

# Modelagem computacional: O uso do ArgusLab no ensino de química na educação superior.

Tayanne Andrade dos Santos\* (IC), Priscila Silva Carvalho<sup>1</sup> (IC), Tancredo Augusto de C. Fontineles<sup>1</sup> (PQ). tayanne.as@hotmail.com.br

<sup>1</sup>Instituto Federal da Bahia Campus Vitória da Conquista.

Palavras-Chave: Modelagem, Ensino Superior, ArgusLab.

## Introdução

Pesquisas recentes demonstram as dificuldades em se compreender conteúdos da Química, devido às abstrações conceituais que a rodeia<sup>1</sup>. Desta forma tem-se buscado novas metodologias no ensino de química para torná-la mais atrativa e compreensiva. Um dos métodos que está sendo utilizado pelo meio científico para melhorar o ensino de química é a modelagem computacional, que atualmente esta sendo levada ao meio acadêmico como forma alternativa para o ensino de química.

O software ArgusLab é um programa de modelagem computacional gratuito, que além de usar a mecânica molecular, ele utiliza métodos semi-empíricos (EHT, PM3, AM1, MNDO E ZINDO) e métodos quânticos (HF) para otimização de geometrias e diversos tipos de cálculos, como energias, dipolos, comprimentos e ângulos de ligação, espectros, etc.

## Resultados e Discussão

O uso da computação numa abordagem educacional vem constantemente auxiliando na formação de educandos e futuros educadores. Deste modo o curso de "Modelagem Computacional: uma proposta para o ensino na Educação Superior" foi desenvolvido como projeto de extensão no Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia – IFBA, campus de Vitória da Conquista para os alunos do curso de Licenciatura em Química com o intuito de levar aos alunos a ferramenta da modelagem computacional aplicada a Química, como forma de fazer a Química Teórica no aprendizado em sala de aula.

Inicialmente foram realizados questionários e aulas expositivas, para em seguida, serem realizadas aulas demonstrativas acerca do software ArgusLab.<sup>2</sup> Ao final do curso foi realizada a aplicação de outro questionário com o intuito de se identificar a eficácia ou não do ArgusLab no processo de ensino aprendizagem dos discentes. Identificamos assim que para os alunos, as ferramentas mais importantes no software foram: geometria molecular, os cálculos de energia e a possibilidade de se realizar estruturas de ressonância e hibridização. Quando questionado em quais conteúdos eles utilizariam o programa para a

realização de explicações no Ensino Médio, 38% responderam no conteúdo de ligações químicas, 25% relataram geometria molecular, tendo o restante listado conteúdos de química orgânica.

Os alunos citaram ainda uma gama relativamente grande de conteúdos que podem ser ensinados através do software, sendo este usado como método alternativo para o ensino de química. Outro fato importante relatado por eles foi o de alguns já estarem utilizando o software em suas aulas no ensino médio e também nos estágios curriculares obrigatórios do IFBA, mostrando assim a importância de abordagens inovadoras no ensino de química e também do valor que deve ser dado a esse tipo de projeto no ensino superior. Estes alunos relataram ainda que o uso desta metodologia esta sendo realizado com muito êxito e que perceberam uma melhora significativa na compreensão dos conteúdos por parte dos alunos do ensino médio.

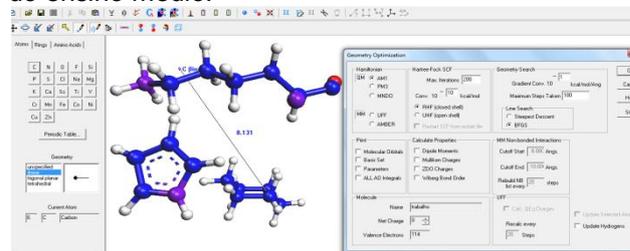


Figura 01. Editor do ArgusLab mostrando um Sistema químico analisado durante o curso.

## Conclusões

Concluiu-se que o software ArgusLab mostrou-se uma ótima ferramenta educacional no ensino de química devido a sua abrangência de técnicas e funções que auxiliam no processo de ensino-aprendizagem dos alunos.

## Agradecimentos

Ao Professor Dr. Tancredo Fontineles e ao IFBA por nos proporcionar um ambiente de aprendizagem.

<sup>1</sup> O. Santos; R. P. Silva<sup>1</sup>; D. Andrade; J. P. M. Lima. **Dificuldades e motivações de aprendizagem em Química de alunos do ensino médio investigadas em ações do (PIBID/UFSC/Química)**, Revista Scientia Plena, v. 9, n.7, 2013.

<sup>2</sup>ArgusLab.Disponível em <http://www.arguslab.com/arguslab.com/Welcome.html> Acesso em: 03 novembro de 2015.