.ufsm.br/app/uploads/sites/413/2018/12/arte_tecnologias_informacao_comunicacao-1.pdf Acesso em: 10 jul. 2024.

RUARO, Regina Linden; MAÑAS, José Luis Piñar, MOLINARO, Carlos Alberto (Orgs.). *Privacidade e proteção de dados pessoais na sociedade digital*. Porto Alegre, RS: Editora Fi, 2017. https://www.editorafi.org/_files/ugd/48d206_22a63c4accd24433a0c23c09c909c77d.pdf Acesso em: 11 jul. 2024.

SANT'ANNA, Rafaela *et al.* BufferLator: Produção de ambiente virtual e cálculo de sistemas tamponantes. In: 44ª REUNIÃO ANUAL VIRTUAL DA SBQ, 2021, Online. Anais eletrônicos..., Galoá, 2021. Disponível em: <https://proceedings.science/rasbq-2021/trabalhos/bufferlator-producao-de-ambiente-virtual-e-calculo-de-sistemas-tamponantes?lang=pt-br>. Acesso em: 29 set. 2024.

SANTOS, Edméa. Pesquisa-formação na cibercultura. Teresina: EDUFPI, 2019.

SANTOS, Caroline dos; FREITAS, Pâmela. da S.; LOPES, Mirian Marchezan. Ensino remoto e a utilização de laboratórios virtuais na área de ciências naturais. Anais do 12º Salão Internacional de Ensino, Pesquisa e Extensão da UNIPAMPA: Salão de Ensino, 2020.

SCOLARI, Carlos A. *Introducción: del alfabetismo mediático al alfabetismo transmedia*. In: SCOLARI, Carlos A. Adolescentes, medios de comunicación y culturas colaborativas. Aprovechando las competencias transmedia de los jóvenes en el aula. Barcelona 2018. Disponível em: https://transmedialiteracy.upf.edu/sites/default/files/files/TL_Teens_es.pdf Acesso em: 17 jul. 2024.

SERITAN, Stefan. *et al.* TeraChem: Accelerating electronic structure and ab initio molecular dynamics with graphical processing units. *The Journal of chemical physics*, Melville, NY, v. 152, n. 22, p. 01-14, jun. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0007615> Acesso em: 12 ago. 2023.

SILVA, Geilson Rodrigues; CHAGAS, Edvanio. Transposição didática: uma análise do distanciamento dos saberes de química quântica nos livros didáticos do ensino médio. *HOLOS*, Rio Grande do Norte, v. 7, p. 284-298, 2017.

<https://doi.org/10.15628/holos.2017.3005>

SILVA, Alessandra Ferreira da *et al.* Monitoramento de resistência de plantas daninhas a herbicidas no Estado de Mato Grosso-safra 2016/2017. *Circular Técnica*, Sete Lagoas, MG, n. 228, p. 01-05, out. 2017. Disponível em : <https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/165384/1/circ-228.pdf> Acesso em: 19 fev. 2024.

SILVA, Eliete Braga. *Ambiente de Aprendizagem Híbrido no Ensino de Química: Uma perspectiva de Inovação pedagógica na era da Aprendizagem Móvel*. 129 f. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Matemática da Universidade Federal de Uberlândia) – Universidade Federal de Uberlândia, Minas Gerais, 2018.

<http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.59>

SILVA, Eleonora D. da. A Virtude do erro: uma visão construtiva da avaliação. *Estudos em Avaliação Educacional*, São Paulo, v. 19, n. 39, p. 91–114, jan.-abr. 2008.

<https://doi.org/10.18222/eae193920082471>

SILVA, Patrícia Fernandes; SILVA, Thiago Pereira da; SILVA, Gilberlândio Nunes da. StudyLab: Construção e Avaliação de um aplicativo para auxiliar o Ensino de Química por professores da Educação Básica. *Revista Tecnologias na Educação*, Minas Gerais, v. 13, n. 7, p. 1-10, 2015.

SILVA, Rhanna Victória Amaral da *et al.* Planejamento de fármacos contra COVID-19: uma experiência de ensino remoto de química farmacêutica. *Química Nova*, São Paulo, v. 46, p. 381-389, 2023.

<https://doi.org/10.21577/0100-4042.20230020>

SMITH, Daniel G. *et al.* PSI4 1.4: Open-source software for high-throughput quantum chemistry. *The Journal of chemical physics*, Melville, NY, v. 152, n. 18, p. 01-21, maio 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0006002> Acesso em: 12 ago. 2023.

<https://doi.org/10.1063/5.0006002>

SOARES, Lucas de Vasconcelos; COLARES, Maria Lília Imbiriba Sousa. Educação e tecnologias em tempos de pandemia no Brasil. *Debates em educação*, Maceió, v. 12, n. 28, p. 19-41, 2020.

<https://doi.org/10.28998/2175-6600.2020v12n28p19-41>

SOARES, Ricardo *et al.* Online chemistry education challenges for Rio de Janeiro students during the covid-19 pandemic. *Journal of Chemical Education*, Washington

DC v. 97, n. 09, p. 3396-3399, set. 2020. Disponível em:
<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00775> Acesso em: 21 jul. 2021.
<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00775>

STAKE, Robert E. *Investigação com estudo de casos*. Madrid: Ediciones Morata, 1999.

STEWART, James J. P. MOPAC: A semiempirical molecular orbital program. *Journal of computer-aided molecular design*, Berna, v. 04, n. 01, p. 01-103, mar. 1990. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF00128336> Acesso em: 14 maio 2023.
<https://doi.org/10.1007/BF00128336>

TERUYA, Leila Cardoso *et al.* Visualização no ensino de química: apontamentos para a pesquisa e desenvolvimento de recursos educacionais. *Química Nova*, São Paulo, v. 36, p. 561-569, 2013.
<https://doi.org/10.1590/S0100-40422013000400014>

THOMPSON, Mark A. *Molecular Docking Using ArgusLab*, an Efficient Shape-Based Search Algorithm and the a Score Scoring Function. ACS Meeting, Philadelphia, 2004.

TRZESNIAK, Daniel Rodrigo Ferreira. *Modelagem quântica de inibidores enzimáticos*. 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, 2002. Disponível em: doi:10.11606/D.43.2002.tde-26062002-143722. Acesso em: 09 jan. 2021.
<https://doi.org/10.11606/D.43.2002.tde-26062002-143722>

VIEIRA, Maristela Compagnoni; CONFORTO, Débora. Aprendizagem Móvel e Multimídia: a produção de material pedagógico na perspectiva BYOD. In: WORKSHOP DE INFORMÁTICA NA ESCOLA (WIE), 21. , 2015, Maceió. *Anais do Workshop de Informática na Escola*. Porto Alegre: Sociedade Brasileira de Computação, 2015 . p. 82-91.
<https://doi.org/10.5753/cbie.wie.2015.82>

WERNER, Hans J. *et al.*. Molpro: a general-purpose quantum chemistry program package. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, Nova Jersey, v. 02, n. 02, p. 242-253, mar. 2012. Disponível em:
<https://doi.org/10.1002/wcms.82> Acesso em: 12 ago. 2023.
<https://doi.org/10.1002/wcms.82>

XIANG, Song *et al.* A different mechanism for the inhibition of the carboxyltransferase domain of acetyl-coenzyme A carboxylase by

tepraloxydim. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, USA, v. 106, n. 49, p. 20723-20727, 2009.

<https://doi.org/10.1073/pnas.0908431106>

YIN, Robert K. *Estudo de caso*. Porto Alegre: Grupo A, 5 ed.2015.

ZDANOVSKAIA, Maria A. *et al.*. Access to computational chemistry for community colleges via WebMO. *Journal of Chemical Education*, Washington DC, v. 95, n. 11, p. 1960-1965, set. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00310>
Acesso em: 12 jul. 2021.

<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00310>

ZHU, Xiao-Lei *et al.* Interactions of aryloxyphenoxypropionic acids with sensitive and resistant acetyl-coenzyme a carboxylase by homology modeling and molecular dynamic simulations. *Journal of chemical information and modeling*, USA, v. 46, n. 4, p. 1819-1826, 2006.

<https://doi.org/10.1021/ci0600307>

ANEXO

O projeto foi aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa (CEP) na Plataforma Brasil com número CAAE 39172520.1.0000.5152, na data de 20 de janeiro de 2021.