

REPRESENTAÇÃO DE ESTRUTURAS QUÍMICAS¹

REPRESENTATION OF CHEMICAL STRUCTURES

Ana Carla Penteadó Feltrin² e Márcio Marques Martins³

RESUMO

A ferramenta de representação de estruturas químicas *Symyx Draw* 3.3 é bastante versátil mas não está disponível em língua portuguesa. Com o intuito de estimular o uso dessa ferramenta por parte da comunidade acadêmica e escolar, produziu-se um manual em língua portuguesa e uma série de tutoriais em vídeo, os *screencasts*. A técnica de *screencasting* consiste em gerar filmes que registram toda a atividade exibida na tela do computador, acrescida de comentários visuais ou narrados. Com o auxílio do *software CamStudio* 2.4, 19 *screencasts* exemplificando o uso do *Symyx Draw* foram elaboradas. Um teste de validação dos vídeos foi apresentado a oito estudantes do curso de Química da UNIFRA, bem como um questionário contendo quatro questões qualitativas foi aplicado. A análise das respostas dos entrevistados permitiu constatar que os *screencasts* desempenharam papel central na correta utilização do *Symyx Draw*, visto que todos os entrevistados conseguiram realizar as tarefas propostas apenas com o auxílio dos tutoriais em vídeo. Tanto o manual quanto os *screencasts* são disponibilizados permanentemente no site <http://symyxtutorial.posthaven.com>.

Palavras-chave: modelagem molecular, TICs, *screencasts*.

ABSTRACT

The tool for representation of chemical structures called Symyx Draw 3.3 is quite versatile but it is not available in Portuguese. In order to stimulate the use of this tool by the academic and school communities, it was produced a manual in Portuguese and a series of video tutorials called screencasts. The screencasting technique consists of generating films that record all activity displayed on the computer screen, plus visual or narrated commentaries. With the aid of the CamStudio2.4 software, 19 screencasts illustrating the use of Symyx Draw were drawn. A validation test of the videos was presented to eight students of Chemistry at UNIFRA, as well as a questionnaire containing four qualitative questions was applied. The analysis of the answers revealed that the screencasts played a pivotal role in the correct use of Symyx Draw, since all respondents were able to perform the proposed tasks with the help of video tutorials.

Keywords: molecular modeling, information technology, *screencasts*.

¹ Trabalho Final de Graduação - TFG.

² Acadêmica do curso de Química - UNIFRA.

³ Orientador - UNIFRA.

INTRODUÇÃO

A representação de estruturas moleculares intriga e desafia os profissionais da Química. Um problema com o qual o químico se depara é: como representar as ligações do metano no papel ou no quadro? Essa molécula pode ser representada com o auxílio de uma simbologia química específica ou com o auxílio de modelos moleculares. O problema da representação bidimensional ocupou as mentes de vários eminentes químicos ao longo dos séculos.

Ao longo da história da Química, vários modelos que tentavam representar estruturas químicas foram desenvolvidos, modificados, refeitos, criticados e melhorados a fim de representar de forma realista os átomos, as fórmulas e proporções químicas, bem como a disposição espacial das ligações moleculares. Segundo Boltzmann: "... é um estranho desejo da mente humana construir modelos e tentar melhorá-los para ter cada vez mais proximidade com a realidade..." (POHL, 2004)

O desenvolvimento dos modelos de estruturas químicas começou com Dalton (Figura 1, esquerda) com uma forma de representação pictográfica, e culminou com a forma moderna introduzida por Lewis (Figura 1, a direita) com a representação dos pares de elétrons ligantes e não ligantes representados por pontos e traços, respectivamente (DOMINGUES, 1969).

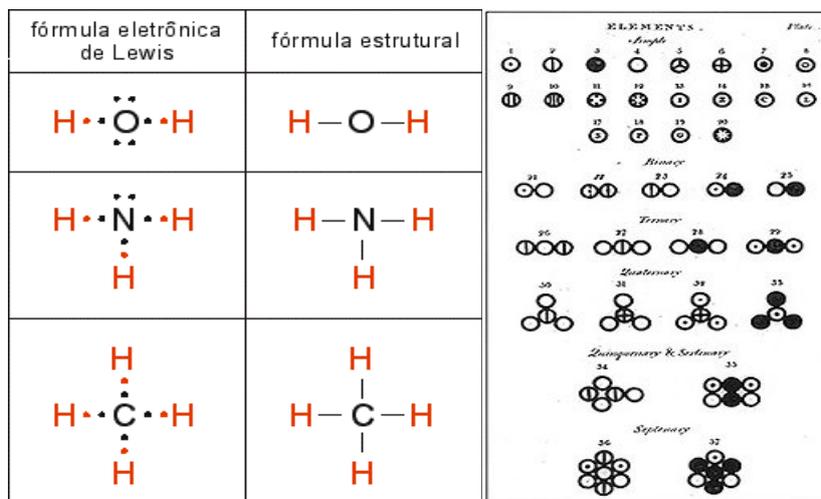


Figura 1 - Representação molecular de Dalton (esq.) e de Lewis (dir.).

Com a evolução dos computadores, a representação de moléculas assumiu um novo patamar. *Softwares* como o *DTMM* (1991) e o *PCModel* foram os pioneiros (APPELT et al., 2009). Hoje em dia existem muitos programas capazes de representar moléculas de diferentes maneiras. Dentre os principais *softwares* está o *Symyx Draw 3.3* (2012). Sua principal vantagem é ser gratuito para uso pessoal, além de disponibilizar diversos recursos como, por exemplo: biblioteca de moléculas orgânicas e inorgânicas; alternância entre diferentes formas de representação molecular (molecular, plana, espacial, estereoquímica, etc), gerar estruturas a partir do nome IUPAC (dentre outras nomenclaturas) e vive-versa, identificar possíveis estereocentros, mapear reações, etc. A versão 3.3

do *software* pode ser obtida no endereço <http://goo.gl/pzcml>. A possibilidade de alternância entre diversas formas de representação é importante, pois segundo a teoria dos registros de representação semiótica de Duval:

“As representações semióticas, ou seja, as produções constituídas pelo emprego de regras de sinais (enunciado em língua natural, fórmula algébrica, gráfico, figura geométrica,...) parecem apenas ser o meio de que o indivíduo dispõe para exteriorizar suas representações mentais, ou seja, para as tornarem visíveis ou acessíveis a outro” (DUVAL, 2008).

Ou seja, a fim de que possa acontecer um bom aprendizado da química, um estudante deve ser capaz de compreender as mais diversas formas de representação de moléculas, bem como de ser capaz de alternar entre essas diferentes formas de registro de representação de estruturas. Com softwares de representação de moléculas, como o *SymyxDraw*, torna-se possível transitar entre diferentes formas de representação (registros de representação semiótica) a partir de uma única informação, como o nome sistemático ou fórmula plana estrutural. Por se tratar de um software, a partir de um registro inicial, é possível realizar transformações a partir de operações disponíveis no menu do *software* sem se perder de vista a representação inicial.

O uso de *softwares* para representação de moléculas insere-se naturalmente dentro dessa proposta. Normalmente, o uso de *softwares* dessa natureza está restrito a instituições de ensino superior. Mas, por que não estender esse uso a outros níveis de ensino ou até mesmo ao público em geral? A popularização desse tipo de *software* pode permitir que estudantes de diferentes níveis de ensino tornem-se aptos a representar e a visualizar moléculas que antes pareciam “bicho-de-sete cabeças”. A opinião de Sir George Porter (Prêmio Nobel - 1960) enfatiza a importância do uso de modelos moleculares para o desenvolvimento da compreensão de conceitos científicos (POHL, 2004).

“(...) a maioria das pessoas neste país ainda não sabe dizer a diferença entre um átomo e uma molécula. Eles realmente deveriam manusear ‘átomos’ de H, O, N e C que possuam 1, 2, 3, e 4 ligações, respectivamente. Isso não é pedir muito deles, Ciência só é introduzida a uma criança bem tarde. Filhos de cinco anos já devem ser expostos a ciência, e deveriam jogar com um modelo de H₂O, por exemplo” (POHL, 2004, p. 6).

Essas ferramentas de representação molecular, que podem auxiliar nessa tarefa de aproximar as pessoas da ciência, apresentam certos inconvenientes para os estudantes e profissionais de ensino de língua portuguesa.

- 1 – Muitos professores e estudantes não conhecem essas tecnologias ou não fazem uso dela.
- 2 - A grande maioria desses *softwares* é paga, o que restringe o acesso.
- 3 – Vários desses *softwares* possuem menus, manuais e tutoriais em língua estrangeira.

Para facilitar o aprendizado de conteúdos de Química que tratam da representação de moléculas, a abordagem computacional parece ser a mais adequada, embora as deficiências anteriormente citadas possam oferecer alguns empecilhos. Optar pelo *Symyx Draw 3.3* (SYMYSX DRAW 3.3, 2012), como alvo

para o tipo de trabalho que é descrito neste artigo é natural, visto que é um *software* bastante versátil, com muitos recursos, gratuito para uso pessoal e que pode ser usado com finalidades educacionais. Quanto às possibilidades educacionais, existem outros *softwares* gratuitos de representação que poderiam ser abordados mas que já foram alvo de trabalhos similares, como esse tutorial do *ChemSketch* criado pelo NAEQ da UCS (<http://goo.gl/P2BQg>) (CHEMSKETCH, 2012). Esse trabalho pioneiro com o *ChemSketch* foi a principal inspiração para o desenvolvimento de um trabalho similar, porém mais amplo com o *SymyxDraw*. O principal atrativo do *SymyxDraw* está nas funcionalidades avançadas do *software*. Por ser ele um *software* voltado ao uso acadêmico, torna-se possível trabalhar nomenclatura e representação de estruturas e, ao mesmo tempo, exercitar uma espécie de iniciação científica à química com estudantes do nível médio ou superior (no caso de licenciaturas). Além disso, o *SymyxDraw* é ainda pouco difundido no Brasil e não foi versado para a língua portuguesa. Ele não dispõe de manuais ou tutoriais nessa língua, o que abre diversas oportunidades de trabalho de pesquisa na área das tecnologias da informação e comunicação em química.

METODOLOGIA

Esse trabalho foi desenvolvido em quatro etapas interligadas entre si:

- 1- Estudo do *software* para posterior criação do manual e dos *screencasts*;
- 2- Elaboração do manual/*screencasts* em português;
- 3- Testagem dos *screencasts*;
- 4- Validação dos tutoriais em vídeo junto a voluntários;

Após a confecção de 19 vídeos tutoriais (com duração entre 1 e 2 minutos), usando o *software Camstudio*, foi proposta uma atividade de aplicação dos *screencasts* com graduandos de uma turma de licenciandos em Química, da disciplina de Projetos Interdisciplinares em Química, do Centro Universitário Franciscano – UNIFRA. Essa atividade consistiu em utilizar os *screencasts* (disponíveis em <http://symyxtutorial.posterous.com>) para construir moléculas escolhidas pelos autores do trabalho (figuras 2, 3 e 4), investigando-se assim:

- Se o graduando já havia manuseado algum *software* de representação molecular;
- se no ponto de vista do graduando esses *softwares* de representação molecular auxiliam no aprendizado sobre estruturas químicas;
- quais as dificuldades encontradas no manuseio do *Symyx Draw*, e se os *screencasts* ajudaram a sanar essas dúvidas;
- pontuar as vantagens do uso de *screencasts* para o manuseio do *software* (*Symyx Draw*).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com o intuito de possibilitar o acesso de alunos de ensino médio, acadêmicos e demais membros da comunidade, os tutoriais desenvolvidos na forma de *screencasts* estão disponíveis na URL <http://symyxtutorial.posterous.com>.

O processo de aprendizado de uso do *Symyx* se deu ao longo da trajetória de tradução do arquivo de ajuda. Ao mesmo tempo em que se fazia a tradução das funções inerentes a cada ferramenta, também era possível testar esses comandos, fazendo com que pouco a pouco todas as ferramentas (cada uma com sua peculiaridade) se tornassem conhecidas. Esse conhecimento foi de suma importância para o processo de construção dos *screencasts*, com o auxílio do *software* gratuito *CamStudio* (<http://camstudio.org>). O *CamStudio* é uma ferramenta que grava as atividades desempenhadas na tela do computador em arquivos de vídeo AVI ou SWF, basta dar o comando de *Start recording* que a gravação se inicia e pode ser interrompida quantas vezes forem necessárias. Essas interrupções, em sua maioria, acontecem para que sejam inseridas caixas de diálogo no vídeo, no caso dos *screencasts* essas caixas de diálogo são recursos utilizados com o intuito de explicar o papel que cada ferramenta ou *template* desempenha durante a modelagem molecular.

Com o tutorial e os *screencasts* prontos, houve então a validação dos *screencasts* com o auxílio de oito acadêmicos voluntários do curso de Química do Centro Universitário Franciscano – UNIFRA – que desenvolveram as atividades de construção de moléculas selecionadas pelos autores (Figuras 2 a 4) e o preenchimento de um questionário avaliativo, em um tempo máximo de 60 minutos por voluntário.

As estruturas propostas aos voluntários são mostradas abaixo, de acordo com a proposição do seu emprego na atividade de validação dos *screencasts*.

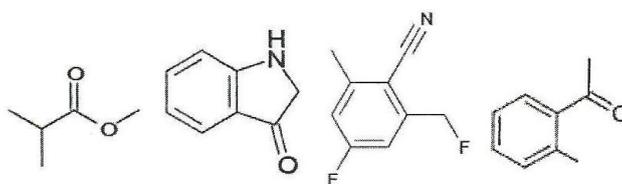


Figura 2 - Nessas estruturas encontra-se a inserção de elementos diferentes às moléculas, ligações duplas e tripas e ramificações a anéis aromáticos.

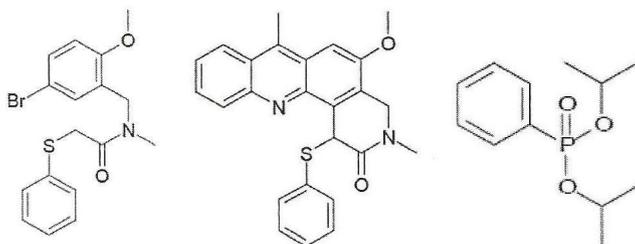


Figura 3 - Nas moléculas acima, as ramificações à anéis se tornam mais acentuadas com a utilização de um maior número de elementos entre as ramificações, fazendo com que sejam utilizados mais recursos do *Symyx Draw*, para a modelagem.

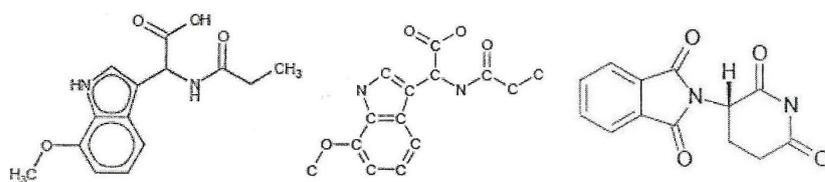


Figura 4 - Com um grau de dificuldade maior, tem-se a representação molecular com o emprego de recursos do Symyx, como: explorar a estereoquímica, as ligações aromáticas circulares e a inserção de carbonos explícitos.

Os questionários aplicados aos voluntários continham quatro perguntas impressas em uma folha, além das estruturas químicas que eles deveriam ser capazes de reproduzir após assistirem aos *screencasts*. São estas as questões:

- 1) Você já manuseou anteriormente algum *software* de representação molecular?
- 2) Segundo seu ponto de vista, os softwares de representação molecular auxiliam no processo de ensino-aprendizagem de química?
- 3) Se você teve alguma dificuldade na execução da tarefa, poderia enumerá-las?
- 4) Cite as possíveis vantagens da realização das atividades com o auxílio dos *screencasts*.

Estudando as respostas dos questionários, observou-se que 25% dos mesmos nunca haviam manuseado nenhum *software* de representação molecular até o momento da atividade.

Segundo um dos (as) acadêmicos (as) que respondeu à questão 2:

“De dificuldades encontrei um pouco no início, como nunca tinha usado dificultou encontrar os comandos no programa. Mas com o auxílio dos *screencasts* consegui descobrir o que precisava e desenhar algumas estruturas.”

Como todos os pesquisados conseguiram construir as moléculas propostas dentro do tempo estipulado, concluiu-se que os *screencasts* permitem, mesmo sem experiência prévia com o *Symyx Draw*, realizar a representação de estruturas químicas. As figuras 5, 6 e 7 exibem capturas de tela (*screenshots*) dos vídeos tutoriais apresentados aos voluntários. O exemplo dado nessas figuras representa os passos essenciais que devem ser executados para a substituição de elemento químico em uma molécula.

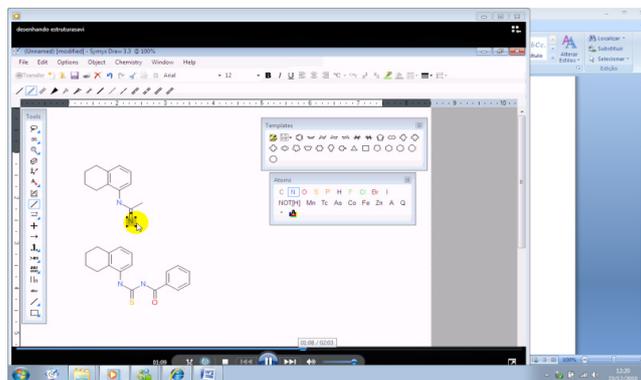


Figura 5 - Na molécula acima o átomo de nitrogênio será substituído por outro átomo. O círculo amarelo representa o ponto no qual o usuário deverá clicar para efetuar a operação.

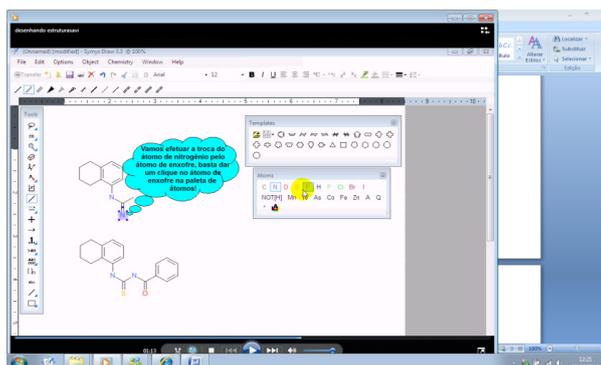


Figura 6 - O balão explicativo (azul) dá as instruções para o usuário substituir o elemento químico nitrogênio pelo elemento enxofre.

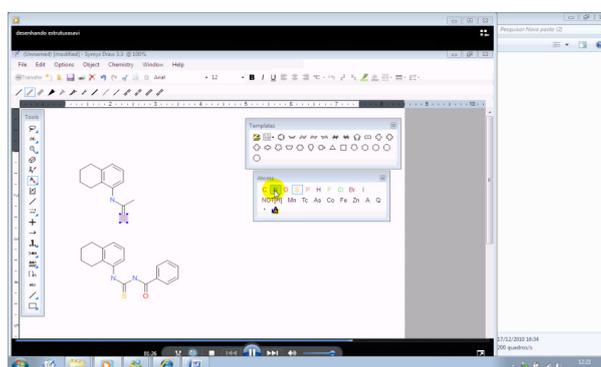


Figura 7 - O elemento foi substituído com sucesso.

Uma resposta recorrente entre os entrevistados (com relação à questão 2) foi com relação ao aprendizado que os *softwares* de representação molecular podem ajudar a desenvolver nos estudantes. Para eles, esse tipo de ferramenta auxilia não só na representação estrutural das moléculas, mas também na visualização da disposição espacial das ligações, dos ângulos entre as ligações e os elementos químicos, além de proporcionar um aspecto interessante e que permite prender a atenção do estudante, com potencial para provocar o interesse do aluno por química.

O que deve ser ressaltado, também, são as dificuldades encontradas no manuseio do *Symyx Draw* (questão 3), os acadêmicos que preferiram começar a construção das moléculas propostas antes de assistir aos vídeos comentaram que tiveram certa dificuldade em desenvolver a tarefa devido ao fato do *software* ter comandos em língua inglesa, assim como pela falta de prática na manipulação do *Symyx*. De acordo com os participantes, as dúvidas encontradas foram sanadas com a ajuda dos *screencasts*. Já no que se refere às vantagens do uso dos *screencasts* no manuseio do *Symyx Draw* (questão 4), temos os seguintes apontamentos, feitos pelos voluntários nessa pesquisa:

- Comandos básicos para desenvolvimento de moléculas;
- Norteiam o andamento da construção das estruturas;
- Fácil compreensão na visualização;
- Apontamentos feitos com o auxílio de balões;
- Exemplificação de diferentes estruturas;

- Identificação das ferramentas e templates disponíveis.

Nos site <<http://symyxtutorial.posterous.com>> encontram-se disponíveis o manual do *Symyx Draw 3.3*, o próprio software para *download* e 19 *screencasts* com duração entre 1 e 2 minutos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A técnica de *screencasting* mostrou-se de grande utilidade e permitiu entrever possibilidades a se explorar em trabalhos futuros. Pretende-se aplicar os *screencasts* com alunos de ensino médio e turmas de ensino superior, possibilitando assim a popularização dos softwares químicos (em particular o *Symyx Draw*) e de diminuir o abismo entre a academia e a escola. Considera-se que essa é uma forma de introduzir os jovens à pesquisa, pois as estruturas construídas em computador podem ser criadas ou apagadas com a mesma facilidade, além de contar com um aspecto visual atraente, que pode revelar mais talentos para a área da Química já na educação básica. Além disso, pode-se usar essa técnica como método de avaliação do aprendizado do conteúdo de representação de estruturas químicas. Essa possibilidade também será explorada em trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS

APPELT, H. R.; OLIVEIRA, J. S. de; MARTINS, M. M.; Modelos moleculares: passado, presente e futuro. *Experiências em Ensino de Ciências*, v. 4, n. 3, 2009. p. 7-16. Disponível em: <http://if.ufmt.br/eenci/artigos/Artigo_ID85/v4_n3_a2009.pdf>. Acesso em: 23 out. 2012.

CAMSTUDIO. Disponível em: <<http://goo.gl/ayr5L>>. Acesso em: 23 out. 2012.

CHEMSKETCH. Tutorial Disponível em: <<http://goo.gl/P2BQg>>. Acesso em: 23 out. 2012.

DOMINGUES, S. F. **Orbitais estruturas de átomos, moléculas e cristais**. 2. ed. São Paulo: Edart, 1969.

DUVAL, R. Registros de Representações Semióticas e Funcionamento Cognitivo da Compreensão em Matemática. In: ALCÂNTARA, S. D. **Aprendizagem em matemática: Registros de Representações Semióticas**. Coleção Papyrus Educação. 4 ed. Campinas: Papyrus, 2008.

POHL, W. G. **Visualizing the unseen**. In: FÓRUM EUROSCIENCE OPEN, Stokholm: 25 de agosto, 2004. Disponível em: <<http://goo.gl/TPkW9>>. Acesso em: 23 out. 2012.

SYMYX DRAW 3.3. Disponível em: <<http://goo.gl/pzcml>>. Acesso em: 23 out. 2012.