

Modelagem Molecular Computacional como objeto didático interativo para a investigação dos estados físicos da matéria.

Gabriel M. W. Kesserwani¹(IC), Claudia R. M Chaves²(FM), Fabiana Roberta G. S. Hussein³ (PQ) Marcos B. Gonçalves^{1*} (PQ). * e-mail: marcosb@utfpr.edu.br

- 1- Departamento de Física - Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR) – Curitiba PR
- 2- Escola Estadual Dom Pedro II – Curitiba PR
- 3- Departamento de Química - Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR) – Curitiba PR

Palavras-Chave: Modelagem Molecular, Ensino de Ciências, Novas Tecnologias na Educação.

Introdução

A modelagem molecular (MM) é a aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria através do uso de softwares computacionais. Neste trabalho utilizamos o software de visualização, criação e edição de moléculas e macromoléculas para auxiliar no aprendizado dos estados físicos da água. Para tanto, trabalhamos com o programa *Discovery Studio Visualizer*¹ para a criação de um *cluster* de moléculas de água nos estados sólido, líquido e gasoso; e o software NAMD², o qual executa a dinâmica molecular clássica nos três sistemas a fim de criar animações interativas e vídeos que estão disponíveis no *website* das referências 3 e 4. O material didático criado tem como proposta auxiliar no entendimento de propriedades macroscópicas com o auxílio da visão da modelagem molecular.

Resultados e Discussão

Este projeto está em fase de implementação na Escola Estadual Dom Pedro II em Curitiba e o material didático está disponível no *website* da referência 4. As atividades se concentram em apresentar os estados da matéria aos alunos utilizando um novo método baseado na modelagem molecular. Como um primeiro estudo de caso, iniciamos com a análise dos diferentes estados físicos da água. A primeira descrição será mostrar a representação hexagonal de um cristal em escala nanométrica, em que este se repete nos cristais de gelo visíveis a olho nu. O segundo modelo se refere

à água no estado líquido onde se verifica um maior grau de liberdade das moléculas de água, embora mantendo em média ligações frequentes com as moléculas vizinhas. Por fim, será descrito o estado gasoso, através de uma simulação de uma “gota de água” em nível molecular, onde foi removida a pressão externa a fim de se observar o fenômeno da evaporação.

Conclusões

Observamos que o uso da MM computacional é bastante inexplorado, embora haja uma gama de softwares de livre acesso disponíveis nas mais diferentes mídias. Desta forma este trabalho tem por objetivo divulgar a MM como uma ferramenta inovadora, interativa, intuitiva e criativa que permite que o aluno não apenas “fique inerte” aos conteúdos meramente expositivo ou “prontos para uso”, mas que possa construir e interagir com os temas discutidos em sala de aula.

Agradecimentos

Ao Departamento de Extensão (DEPEX) da UTFPR pela bolsa de estudo concedida.

A diretora Ruthi Mara Trentin Moraes da Escola Estadual Dom Pedro II.

¹ Discovery Studio Visualizer. Disponível em: <http://accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-discovery-studio/> Acesso em: 11/04/2016

² NAMD. Disponível em: www.ks.uiuc.edu/Research/namd/ Acesso em: 11/04/2016

³ Modelagem Molecular. Disponível em: <http://falcao14biz.wix.com/mmol> Acesso em: 11/04/2016

⁴ Modelagem Molecular no Ensino de Ciências. Disponível em: <http://modelagemmolecular.wix.com/marcos> Acesso em: 11/04/2016