

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
DIRETORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
ESPECIALIZAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS**

CLEITON DOMINGOS MACIEL

**APLICAÇÕES DE TÉCNICAS DE MODELAGEM MOLECULAR COMO
RECURSO DIDÁTICO NO ENSINO DE CIÊNCIAS**

MONOGRAFIA DE ESPECIALIZAÇÃO

MEDIANEIRA

2018

CLEITON DOMINGOS MACIEL



**APLICAÇÕES DE TÉCNICAS DE MODELAGEM MOLECULAR COMO
RECURSO DIDÁTICO NO ENSINO DE CIÊNCIAS**

Monografia apresentada como requisito parcial à obtenção do título de Especialista na Pós Graduação em Ensino de Ciências – Polo UAB do Município de Barueri, Modalidade de Ensino a Distância, da Universidade Tecnológica Federal do Paraná – UTFPR – Câmpus Medianeira.

EDUCAÇÃO À DISTÂNCIA Orientadora: Prof^a. Dr. Jaime da Costa Cedran

MEDIANEIRA

2018



TERMO DE APROVAÇÃO

Titulo da Monografia

Por

Cleiton Domingos Maciel

Esta monografia foi apresentada às 10:55 h do dia 18 **de agosto de 2018** como requisito parcial para a obtenção do título de Especialista no Curso de Especialização Ensino de Ciências – Polo de Barueri, Modalidade de Ensino a Distância, da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Câmpus Medianeira. O candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Prof^a. Dr. Jaime da Costa Cedran
UTFPR – Câmpus Medianeira
(orientadora)

Prof Dr.
UTFPR – Câmpus Medianeira

Prof^a. Ma.
UTFPR – Câmpus Medianeira

Dedico este trabalho a todos que tem me inspirado a ser professor:
Minha família, meus alunos e colegas de profissão.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, família e esposa pelo apoio dedicação e incentivo durante o curso.

Ao meu orientado professora Dr. *Jaime* pelas ideias e pelo incentivo no processo de orientação.

Agradeço a todos os professores do curso de Especialização em Ensino de Ciências, professores da UTFPR, Câmpus Medianeira.

Agradeço aos tutores presenciais e a distância pela prestatividade durante o curso.

Agradeço a todos os colegas que incentivaram a conclusão de mais um curso de pós-graduação

“O significado das crises consiste exatamente no fato de que indicam que é chegada a ocasião para renovar os instrumentos.” (THOMAS KUHN)

RESUMO

MACIEL, Cleiton Domingos. Aplicações de Técnicas de Modelagem Molecular como Recurso Didático no Ensino de Ciências. 2018. 51f. (número de folhas). Monografia (Especialização em Ensino de Ciências). Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Medianeira, 2018.

O objetivo deste trabalho de conclusão de curso repousa sobre uma investigação a respeito de desenvolvimento de Tecnologias da Informação e Comunicação visando, em especial, a criação de Objetos de Aprendizagem direcionados ao Ensino de Ciências. Para conduzir este estudo, técnicas de modelagem molecular foram empregadas para produção de recursos visuais a partir do uso de softwares específicos usados em investigações de fenômenos físicos e químicos. A modelagem molecular surge como uma ferramenta importante para explicar e proporcionar uma visualização do ambiente químico investigado. O trabalho propõe a modelagem de interações intermoleculares de alguns compostos químicos conhecidos, na sua temperatura de ebulição. O problema a ser modelado consiste em mostrar que alguns hidretos apresentam comportamento em desacordo com a tendência observada devido às interações intermoleculares de natureza específica. Os recursos digitais gerados a partir da modelagem destes fenômenos foram aplicados para o desenvolvimento de Objetos de Aprendizagem usando a metodologia INTERA, desenvolvida por professores da UFABC. Os recursos desenvolvidos a partir desta metodologia podem ser usados para apoiar o ensino e a aprendizagem de diversos conceitos nas aulas de ciências do ensino básico. Os resultados obtidos mostraram que a elaboração a modelagem molecular é uma ferramenta adequada para a elaboração de um recurso instrucional.

Palavras-chave: Simulação Computacional, Objetos de Aprendizagem, Tecnologias da Informação e Comunicação, Ensino de Ciências, Metodologia Intera.

ABSTRACT

MACIEL, Cleiton Domingos. Applications of Molecular Modeling Techniques as Didactic Resources in Science Teaching. 2018. 51f. (Número de folhas) Monografia (Especialização em Ensino de Ciências). Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Medianeira, 2018.

The goal of this monograph is the performing of an investigation about the development of Information and Communication Technologies aiming the elaboration of Learning Objects directed to the Science Teaching. In order to conduct this study, we employed molecular modeling techniques to produce visual resources from the specific softwares used in investigations of chemical and physical phenomena. Molecular modeling emerges as an important tool to explain and provide visualization of the investigated chemical environment. In this context, the work proposes the modeling of intermolecular interactions of some chemical compounds at their the boiling point. The problem to be modeled is to show that some hydrides exhibit behavior in disagreement with the observed tendency due to intermolecular interactions of a specific nature. The digital resources generated from the modeling of these phenomena were applied to the development of Learning Objects using the INTERA methodology, developed by UFABC researchers. The resources developed from this methodology can be used to support the teaching and learning of several concepts in basic science classes. The results obtained showed that molecular modeling is an adequate tool for the elaboration of an instructional resource.

Keywords: Computational simulation, Learning Objects, Information and Communication Technologies, Teaching Chemistry, Intera Methodology.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Blocos de Lego® Representando a Metáfora do Lego.	14
Figura 2. Metáfora do Átomo.....	15
Figura 3. Exemplo de partículas interagentes em uma simulação de dinâmica molecular. Os vetores indicam as interações entre as partículas.....	25
Figura 4. Ponto de Ebulição de Hidretos dos Grupos IV, V, VI e VII.....	34
Figura 5. Caixas de simulação dos compostos estudados: a) H ₂ O, b) H ₂ S, c) HF e d) HCl. Figuras produzidas pelo software VMD (Visual Molecular Dynamics) (HUMPHREY, 1996).....	36
Figura 6. Regiões Estudadas em Caixas de Simulação dos Compostos Estudados: a) H ₂ O, b) H ₂ S, c) HF e d) HCl.	37
Figura 7. Modelo SPC para a Molécula de Água.	38
Figura 8. Configurações da Trajetória de Simulação.....	39
Figura 9. Malha de Ligações de Hidrogênio para uma Configuração Aleatória do Sistema. São Mostradas Apenas Algumas Ligações de Hidrogênio Seleccionadas. As distâncias entre os átomos são medidas em Angstroms (10 ⁻¹⁰ m).....	40
Figura 10. Malha de Ligações de Hidrogênio para duas configurações aleatórias à 25 °C (esquerda) e à 100 °C (direita).....	40
Figura 11. Molécula de H ₂ S e Alguns Parâmetros Estruturais.	41
Figura 12. Configuração Aleatória mostrando uma região de moléculas de H ₂ S selecionadas.	42
Figura 13. Comparação entre os arranjos do H ₂ S (esquerda) e H ₂ O (direita).....	42
Figura 14. Molécula de HCl. Em branco, o átomo de H e vermelho o átomo de F. A seta vermelha indica o vetor momento de dipolo.	43
Figura 15. Formação de Ligações de Hidrogênio entre moléculas de HF.	44
Figura 16. Configurações do HF tiradas aleatoriamente da trajetória da simulação.	44
Figura 17. Molécula de HCl. Em branco, o átomo de H e azul o átomo de Cl. A seta vermelha indica o vetor momento de dipolo.	45
Figura 18. Configurações do HCl tiradas aleatoriamente da trajetória da simulação.	46

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Papeis na metodologia INTERA	21
Tabela 2. Equipe executora para a elaboração o OA.	26
Tabela 3. Artefato de contextualização da metodologia INTERA.	26
Tabela 4. Artefato de coleta de requisitos da metodologia INTERA.	28
Tabela 5. Momento de Dipolo (em debye) dos compostos investigados neste trabalho.	45

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
2 OBJETIVOS	13
2.1 OBJETIVO GERAL	13
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	13
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	13
3.1 TIPOS DE OBJETOS DE APRENDIZAGEM.....	16
3.2 CARACTERÍSTICAS DE OBJETOS DE APRENDIZAGEM.....	16
3.3 METODOLOGIA INTERA.....	19
3.4 REUSABILIDADE NO CONTEXTO DA METODOLOGIA INTERA	24
4 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS	24
4.1.1 Dinâmica Molecular	24
4.2 ETAPAS DA PRODUÇÃO DO OBJETO DE APRENDIZAGEM	25
4.2.1 Funções dos participantes do projeto.....	26
4.2.2 Etapa de contextualização	26
4.2.3 Etapa de Requisitos	27
4.2.4 Etapa de Arquitetura.....	31
4.2.5 Etapa de desenvolvimento	32
4.2.6 Etapa de testes	32
4.2.7 Etapa de disponibilização.....	33
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	33
5.1 SIMULAÇÕES DOS HIDRETOS.....	35
5.1.1 Detalhes Computacionais.....	35
5.1.2 Água (H ₂ O).....	37
5.1.3 Sulfeto de Hidrogênio (H ₂ S)	41
5.1.4 Fluoreto de Hidrogênio (HF).....	43
5.1.5 Cloreto de Hidrogênio (HCl)	44
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	47
REFERÊNCIAS	49

1 INTRODUÇÃO

As mudanças expressivas que tem ocorrido atualmente na sociedade contemporânea resultam da modernização dos recursos tecnológicos existentes, incluindo os veículos de comunicação. Essa evolução nos meios de comunicação permite que grandes quantidades de informação sejam trocadas a todo o momento. A massificação da comunicação causa impactos nas mais diversas áreas, desde o desenvolvimento econômico até a área da educação (PEREIRA, 2010).

No caso do ramo educacional, a abundância na quantidade de recursos tecnológicos disponíveis é bastante positiva, visto que surge como uma opção metodológica que pode contribuir significativamente para o processo de ensino-aprendizagem. Dentre as ferramentas disponíveis, as novas Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs) ocupam um lugar de destaque.

As TICs são recursos tecnológicos cada vez mais presentes no cotidiano das pessoas, seja dentro ou fora das unidades escolares. A diversidade de artefatos tecnológicos existentes atualmente conduz à novas formas de acesso ao conhecimento. A agregação destes recursos na realidade educacional atual promove alterações significativas na dinâmica de sala de aula considerada nos dias de hoje (LEVY, 2010). Contudo, a simples introdução de artefatos interativos não garante por si só ganhos imediatos na qualidade do aprendizado (RIOS, 2014). Desta forma, para promover o uso proveitoso de TICs, o professor passar a interferir frente a troca de informações, analisando o conteúdo acessado e propondo novos significados quando necessário (MASETTO, 2000).

Atualmente, uma quantidade expressiva de materiais desenvolvidos para uso educacional pode ser encontrado na internet. Em geral, grande parte deste material é pouco aproveitada pelo professor, seja pela dificuldade em selecionar materiais mais específicos à sua prática, ou mesmo pela falta de habilidade em adaptar um recurso tecnológico desenvolvido para contextos mais gerais. A fim de dirimir essas dificuldades foi criado o conceito de Objetos de Aprendizagem (OA), que agrega as necessidades da área educacional com ferramentas da Ciência da Computação. OA são desenvolvidos com o intuito de auxiliar o professor no desenvolvimento de estratégias pedagógicas que visam melhorias no aprendizado (WILEY, 2000).

Em particular, no caso do ensino de Ciências, recursos tecnológicos podem ser usados com sucesso para a descrição de fenômenos usando modelos, que pode ser definido como uma representação simplificada e idealizada de um sistema, mas que ainda permite representar a essência do seu comportamento e/ou propriedades, seja com alto ou baixo grau de precisão. Modelos têm sido empregados para estudar problemas científicos complexos em diversas áreas, como a Física, Química e Biologia. A aplicação de modelos para estudar relações entre estrutura e propriedade da matéria constitui uma linha de pesquisa conhecida como modelagem molecular (SANTOS, 2001).

A modelagem molecular é uma área que nasceu com o propósito de investigar sistemas reais por meio de modelos simplificados, antecipando a caracterização de estruturas moleculares antes de sua síntese em laboratório. O modelo empregado é considerado validado quando é capaz de reproduzir propriedades do sistema real. Do ponto de vista computacional, um leque de novas possibilidades para o ensino de ciências é aberto a partir do uso de modelagem molecular, que pode ser integrada à produção de recursos digitais tais como Objetos de Aprendizagem.

Por meio da utilização de modelos, diversos OA têm sido desenvolvidos com o intuito de reproduzir fenômenos moleculares conhecidos em Ciências e que são importantes para a aprendizagem de diversos conceitos. Várias plataformas têm hospedado OA com temática científica que engloba uma vasta gama de conteúdo. Entretanto, ainda são poucos (ou quase inexistentes) os OA que são elaborados a partir de modelagem molecular. Portanto, este trabalho procura dar uma contribuição para a área de ensino de Ciências, propondo o desenvolvimento de um OA a partir de modelagem molecular e simulação computacional.

Diante da necessidade de desenvolvimento de material educacional de qualidade, este trabalho de conclusão de curso propõe a elaboração de TICs, mais especificamente, a criação de Objetos de Aprendizagem direcionados ao Ensino de Ciências e Tecnologia. É proposta a criação de recursos visuais a partir do auxílio da modelagem molecular. Para este fim, técnicas de simulação computacional serão conduzidas com a finalidade de ilustrar um fenômeno químico de difícil visualização pelo estudante, o qual é a formação de interações intermoleculares entre diferentes compostos químicos. Este fenômeno requer uma alta capacidade de abstração e o

Objeto de Aprendizagem é uma ferramenta com alto potencial instrutivo, capaz de favorecer a aquisição da compreensão deste fenômeno pelo estudante.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Propor a produção de recursos audiovisuais para o uso no ensino de ciências empregando técnicas computacionais de modelagem molecular.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Analisar a contribuição da modelagem computacional para a compreensão de fenômenos em Ciências;
- Desenvolver modelos em ciências para aplicação em ensino;
- Explorar o uso de métodos computacionais para desenvolvimento de recursos visuais;
- Refletir sobre a utilização de recursos audiovisuais como ferramentas de diversificação no ensino;
- Desenvolver um protocolo para a elaboração de OA a partir dos artefatos do uso de modelos;
- Possibilitar a conexão entre a abordagem teórica em ciências com a sala de aula.

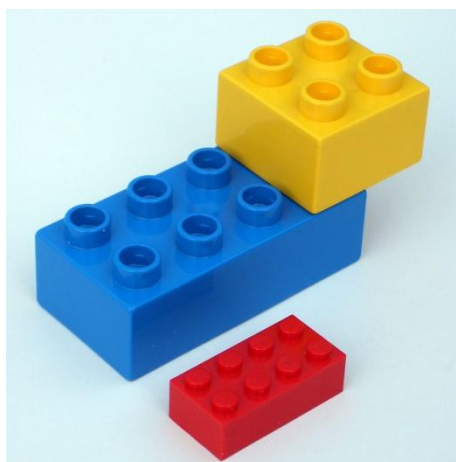
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Objeto de aprendizagem é um conceito que despontou no final dos anos 1990 e, devido à franca expansão do ensino a distância, seu uso tornou-se bastante popular. O termo Objeto de Aprendizagem passou a ser vinculado à descrição de materiais didáticos para apoio ao ensino e aprendizagem no início dos anos 2000 e não há um consenso sobre a sua definição (TORRÃO, 2009), que varia de acordo com a abordagem proposta e os aspectos educacionais envolvidos na sua utilização.

Para Wiley (2000), um OA “[...] é qualquer recurso digital que pode ser reusado para apoiar a aprendizagem”. Nesta curta sentença, que define o conceito de OA, observam-se palavras importantes, que dá origem a novos conceitos atribuídos ao OA. Por exemplo, o conceito de reuso de um OA, que é uma das características técnicas mais notáveis destes recursos. A reusabilidade é uma propriedade que diferencia um OA de outros artefatos tecnológicos empregados na educação. A afirmação acima faz referência ao apoio à aprendizagem. Este termo reflete outra característica singular dos OA que é propósito para o qual o OA está sendo desenvolvido, ou seja, a intenção de aprendizagem também é considerada no desenvolvimento do OA.

Outra definição aceita de OA é atribuída a Hodgins (2000, 2002), autor que comparou o objeto de aprendizagem a blocos de conhecimento. Este conceito ficou conhecido como Metáfora do Lego®, no qual se respeita à sua propriedade de reuso. Nesta metáfora, os OA são comparados a blocos do brinquedo Lego que podem ser conectados a outros blocos, combinando e formando novas estruturas. Da mesma forma, estruturas maiores podem ser desmontadas e formar novas estruturas menores. Esta metáfora simboliza que um OA pode desempenhar várias funções pedagógicas conforme as necessidades do estudante (HODGINS, 2002), podendo ser empregados em diferentes contextos de aprendizagem.

Figura 1. Blocos de Lego® Representando a Metáfora do Lego.

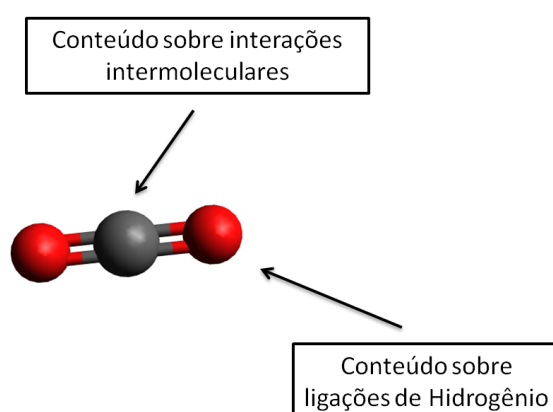


Fonte: Wikipedia (2018).

A Metáfora do Lego, segundo Wiley (2003), é insuficiente em alguns aspectos para definir o que são OA. A metáfora explica a ideia de OA de maneira bastante simplista, ao apontá-los como “blocos de instrução” que podem ser associados para formação de estruturas maiores. No entanto, algumas características do brinquedo não podem ser comparadas ao OA. Combinar indiscriminadamente qualquer bloco de Lego e/ou uni-los de qualquer maneira não são características encontradas nos OA, pois se assim fossem, correr-se-ia o risco de perder grande parte do potencial instrutivo destes recursos. Sendo assim, vale apontar que a comparação entre os blocos de Lego e o OA refere-se ao reuso, mas é necessário considerar que o combinar OA não é tarefa de simples execução.

O mesmo autor que contestou a metáfora do Lego propõe outra metáfora, mas desta vez considerando as propriedades de reuso e também a combinação adequada entre blocos de instrução. Esta metáfora compara o átomo a um bloco de instrução, que pode ser combinado com outros átomos formando estruturas maiores, mas levando em considerando suas especificidades. Da mesma forma que um átomo não pode ser combinado com qualquer outro tipo de átomo, nem todo OA pode ser combinado com outros OA, pois é necessário que estas combinações estejam dentro de um mesmo contexto e os conteúdos estejam relacionados.

Figura 2. Metáfora do Átomo.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

Outras definições de OA ainda podem ser consideradas. Koohang e Harma (2007) propõem uma definição mais abrangente para OA. Para os autores, OA não são artefatos unicamente digitais, mas sim entidades que podem ser adaptadas para

alcançar determinados objetivos instrucionais. Neste sentido, o OA pode ser considerado como um conjunto de ferramentas de instrução que podem ser (re)arranjadas que tem a intenção de ampliar o rol de opções do professor dentro do processo de ensino-aprendizagem. Como é possível perceber, todas as definições de OA colocadas acima, apesar de suas particularidades, apresentam claros pontos em comum.

3.1 TIPOS DE OBJETOS DE APRENDIZAGEM

Considerando a definição de OA proposta por Wiley (2000) como sendo qualquer recurso digital desenvolvido para apoiar o processo de aprendizagem, vários recursos podem ser considerados como OA, tais como imagens, vídeos, animações, simulações, entre outros. Abaixo, são apresentadas de forma resumida as características dos tipos de OA discutido neste trabalho:

Imagem: É considerado um tipo de OA, pois pode servir como apoio para a aprendizagem de um determinado conceito.

Vídeo: Sequência de imagens em movimento que gera uma imagem animada também pode ser utilizada para fins educativos. Neste caso é considerado um OA.

3.2 CARACTERÍSTICAS DE OBJETOS DE APRENDIZAGEM

Um Objeto de Aprendizagem deve ser concebido levando em consideração suas características técnicas e pedagógicas, Do ponto de vista pedagógico, é imprescindível que o OA atue como uma ferramenta para potencialização da aprendizagem (DIAS, 2009). Para que este objetivo seja atingido, alguns aspectos pedagógicos importantes devem ser considerados na concepção do OA: (BRAGA, 2012; GALAFASSI et al., 2014).

Interatividade: indica o nível de interação entre o aluno com o conteúdo do OA. Isso é medido por meio ações (escutar, ver, responder, etc.) requerida pelo OA;

Autonomia: mostra se o OA estimula o aluno tomar decisões;

Cooperação: está relacionado com a possibilidade de trabalho coletivo entre os alunos a respeito do conteúdo estudado;

Cognição: está relacionado com os aspectos cognitivos do aluno durante o processo;

Afetividade: está relacionado com o aspecto motivacional do aluno ao interagir com o OA em relação à aprendizagem.

Do ponto de vista técnico, algumas características são consideradas:

Disponibilidade: característica relacionada com a disponibilidade para utilização do OA;

Acessibilidade: está relacionado ao acesso do OA por diferentes tipos de usuários (por exemplo: pessoas com necessidades especiais), diferentes locais de acesso (por exemplo, por computadores com ou sem acesso à Internet) e por diferentes tipos de dispositivos (por exemplo: *tablets*, celulares, computadores com diferentes sistemas operacionais, etc.);

Confiabilidade: característica relacionada à ausência de problemas técnicos e/ou de conteúdo pedagógico;

Portabilidade: capacidade do OA de ser alocado ou instalado em diferentes de tipos de ambientes virtuais ou sistemas operacionais;

Facilidade de instalação: indica, caso seja necessário, o nível de facilidade para instalação do OA;

Interoperabilidade: está relacionado ao esforço de integração dos dados do OA em vários sistemas diferentes;

Usabilidade: característica técnica relacionada à facilidade de utilização do OA pelo público-alvo (alunos e professores);

Manutenibilidade: medida do esforço para realizar alterações no OA quando necessário;

Granularidade: está relacionado com a extensão do OA, ou seja, o quanto um OA é composto por componentes menores reutilizáveis;

Agregação: esta característica indica a capacidade de agregação de componentes de um OA;

Durabilidade: está relacionado se o OA funciona corretamente caso ocorra mudanças ou problemas técnicos no ambiente que está hospedando o OA (repositório).

Reusabilidade: está relacionado com as possibilidades de reutilização do OA em diferentes contextos. Como já discutido em outros momentos, esta é uma das características técnicas mais importantes de um OA.

Metadados: Dados que servem para indexação do OA, indicando suas propriedades, autoria, assunto, etc.

Vale destacar que um OA não precisa necessariamente possuir todas as características técnicas e pedagógicas apresentadas acima. Porém, quanto mais características estiverem presentes no OA, mais pronunciada será sua reusabilidade. As características de um OA são empregadas para avaliar suas propriedades de reutilização.

Alguns aspectos são importantes para garantir as propriedades de reusabilidade do OA e, portanto, podem ser discutidos com maior profundidade. Por exemplo, a granularidade, que é uma característica é uma questão muito importante a ser discutida durante o processo de elaboração de um OA, sobre qual seria o granularidade ideal de um OA (SILVA, 2004). Na verdade, não existe um limite de tamanho adotado para o OA.

No entanto, o *The Maise Center's e-learning Consortium* (2003) sugere uma hierarquia do grau de granularidade para OA. Para um melhor entendimento desta hierarquia, é proposto um Modelo de Objetos de Conteúdo, composta por cinco níveis, que são discutidos brevemente a seguir:

-primeiro nível: neste nível estão os recursos que se encontram em condições elementares, tais como áudio, texto, imagens, animações ou simulações. Neste nível, estes recursos apresentam alto grau de reusabilidade.

-segundo nível: é composto pelo agrupamento dos recursos do nível anterior, formando os blocos de informação.

-terceiro nível: conhecido também como objetos de aplicação é formado pelo agrupamento de blocos de informação com o intuito de produzir uma situação de aprendizagem.

-quarto nível: conhecido também como “Lições ou Capítulos” é produzido com objetivos instrucionais mais complexos.

- quinto nível: conhecido também como “Cursos ou Livros”, tem a mesma característica do quarto nível. Estes dois últimos níveis estão dentro de um alto nível de contextualização. Porém, possuem menor grau de reutilização em contextos diferentes.

O grau de granularidade é inversamente proporcional a outra característica de um OA, que é nível de agregação de um OA. A agregação de um OA compreende a sua composição em componentes menores. Desta forma, quanto maior for a granularidade de um OA, menor será seu nível de agregação e, portanto, mais simples será sua composição e menos complexo será o este artefato.

3.3 METODOLOGIA INTERA

Com o intuito de elaborar OA de alta qualidade instrucional, pesquisadores da Universidade Federal do ABC propuseram a metodologia INTERA (Inteligência, Tecnologias Educacionais e Recursos Acessíveis) (BRAGA, 2013). Esta metodologia

é baseada na abordagem ADDIE de design instrucional (BRANCH, 2009) e tem como prioridade o reuso e material instrucional de qualidade. Esta metodologia se constitui em um conjunto de processos para a produção de recursos digitais visando o aprendizado englobando qualquer tipo de OA, sendo irrelevante seu nível de complexidade.

Um dos principais diferenciais da metodologia INTERA em comparação às outras abordagens que tratam da elaboração de OA é o conceito de iteratividade. Nesta metodologia, desenvolver um OA significa realizar um projeto que implica no ciclo de vida de um OA, que possuem fases que estão interligadas desde o início até o final da elaboração do processo. A metodologia é caracterizada por possuir diversos componentes empregados ao longo do processo, tais como: fases, papéis, etapas e artefatos. Segue abaixo uma breve explanação de cada componente da metodologia INTERA:

Fases: correspondem aos períodos das etapas da metodologia, como em um cronograma de trabalho. Vale destacar que uma etapa pode contemplar mais de uma fase do projeto. Normalmente, as fases são sequenciais e são marcadas pela finalização de alguma parte do OA. A metodologia INTERA é marcada por três fases: inicial, intermediária e de transição.

Papeis: é o componente que define as funções dos indivíduos dentro do processo de produção do OA, onde uma mesma pessoa pode assumir mais de uma função. Definir a função de cada indivíduo dentro do processo é de grande relevância para o desenvolvimento bem sucedido de um OA. Esta componente foi estruturada baseada no processo unificado de engenharia de software (RUP) (KRUTCHEN, 2004), no modelo de design instrucional ADDIE (BRANCH, 2009) e no processo RIVED (RIVED 2008).

Dentre os papéis comumente existentes na metodologia INTERA, destacam-se o analista, conteudista, gerente de projetos, demandante, designer de interface, designer instrucional, equipe de desenvolvimento e equipe de teste. Cada papel tem funções bastante específicas frente ao desenvolvimento do OA.

Tabela 1. Papeis na metodologia INTERA

Papel	Responsabilidade
Analista	Fazer levantamento e análise do contexto dos requisitos do OA, planejamento dos testes.
Conteudista	Elaborar e avaliar os conteúdos, fazer revisões.
Demandante	Solicitante do OA.
Gerente de Projetos	Planejar e gerenciar o projeto.
Designer de Interface	Desenvolver a interface do projeto (identidade visual).
Designer Instrucional	Planejar e avaliar o projeto do ponto de vista pedagógico.
Designer Técnico	Guiar o desenvolvimento do projeto do ponto de vista técnico.
Equipe de desenvolvimento	Desenvolver o OA.
Equipe de teste	Realizar diferentes tipos de testes do OA.

Artefatos: São dados que são gerados pela equipe de desenvolvimento do OA. No caso do desenvolvimento de um software, por exemplo, o código-fonte seria considerado um artefato.

Etapas: Compõe um conjunto de atividades relacionadas a alguma área. Uma etapa pode ter a sua duração de acordo com o tipo e complexidade do OA. Além disso, uma etapa pode ser concomitante ou subsequente à outras etapas, variando de acordo com o tipo e complexidade do OA. As etapas que podem estar presentes dentro da metodologia INTERA recebem nomes específicos, tais como: contextualização, requisitos, arquitetura, desenvolvimento, testes e qualidade, disponibilização, avaliação, gestão de projetos e ambiente de padrões. Cabe ressaltar neste ponto que, nem todas as etapas são contempladas durante a produção de um OA. Abaixo, segue uma breve descrição de cada uma das etapas destacadas anteriormente:

Contextualização: nesta etapa ocorre a definição do contexto pedagógico no qual se insere o OA em desenvolvimento. Os desenvolvedores da metodologia INTERA recomendam que esta seja a primeira etapa a ser explorada na produção do artefato pois, as condições para o qual se desenvolverá o OA são definidas neste momento. Durante esta etapa, desenvolve-se o documento de contextualização, que registra entradas, práticas e saídas da contextualização.

Requisitos: Neste momento, enumeram-se as expectativas a respeito do OA, incluindo suas características técnicas e pedagógicas. É uma etapa que requer a presença do professor. Nesta etapa, a entrada é alimentada pela saída obtida na etapa de contextualização. A coleta de requisitos (práticas) pode ser realizada a partir de entrevistas com o professor demandante do OA, preenchimento de formulários, sessões de “*brainstorm*”, etc. Por fim, esta etapa produz um documento elencando todas as informações que foram obtidas.

Arquitetura: esta etapa consiste na análise dos requisitos coletados na etapa anterior que levará a elaboração de um esboço do OA. Este esboço requer uma escolha dentre as tecnologias disponíveis e mais apropriadas para a sua elaboração. O reuso é um conceito que também passa a ser considerado neste momento por meio da definição dos seus componentes. Nesta etapa, as entradas consistem nos dados das saídas das etapas de contextualização e de requisitos. Dependendo do tipo de OA, pode ocorrer variação das práticas adotadas nesta etapa. A saída desta etapa também pode variar, pois depende do tipo de OA em desenvolvimento.

Desenvolvimento: Durante esta etapa ocorre o desenvolvimento do OA e de todos os componentes de reuso. A entrada desta etapa consiste nas saídas das fases de contextualização, requisitos e arquitetura. Assim como já descrito nas etapas anterior, as práticas que compõe a etapa de desenvolvimento variam com o OA. Como saída, esta etapa produz diferentes artefatos, como o OA, o código-fonte, manuais de usuário, sugestões de práticas pedagógicas a serem trabalhadas em conjunto com o OA desenvolvido e também os direitos autorais e patrimoniais do OA.

Testes e Qualidade: Esta etapa compreende o momento onde o OA passa a ser validado do ponto de vista técnico e também no quesito pedagógico, de acordo com as características discutidas nas etapas anteriores. As entradas para esta etapa podem ser as saídas das etapas anteriores (contextualização, requisitos, arquitetura, desenvolvimento). Durante esta etapa, são realizados testes de funcionalidade, de acessibilidade, de confiabilidade técnica, etc. O objeto de aprendizagem é testado e tem sua qualidade comprovada, sendo esta a saída desta etapa.

Disponibilização: esta etapa consiste na publicação do OA e das documentações inerentes ao uso e instalação do OA. Como entrada, esta etapa absorve a saída da fase de teste e desenvolvimento. É conveniente que os OA sejam disponibilizados em repositórios específicos para esta finalidade. A saída desta etapa será um objeto com potencial para reuso.

Avaliação: Esta etapa ocorre durante a aplicação do OA em sala de aula visando a avaliação do aprendizado. Como entrada, esta etapa adota as saídas das etapas de desenvolvimentos e testes. As práticas desta etapa consistem na elaboração de planos de avaliação do OA, que pode ocorrer no meio real ou virtual. Os relatos acerca da avaliação do OA e/ou também uma análise crítica sobre o seu ganho pedagógico podem ser aplicados como uma saída desta etapa.

Gestão de projetos: Esta etapa transcorre por todo o processo de desenvolvimento do OA, representando a execução das funções do coordenador do projeto, que acompanha e analisa os custos, cronogramas e as funções de todos os indivíduos envolvidos no processo. Para esta etapa, as entradas podem ser as saídas das etapas de contextualização e requisitos. As práticas estão relacionadas com técnicas de gestão de projetos, como elaboração de cronogramas, estimativa de tempo e custos do projeto, etc. Como saída, esta etapa pode englobar o cronograma de desenvolvimento, estimativa de custos, alocação de atividades para cada indivíduo, entre outras.

Ambiente: Durante esta etapa é que se realiza o controle do ambiente técnico de desenvolvimento do OA. Como exemplo, pode-se apontar a realização de *backups*

durante o processo, o controle das versões que estão sendo produzidas pelo OA, etc.

3.4 REUSABILIDADE NO CONTEXTO DA METODOLOGIA INTERA

A qualidade de um OA está diretamente relacionada com a minimização dos erros e/ou problemas técnicos e pedagógicos. Entretanto, considera-se também que produção de um OA com qualidade reconhecida deverá comportar diversas características de reuso. Quanto maior o número de características de reuso tiver o OA, maior é o seu potencial para cumprir o seu papel pedagógico.

O reuso é uma das dificuldades mais difíceis de serem contempladas na maioria dos OA disponíveis. Grande parte dos materiais disponíveis, apesar de seu conteúdo instrucional, não podem ser considerados OA, pois não podem ser aproveitados em outras situações de aprendizagem. Neste sentido, a produção de OA com propriedades de reuso acaba sendo uma tarefa de importância ímpar.

4 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

4.1 MODELAGEM MOLECULAR

4.1.1 Dinâmica Molecular

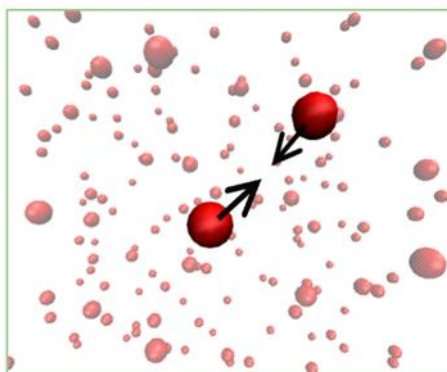
Técnicas de modelagem molecular podem ser empregadas para produção de recursos visuais que reproduzam as propriedades de compostos químicos com descrição do comportamento da matéria com detalhamento microscópico. De forma geral, modelagem molecular é um conjunto de técnicas teóricas e/ou computacionais que podem ser empregadas para mimetizar o comportamento de átomos e moléculas de um dado sistema. Uma das técnicas mais apropriadas para descrição de propriedades de compostos moleculares, principalmente no estado líquido é a dinâmica molecular (DM). Este método computacional tem sido empregado com sucesso na descrição de interações intermoleculares (LEACH, 2001).

A DM é um método de química computacional onde cada partícula que compõe o sistema tem seu movimento descrito pela segunda Lei de Newton:

$$F = -\frac{dU(r)}{dr} = m_i \frac{d^2r_i}{dt^2}$$

Nessa abordagem, a equação de movimento é representada por uma equação diferencial. As partículas do sistema interagem entre si gerando sucessivas configurações de posição e velocidades ao longo da simulação. A cada instante de tempo, é possível obter várias propriedades do sistema, como as interações entre as partículas, temperatura, volume, entre outras propriedades termodinâmicas. O conjunto de configurações cronologicamente geradas do sistema é chamado de trajetória. A Figura 3 apresenta um exemplo de sistema molecular, onde as partículas em destaque interagem entre si.

Figura 3. Exemplo de partículas interagentes em uma simulação de dinâmica molecular. Os vetores indicam as interações entre as partículas.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

4.2 ETAPAS DA PRODUÇÃO DO OBJETO DE APRENDIZAGEM

O OA desenvolvido utilizando a modelagem molecular seguiu as etapas de produção de Objetos de Aprendizagem da metodologia INTERA (BRAGA, 2013). Para isso, a elaboração deste projeto contou com uma equipe.

4.2.1 Funções dos participantes do projeto

O primeiro passo é a definição de papéis. A equipe de elaboração é pequena, formada por três integrantes: Professor 1, Professor 2 e o Aluno 1. A Tabela 2 apresenta os membros da equipe e seus respectivos papéis na elaboração do OA.

Tabela 2. Equipe executora para a elaboração o OA.

Membro	Papeis
Professor 1	Demandante do OA, Conteudista, Testador
Professor 2	Design pedagógico, Gerente de projetos, Design técnico, Analista, Testador
Aluno 1	Equipe de desenvolvimento (programador), Design de interface, Testador

Na Tabela 2 fica evidente que cada membro da equipe pode desempenhar vários papéis diferentes. De fato, no desenvolvimento deste trabalho, a equipe responsável pela elaboração do OA foi bastante reduzida. Isso ocorre quando não há recursos suficientes para montar uma equipe com maior número de membros.

4.2.2 Etapa de contextualização

Definido o número de membros para a equipe de elaboração do OA, inicia-se as etapas para a sua construção. Esta primeira etapa é o momento propício para a coleta de informações que vai descrever o contexto no qual será desenvolvido o OA. Para isso, o demandante do OA fornece as primeiras informações que deverão ser consideradas para a sua elaboração, tais como objetivos pedagógicos a serem atingidos. Esta coleta de informações iniciais são listas em um documento conhecido como artefato de contextualização.

Tabela 3. Artefato de contextualização da metodologia INTERA.

Contextualização – Caracterização do AO	
Tipo de OA	Vídeo
Objetivos pedagógicos a serem	Proporcionar ao aluno uma visão microscópica

atingidos	das ligações de Hidrogênio realizada entre moléculas de água no meio líquido.
Área do conhecimento	Ciências da Natureza
Disciplina principal	Química
Ementa em que o OA se encaixa	Físico-Química
Tópicos dentro da ementa	Interações Intermoleculares
Breve descrição do OA	Este OA, usando técnicas de modelagem molecular, como ocorrem interações intermoleculares entre moléculas no seio de uma solução.
Público Alvo	Alunos do segundo ano do ensino médio
Pré-requisitos do público alvo	Conhecimentos básicos de Química
Grau de acessibilidade	O OA deverá ser acessível por computadores ou dispositivos móveis
Fluência tecnológica	Conhecimentos básicos de informática
Problema a ser superado	Dificuldade de abstração dos alunos para visualização da formação de ligações de Hidrogênio em uma solução aquosa
Solução esperada	Espera-se que o OA proporcione aos estudantes uma visão microscópica do fenômeno, o qual será importante na descrição de outros fenômenos físicos, como mudanças de estados físicos da água e estudo da tensão superficial.

4.2.3 Etapa de Requisitos

Como já discutido na Metodologia, a etapa de Requisitos é responsável por coletar as informações sobre o que se espera do OA, tanto no quesito técnico quanto no pedagógico. O professor demandante do OA deverá preencher um

documento que listará as informações necessárias. Este documento, proposto pela metodologia INTERA, é chamado de artefato de requisitos.

Tabela 4. Artefato de coleta de requisitos da metodologia INTERA.

Artefatos: Especificação de Requisitos:
Objetivos: Listar todos os requisitos do Objeto de Aprendizagem a ser desenvolvido
Requisitos didático-pedagógicos <ul style="list-style-type: none"> Deseja se basear em alguma teoria de aprendizagem que você conhece? Em caso positivo cite qual: <p>Sim, Aprendizagem Significativa de David Ausubel. A Aprendizagem significativa é um processo por meio do qual uma nova informação relaciona-se com um aspecto especificamente relevante da estrutura do conhecimento. Este tipo de aprendizagem ocorre quando a nova informação liga-se em conceitos ou proposições relevantes, preexistentes na estrutura cognitiva do aluno.</p> <ul style="list-style-type: none"> Existe algum material didático (livro, sites, apostilas) que você gostaria de aproveitar para ajudar na elaboração do conteúdo do seu OA? Em caso positivo cite qual ou quais e indique a localização de cada um deles. Ou então envie os arquivos zipados juntamente com este documento. <p>Sim. Um conteúdo sobre o tema pode ser acessado em https://pt.khanacademy.org/science/biology/water-acids-and-bases/hydrogen-bonding-in-water/v/hydrogen-bonding-in-water</p> <ul style="list-style-type: none"> Existe algum OA que você gostaria de indicar aqui para servir de base para a elaboração do seu OA? <p>Sim. Este OA encontra-se no endereço:</p>

https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulation/states-of-matter

- Indique com um X se deseja que o seu OA contenha outros tipos de OAs
 - apresentação do conteúdo em forma de texto ou html (X)
 - atividades (X)
 - “feedback” das atividades (X)
 - Outros ()

Requisitos de Funcionalidade

- Que tipo de OA você gostaria que fosse desenvolvido? Indique com o X
 - Imagem (X)
 - Vídeo (X)
 - Texto ()
 - Animação (X)
 - Software de simulação ()
 - Software do tipo jogo ()
 - Curso on-line ()
- Quais as funcionalidades você gostaria que esse OA tivesse?

O OA deverá apresentar uma apresentação visual das ligações de hidrogênio em formato de imagens e de vídeo.

Requisitos de Interface com o usuário

- Você gostaria que o seu OA obedecesse algum padrão de cores, fontes, estilos?
Em caso positivo, indique quais:

Sim. O OA deverá apresentar o padrão de cores da IFSP.

Requisitos de disponibilidade:

- Onde você gostaria que seu OA ficasse disponível para os alunos? Em algum AVA? Sites públicos na web?

Gostaria que o OA fosse disponibilizado em sites públicos seguros.

Requisitos de Acessibilidade:

- O seu OA deve ser acessado por quais dispositivos? (Celular, computador, TV, *Tablets*)

O OA deverá ser acessado por Computadores e *Tablets*.

- O seu OA deverá ser acessível por pessoas com algum tipo de deficiência? Em caso positivo cite quais (deficientes auditivos, visuais, etc)

Gostaria que o OA pudesse ser acessado por pessoas com baixa visão, se possível.

Requisitos de Acesso:

- Você acha que o seu OA deverá ser acessado da mesma maneira tanto por professores e por alunos? Em caso positivo, especifique as diferenças de acesso.

Por se tratar de um recurso visual, não deverá ter acesso diferenciado por alunos e professores.

- Será necessário um administrador de sistema para o seu OA?

Não será necessário.

Requisitos de Desempenho:

- Seu OA poderá ser acessado por quantos alunos simultaneamente?

O OA deverá ser acessado por um grande número de pessoas simultaneamente, o maior

possível.

Requisitos de Portabilidade:

- Seu OA deverá ser instalado em um computador ou somente acessado via web?

Não será necessária instalação.

- Caso necessite de instalação, em quais sistemas operacionais seu OA deverá rodar?

Não será necessária instalação

- Seu OA deverá ser instalado em algum outro dispositivo que não seja um computador? Em caso positivo, qual ou quais?

Não será necessária instalação.

Requisitos de licenciamento:

- Indique (se souber) qual o licenciamento que o seu OA deverá obedecer:

Não haverá licenciamento.

- Indique (se souber) a quem pertencerá o direito (copyright) do seu OA:

O direito pertencerá ao IFSP.

4.2.4 Etapa de Arquitetura

De posse das informações coletadas na etapa de Requisitos, inicia-se o esboço do OA. Esta etapa é bastante comum dentro da metodologia INTERA e tem uma função importante no desenvolvimento do OA. A produção do esboço do OA conduz a um melhor entendimento das funções pedagógicas e técnicas do OA, além

de estreitar a comunicação entre os membros da equipe que estão desenvolvendo o OA e o professor demandante.

Como já colocado, cada tipo de OA requer um tipo de esboço, que se adequa melhor às suas necessidades. Para animações, que é o caso deste trabalho, recomenda-se o uso do *Storyboard*, que lembra um tipo de história em quadrinhos, pois se trata de uma história contada através de desenhos que seguem uma ordem cronológica de acontecimentos. Este tipo de protótipo se encaixa bem na descrição de formação de ligação de hidrogênio neste trabalho que estão sendo descritas a partir de configurações moleculares que também seguem uma ordem cronológica.

4.2.5 Etapa de desenvolvimento

O OA proposto foi desenvolvido utilizando ferramentas de edição de vídeo a partir de modelagem molecular. Simulações computacionais de conjunto de moléculas de água foram realizados utilizando a dinâmica molecular clássica (DM). A DM é um método que descreve o movimento de cada partícula que compõe um dado sistema molecular por meio da segunda lei de Newton. Uma simulação gera várias configurações de um sistema que podem ser comparadas a “fotografias” que serão retiradas ao longo de todo o cálculo. Estas configurações foram extraídas da trajetória gerada na simulação para geração de vídeos. A edição das imagens foi realizada pelo programa Kdenlive, software gratuito e de fácil instalação em sistema operacional Ubuntu 16.04. Esta ferramenta é de fácil manipulação e consegue satisfazer as necessidades colocadas pelo professor demandante do OA. Por se tratar de poucos recursos humanos disponíveis para o desenvolvimento do OA, a etapa de desenvolvimento foi a mais longa de todo o desenvolvimento do trabalho. Vários ajustes precisaram ser realizados, bem como também diversas repetições dos cálculos ao longo do decorrer desta etapa.

4.2.6 Etapa de testes

A etapa de testes é bastante importante, compreendendo a identificação de possíveis defeitos no OA, se o artefato pode ser utilizado sem problemas em diferentes sistemas operacionais e se o seu acesso está garantido. Testes

preliminares foram realizados em diferentes protótipos, atestando que o OA não apresentou nenhum defeito técnico e novos ajustes não serão necessários.

4.2.7 Etapa de disponibilização

A disponibilização deverá ocorrer futuramente em um repositório especializado para OA, que será acompanhado de um manual descrevendo as principais características do artefato.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Atualmente, o ensino de ciências enfrenta diversos problemas em relação ao ensino de conceitos fundamentais. Disciplinas como Física e Química, que requerem em grande parte das aulas um nível de abstração mais rigoroso, são aquelas onde os alunos apresentam maiores dificuldades de aprendizagem. Mesmo com todo esforço empreendido por docentes destas disciplinas, uma parcela representativa de estudantes ainda estão inaptos a estabelecer conexões entre o conteúdo estudado e o seu cotidiano.

Interações (ou forças) intermoleculares é um tema extremamente relevante para a compreensão das propriedades da matéria e está presente no cotidiano de qualquer estudante do nível básico. A amplitude que este tema alcança leva a discussão de vários outros conceitos físicos e químicos ainda mais fundamentais. Na tentativa de promover uma aprendizagem significativa deste tema, alguns autores tem proposto o uso de novas estratégias didáticas (AYRES, 2015).

Este trabalho propõe a elaboração de um OA visando o aprendizado de interações intermoleculares, tais como interação dipolo-dipolo, íon-dipolo, ligações de Hidrogênio, etc. As abordagens tradicionais deste tema nas aulas de Química do ensino médio exigem do aluno, muitas vezes, um esforço cognitivo diferenciado. No entanto, este trabalho pode ser facilitando com a adoção de recursos visuais proporcionados por simulações computacionais.

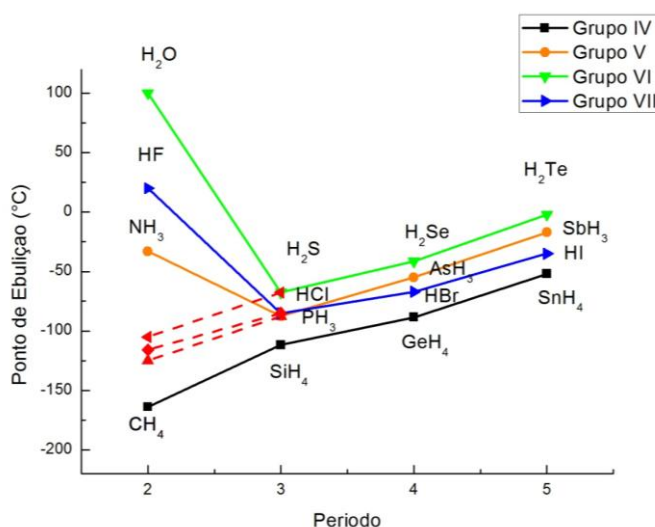
Interações intermoleculares têm um papel fundamental na descrição do comportamento de diversos compostos químicos, como a água por exemplo. Diversas propriedades podem ser explicadas a partir deste tipo de interação, como, por exemplo, a tensão superficial, o comportamento anômalo da água à baixas temperaturas, etc. Porém, talvez o fenômeno mais próximo do aluno, seja as mudanças de estado físico da água, onde uma visão microscópica destes fenômenos pode ser produzidas a partir de modelagem molecular.

As ligações de Hidrogênio, um caso específico de interação intermolecular, são relativamente intensas, quando comparado a outros tipos de interações, o que justifica várias propriedades da água, como o seu alto ponto de ebulição.

De acordo com a definição da IUPAC (2011), “A ligação de hidrogênio é uma interação atrativa entre o átomo de hidrogênio presente na molécula HX ou em um fragmento molecular onde X é mais eletronegativo que H, com um átomo ou grupo de átomos na mesma molécula ou em moléculas diferente, em que exista evidência na formação da ligação”.

Diante da importância do papel das ligações de Hidrogênio e outras interações intermoleculares, este trabalho utilizou como ponto de partida para elucidação do conceito de interações intermoleculares o ponto de ebulição de hidretos de diferentes grupos. A Figura 4 apresenta o ponto de ebulição de diversos compostos químicos, onde alguns estão aptos a realizar ligações de Hidrogênio.

Figura 4. Ponto de Ebulição de Hidretos dos Grupos IV, V, VI e VII.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

As linhas sólidas indicam os valores do ponto de ebulição dos respectivos compostos, enquanto que as linhas pontilhadas indicam as características esperadas para a água (H_2O), amônia (NH_3) e Fluoreto de Hidrogênio (HF). Estes três compostos parecem estar fora de tendência observada nos demais compostos. A exceção são os Hidretos do Grupo IV, pois o metano (CH_4) segue as tendências dos outros compostos do seu grupo.

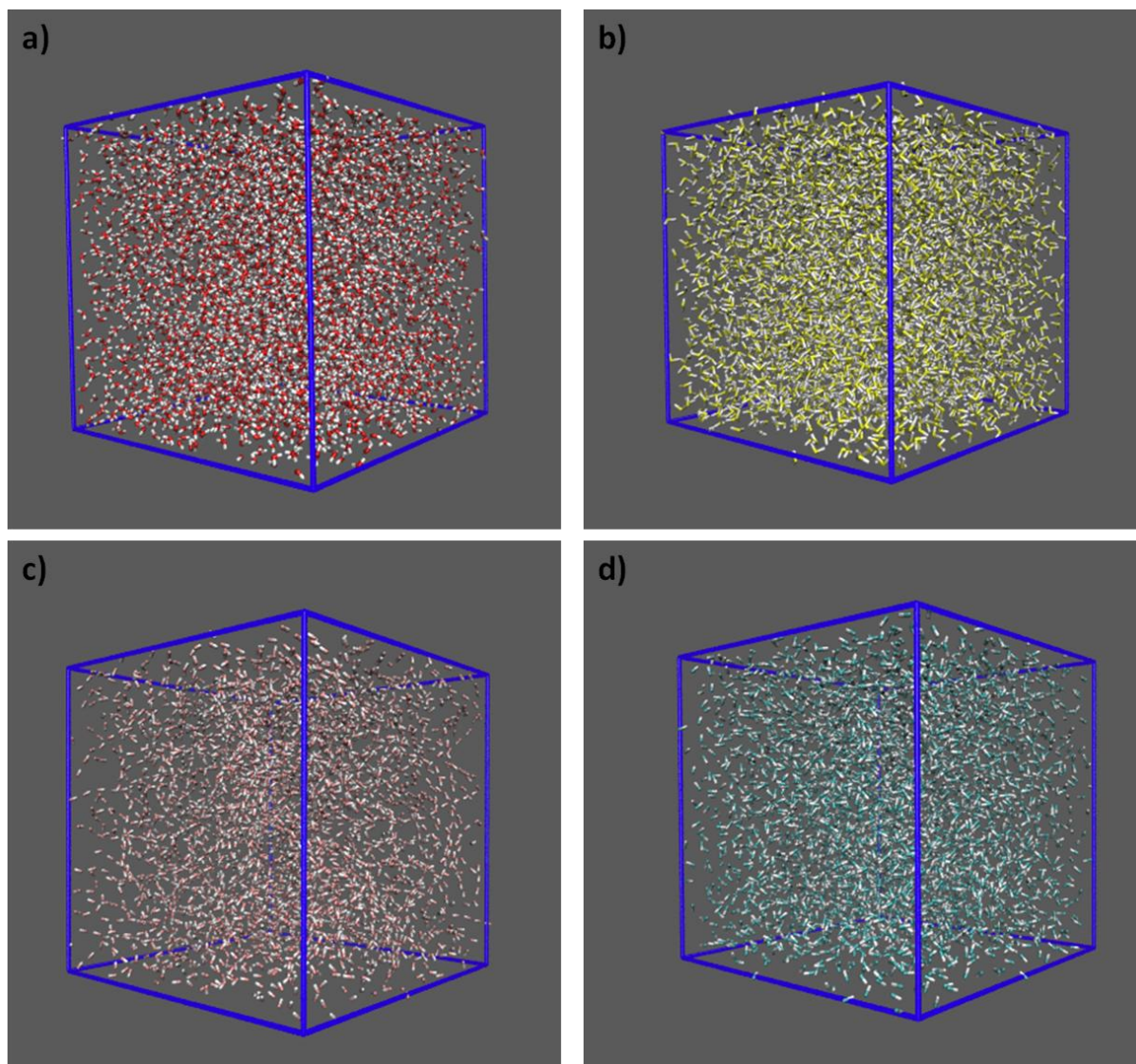
Para a elaboração do OA, foram considerados neste trabalho apenas os seguintes compostos: Água (H_2O), Sulfeto de Hidrogênio (H_2S), Fluoreto de Hidrogênio (HF) e Cloreto de Hidrogênio (HCl), todos na sua temperatura de ebulição. A escolha destes compostos mostrou-se suficiente para elucidar o conceito de interação intermolecular, apresentando exemplos importantes que não se limitaram apenas à água. Os detalhes técnicos envolvidos na produção do OA serão discutidos nas próximas seções deste trabalho.

5.1 SIMULAÇÕES DOS HIDRETOS

5.1.1 Detalhes Computacionais

Para a execução dos cálculos de Dinâmica Molecular, foram construídas células cúbicas de simulação com quatro mil (4000) moléculas do líquido a ser simulado. As simulações foram realizadas no ensemble isotérmico-isobárico (NPT), ou seja, com temperatura e pressão constantes, com pressão ($p = 1 \text{ atm}$) e a temperatura escolhida foi o ponto de ebulição de cada composto. As caixas de simulação foram previamente equilibradas, ou seja, foram realizadas simulações prévias para que todos os compostos atingissem um estado de energia mínimo estável. Esse procedimento evita que cargas de mesmo sinal se posicionem próximas umas das outras, provocando repulsão eletrostática entre as mesmas. Além de se aproximar mais da realidade experimental, a equilibrção suprime pois além de não reproduzir a realidade experimental também causam efeitos indesejáveis nos resultados. Todos os cálculos utilizaram o campo de força Gromos 53a6 (OOSTENBRINK, 2004) e foram executados com o pacote de dinâmica molecular GROMACS (ABRAHAM, 2015). Abaixo, são representadas as células de simulação para cada um dos sistemas estudados.

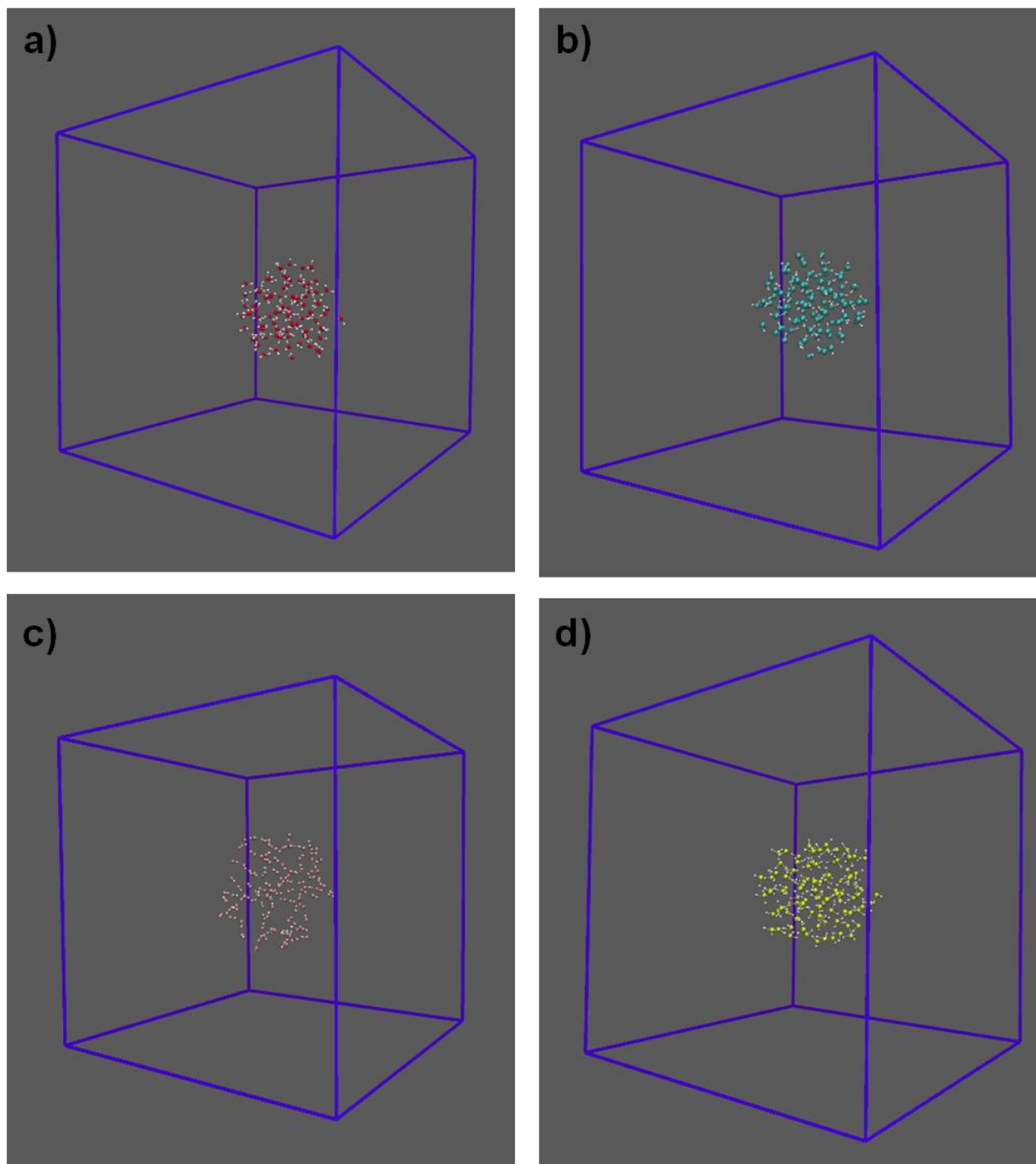
Figura 5. Caixas de simulação dos compostos estudados: a) H_2O , b) H_2S , c) HF e d) HCl . Figuras produzidas pelo software VMD (Visual Molecular Dynamics) (HUMPHREY, 1996).



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

Extraiu-se de cada sistema simulado uma região menor contendo cerca de cem moléculas a fim de estudar as interações intermoleculares com maiores detalhes. Esse procedimento foi realizado para apresentar de maneira mais clara as interações entre as moléculas durante a produção dos recursos visuais para a elaboração do objeto de aprendizagem. A região selecionada em cada sistema é apresentado na Figura 6. Para cada composto simulação, é possível observar um arranjo característico das moléculas presentes na porção selecionada. Os quatro casos estudados serão detalhados a seguir.

Figura 6. Regiões Estudadas em Caixas de Simulação dos Compostos Estudados: a) H_2O , b) H_2S , c) HF e d) HCl .



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

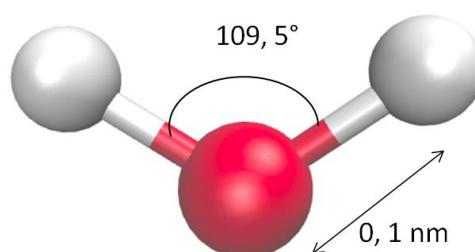
5.1.2 Água (H_2O)

A água é um composto bastante conhecido e várias de suas propriedades são facilmente reproduzidas tanto no nível experimental quanto em modelos teóricos. As principais interações intermoleculares presentes na água líquida são as ligações de

Hidrogênio. Os modelos computacionais desenvolvidos para descrição das propriedades fundamentais da água descrevem com razoável precisão várias dessas propriedades, incluindo também a formação dessas interações (WALLQVIST, 1999).

Nas simulações realizadas neste trabalho, utilizou um modelo de água conhecido como SPC (Simple Point Charge), onde cada átomo é caracterizado por uma carga atômica parcial (BERENDSEN, 1981).

Figura 7. Modelo SPC para a Molécula de Água.

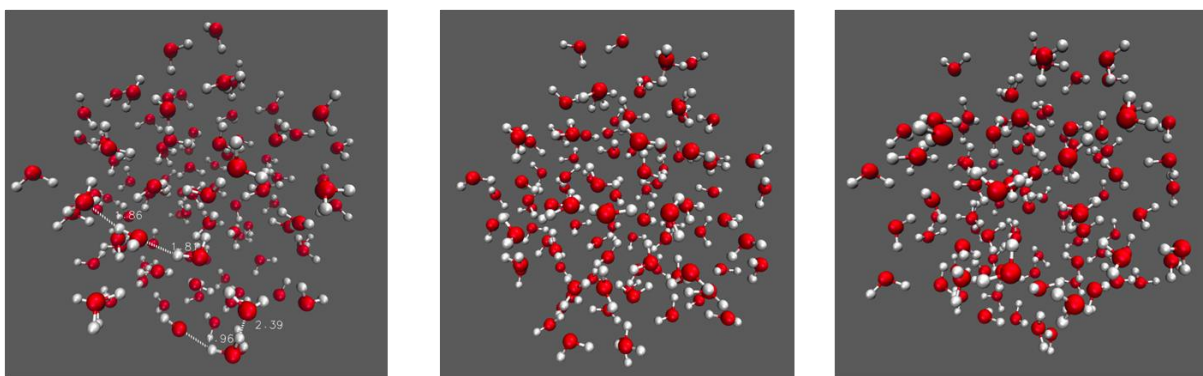


Fonte: Elaborado pelo autor (2018)

Após a fase de equilibração da caixa de simulação contendo H₂O, o sistema foi submetido a uma fase conhecida como produção, onde nela todas as propriedades termodinâmicas e estruturais da solução são obtidas. Com a conclusão da simulação nesta fase de produção, foi extraída da caixa de simulação uma região contendo cerca de cem moléculas de água. As interações intermoleculares estudadas foram restritas à essa região.

Como já apontado, a trajetória do sistema ao longo da simulação é uma sucessão temporal de configurações individuais do sistema, que contemplam as posições de cada molécula no curso da simulação. A trajetória de cada composto será utilizada para produção dos recursos visuais do OA produzido neste trabalho. Esta trajetória permite que geometrias sejam extraídas, tanto para a realização de cálculos mais sofisticados e estudos mais específicos do sistema em questão, ou mesmo para a produção de recursos visuais, como é o caso proposto neste trabalho.

Figura 8. Configurações da Trajetória de Simulação.



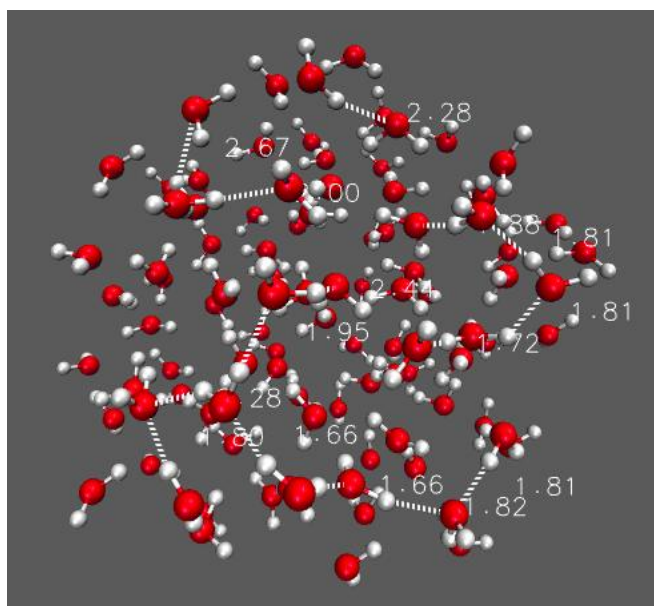
Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

As configurações retiradas da trajetória evidenciam as interações intermoleculares entre as moléculas de água em destaque. É possível observar na figura a formação de uma malha de ligações Hidrogênio, que se estende por toda a região selecionada.

A formação desta malha de interações tem um papel crucial sobre o ponto de ebulição da água, entre outras propriedades. Como já apontado na Figura 4, o ponto de ebulição tenderia a aumentar de acordo com o período. No caso dos compostos do Grupo VI, seguindo a tendência dos valores do ponto de Ebulição dos compostos H_2Te , H_2Se e H_2S , a extrapolação da curva prevê um ponto de ebulição da água de cerca de $-100\text{ }^{\circ}C$, muito diferente do valor de $+100\text{ }^{\circ}C$. Esta diferença entre o valor extrapolado e o valor real se deve à formação desta malha de ligações de Hidrogênio.

Esta malha de ligações de Hidrogênio é um conceito de difícil compreensão. Para visualização deste fenômeno, recursos visuais podem ter um papel crucial para apresentação deste conceito com maior clareza. A Figura 9 apresenta a presença da malha de interações de Hidrogênio para uma configuração do sistema escolhida de forma aleatória.

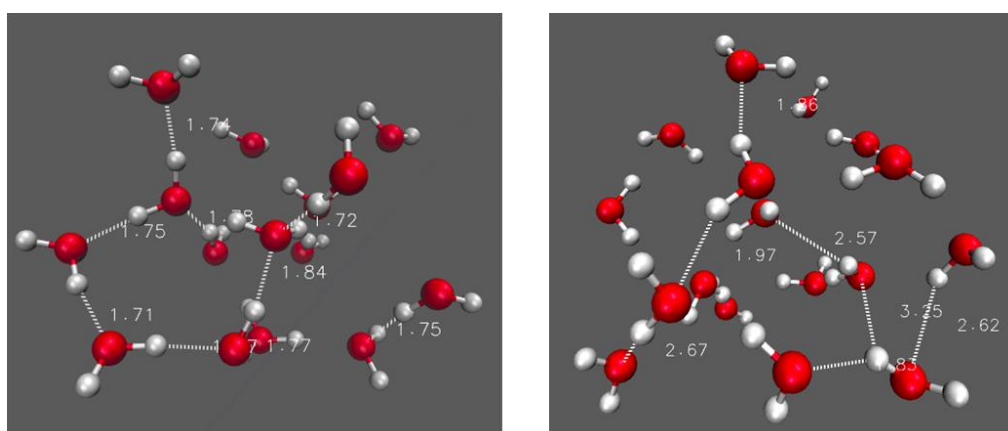
Figura 9. Malha de Ligações de Hidrogênio para uma Configuração Aleatória do Sistema. São Mostradas Apenas Algumas Ligações de Hidrogênio Seleccionadas. As distâncias entre os átomos são medidas em Angstroms (10^{-10} m).



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

Outro ponto a ser explorado é a mudança de estado físico, caracterizado pela temperatura de ebulição. A modelagem computacional é bastante apropriada para ilustração deste fenômeno. Uma comparação pode ser feita entre a formação de ligações de Hidrogênio para a temperatura ambiente (25 °C) e também para a temperatura de ebulição (100 °C)

Figura 10. Malha de Ligações de Hidrogênio para duas configurações aleatórias à 25 °C (esquerda) e à 100 °C (direita).

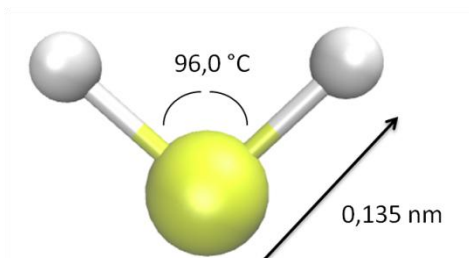


Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

5.1.3 Sulfeto de Hidrogênio (H₂S)

O Sulfeto de Hidrogênio, H₂S, é um composto gasoso à temperatura ambiente, tóxico e inflamável. Este gás possui odor desagradável, semelhante ao cheiro de ovo podre ou carne em decomposição. O átomo de enxofre (S) pertence ao mesmo grupo do oxigênio. Portanto, estruturalmente, o H₂S é semelhante à água.

Figura 11. Molécula de H₂S e Alguns Parâmetros Estruturais.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

Do ponto de vista de dinâmica molecular, não existem modelos específicos parametrizados especialmente para reprodução das propriedades do H₂S. Neste sentido, para execução dos cálculos, foram utilizados os parâmetros do campo de força utilizados em todas as simulações.

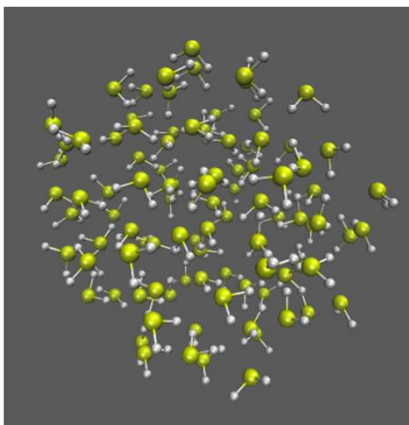
Assim como no caso da simulação do H₂O, após a equilibração da célula computacional de H₂S, executou-se a fase de produção para a separação da trajetória de simulação em configurações individuais. As geometrias do H₂S foram analisadas sob o ponto de vista de interações intermoleculares para a produção recursos visuais.

Diferentemente do H₂O, H₂S não realiza ligações de Hidrogênio entre as seus pares. As interações intermoleculares entre as moléculas de H₂S não atendem aos critérios utilizados para definição da ligação de Hidrogênio. Porém, as moléculas de H₂S interagem entre si por meio de interações dipolo-dipolo com intensidade de magnitude menor que as ligações de hidrogênio. O momento de dipolo elétrico do H₂S é 0,95 D, bem menor que o da água (1,85 D)

O H₂S é o composto que apresenta menor temperatura de ebulição entre os sistemas estudados no Grupo VI, superando apenas a temperatura de ebulição da

água, caso esta seguite a caracterísitca da curva apresentada. O arranjo entre as moléculas de H_2S na região selecionada é apresentado na F.

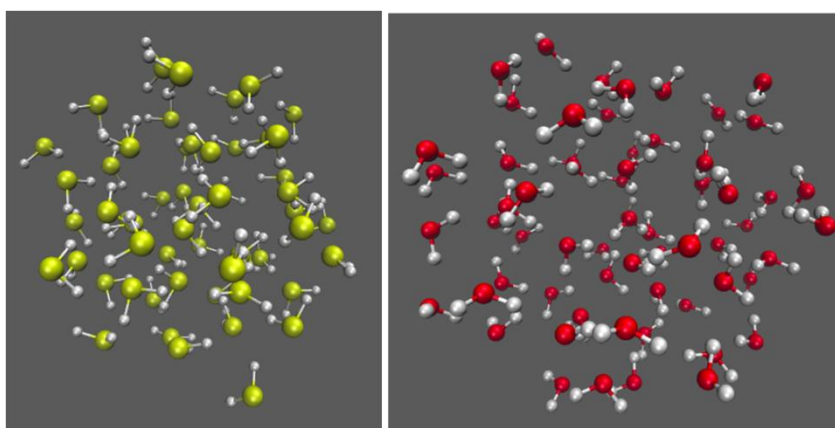
Figura 12. Configuração Aleatória mostrando uma região de moléculas de H_2S selecionadas.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

O arranjo microscópico das interações dipolo-dipolo encontradas no interior do H_2S na temperatura de ebulição são evidenciadas de forma bastante clara por meio do modelagem computacional. As configurações selecionadas para a produção do OA apresenta de forma detalhada a disposição espacial das moléculas. Observa-se nesse arranjo uma acomodação das moléculas de H_2S com diferenças significativas quando comparadas ao arranjo de moléculas de água.

Figura 13. Comparação entre os arranjos do H_2S (esquerda) e H_2O (direita).



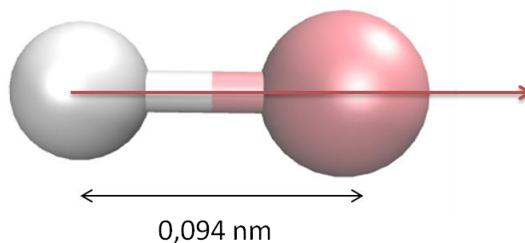
Fonte: Elaborador pelo autor (2018).

A evolução temporal das configurações do H_2S selecionadas revelaram aspectos geométricos no nível molecular próprios das interações do tipo dipolo-dipolo. A visualização deste tipo de interação é de difícil percepção por grande parte dos estudantes do nível básico de ensino.

5.1.4 Fluoreto de Hidrogênio (HF)

O fluoreto de Hidrogênio (HF) é o primeiro hidreto do Grupo VII a ser discutido neste trabalho. Trata-se de um ácido forte com um ponto de ebulição em torno de $19,5^\circ\text{C}$. Portanto, é um composto que se encontra em estado gasoso em temperatura ambiente. Diferente do sulfeto de Hidrogênio, mas semelhante à água, o HF realiza ligações de Hidrogênio entre seus pares. Além disso, o HF foge à tendência natural curva do seu grupo e tem o ponto de ebulição maior do que o previsto pela extrapolação dos valores.

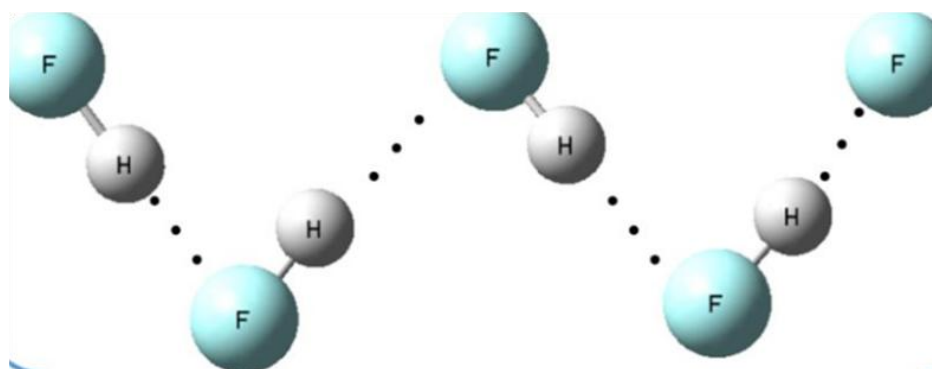
Figura 14. Molécula de HCl. Em branco, o átomo de H e vermelho o átomo de F. A seta vermelha indica o vetor momento de dipolo.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

A malha de ligações de Hidrogênio formada no interior do HF tem um perfil distinto da malha formada entre as moléculas de água, pois o HF é um composto diatômico. Portanto, a estruturação das moléculas de HF é bastante característica. A Figura 15 mostra um arranjo com uma pequena sequência de moléculas HF. Como aponta a figura, o arranjo intermolecular do HF é simétrico.

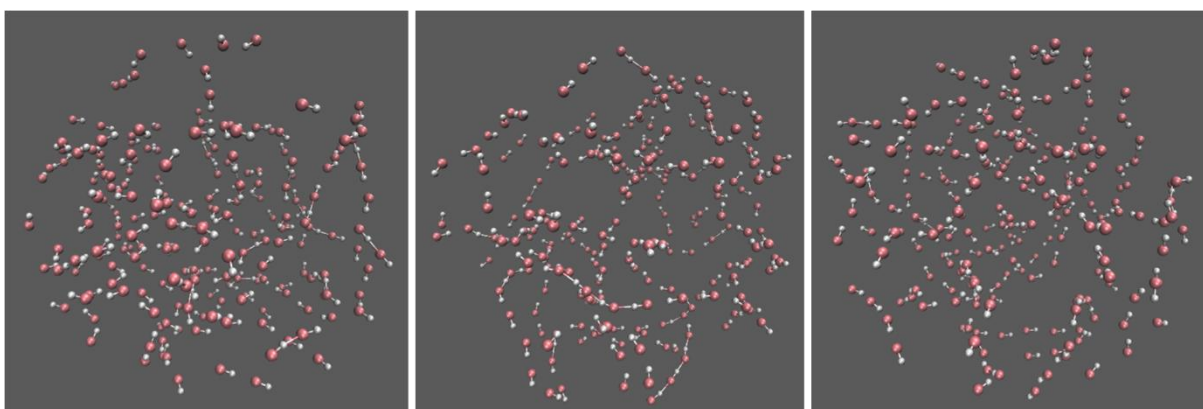
Figura 15. Formação de Ligações de Hidrogênio entre moléculas de HF.



Fonte: (SILVA FILHO, 2014).

Os resultados da modelagem computacional do HF revelaram um padrão de interação intermolecular condizente com o apresentado na Figura 15. A modelagem computacional proposta para este sistema está apta a oferecer ao estudante uma figura molecular adequada das ligações de Hidrogênio presentes no interior do HF no ponto de ebulição. A Figura 16 mostram o arranjo observado em diversas configurações ao longo da trajetória do sistema. Este resultado também é uma indicação de que o campo de força usado reproduz, do ponto de vista qualitativo, adequadamente as interações intermoleculares.

Figura 16. Configurações do HF tiradas aleatoriamente da trajetória da simulação.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

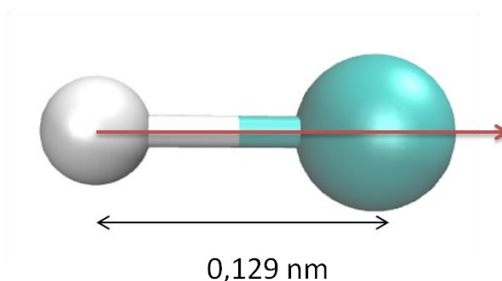
5.1.5 Cloreto de Hidrogênio (HCl)

O cloreto de Hidrogênio (HCl) é o último composto a ser analisado neste trabalho. Assim como o HF, HCl é um hidreto do Grupo VII, com a menor

temperatura de ebulição do grupo. A estrutura química dos hidretos deste grupo são semelhantes.

Embora existam discussões na literatura a respeito do envolvimento do Cl na formação de ligações de hidrogênio, neste caso, considera-se que não há este tipo de interação entre as moléculas de HCl. Existe a formação de um dipolo permante na molécula de HCl, portanto, as interações intermoleculares são do tipo dipolo-dipolo.

Figura 17. Molécula de HCl. Em branco, o átomo de H e azul o átomo de Cl. A seta vermelha indica o vetor momento de dipolo.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

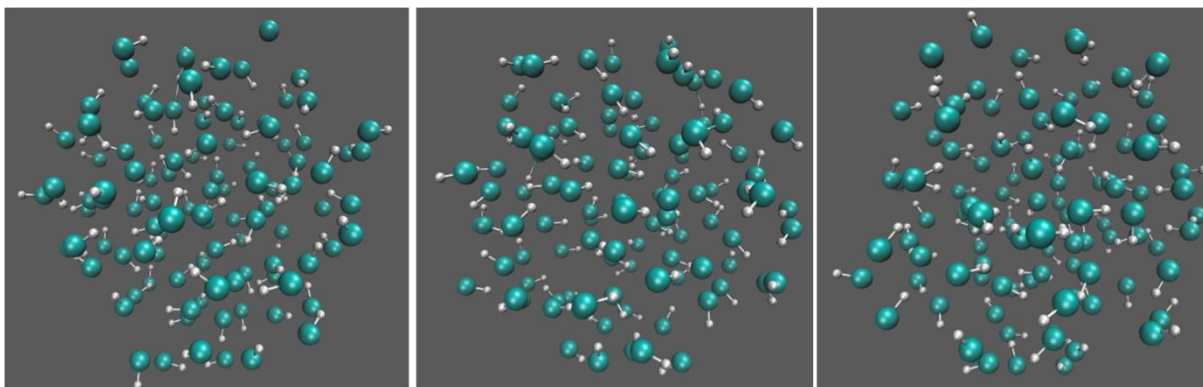
Assim como feito nos dois compostos anteriores, H_2O e H_2S , é possível comparar alguns aspectos entre o HF e o HCl. Os momentos de dipolo desses dois compostos são significativamente diferentes: 1,91 D para o HF (comparável ao da água) e 1,08 D para o HCl (comparável ao do H_2S). Os compostos com maior momento de dipolo da Figura 4 são aqueles que são aptos a realizar ligações de hidrogênio e, portanto, possuem maior temperatura de ebulição. A Tabela 5 corrobora essas informações.

Tabela 5. Momento de Dipolo (em debye) dos compostos investigados neste trabalho.

Molécula	Momento de Dipolo (D)
H_2O	1,85
H_2S	0,90
HF	1,91
HCl	1,08

A modelagem molecular é uma ferramenta poderosa para demonstração dos conceitos de interações intermoleculares. É possível mostrar que, embora o HF e o HCl seja do mesmo grupo, os perfis de interações entre seus pares são completamente distintos. A simulação computacional dá uma ideia visual de como se dá as interações intermoleculares observadas entre compostos destes tipos. As configurações obtidas ao longo das simulações mostram diferenças nestes padrões. Estas configurações de posição serão empregadas para elaboração do recurso visual para demonstração das interações intermoleculares no interior do HCl.

Figura 18. Configurações do HCl tiradas aleatoriamente da trajetória da simulação.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, foi proposta a utilização da modelagem molecular como uma ferramenta que pode ser aplicada como um recurso didático nas aulas de ciências do ensino básico. Dentre as várias técnicas de modelagem molecular existentes, optou-se por usar a dinâmica molecular. A partir desta técnica, é possível investigar fenômenos químicos com detalhe molecular, expondo ao aluno um universo de possibilidades que eram ausentes nas abordagens tradicionais do tema aqui investigado.

A proposta de desenvolvimento de um recurso digital, Objeto de Aprendizagem, utilizando técnicas de modelagem molecular tem como objetivo oferecer ao estudante uma nova forma de enxergar o problema químico por meio da sua visualização. Simulações computacionais são ferramentas teóricas que podem atender a este propósito. A abordagem computacional permite que o estudante desenvolva habilidades visuoespaciais importantes para a aquisição do conceito investigado ao longo deste texto. A utilização de modelos moleculares para representação de fenômenos químicos que explorem a estrutura tridimensional de moléculas contribui de maneira significativa para a compreensão de diversos conceitos químicos.

Interações intermoleculares, por exemplo, é um desses conceitos que pode ser abordado dentro do contexto da modelagem molecular, utilizando diferentes técnicas de simulação computacional. A dinâmica molecular está apta a descrever com precisão razoável os principais tipos de interações intermoleculares. Aplicando esta técnica em modelos simples, é possível apresentar de forma qualitativa como ocorrem essas interações, levando o aluno a compreender o conceito em questão ou solidificar o conhecimento outrora adquirido.

A modelagem computacional permite a formação de imagens mentais do conteúdo estudado, favorecendo assim a internalização do conceito por parte do aluno. Neste sentido, pode-se apontar a modelagem molecular como ferramenta que, se usada de forma adequada, propicia ao aluno um ganho significativo na capacidade de aprendizagem.

Os resultados apresentados no texto desta monografia não foram aplicados em sala de aula para a verificação da sua eficácia. Entretanto, espera-se que a sua

utilização com o público-alvo promova novas possibilidades para o estudo do conteúdo em questão, facilitando a compreensão dos conceitos apresentados pelo professor para seus alunos, cumprindo o objetivo de aprendizagem. Outro fator importante a ser considerado é a motivação para o aprendizado que essa nova abordagem pode trazer ao aluno.

Como continuação deste trabalho, serão investigados, do ponto de vista de simulação computacional os demais compostos dos Grupos VI e VII (H_2Se , H_2Te , HBr e HI), bem como também os outros grupos ausentes neste trabalho (IV e V). Simulações de dinâmica molecular destes compostos em seus respectivos pontos de ebulição serão executadas para demonstração das interações intermoleculares. Recursos visuais são gerados a partir das trajetórias obtidas e serão empregados na produção de um OA, que contemplará todos os sistemas presentes na Figura 4. Os resultados poderão ser publicados em um periódico da área e o OA poderá ser disponibilizado em um repositório apropriado.

A produção dos recursos digitais ainda é um desafio a ser enfrentado por todos os profissionais que estão envolvidos com tecnologia educacional. Do professor em sala de aula até o profissional de tecnologia, todos deverão estar envolvidos para a produção de artefatos tecnológicos de qualidade, visando melhorias no ensino de ciências e na educação como um todo.

REFERÊNCIAS

ABRAHAM, M. J.; MURTOLA, T.; SCHULZ, R.; PÁIL, S.; SMITH, J. C.; HESS, B.; LINDAHL, E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers V. 1-2, 2015.

ARUNAN, E. et al. Defining the hydrogen bond: An account (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, v.83, n.8, 2011.

AYRES, C.; ARROIO, A. Aplicação de uma Sequência Didática para o estudo de Forças Intermoleculares com uso de Simulação Computacional. *Experiências em Ensino de Ciências* V.10, No. 2, 2015.

BERENDSEN, H. J. C.; POSTMA, J. P. M.; van GUSTEREN, W. F.; HERMANS, J., Interaction models for water in relation to protein hydration. In *In Intermolecular Forces*, Pullman, B., Ed. Reidel: Dordrecht, 1981.

BRAGA, J. C.; PIMENTEL, E.; DOTTA, S. Metodologia INTERA para o desenvolvimento de Objetos de Aprendizagem. In: II Congresso Brasileiro de Informática na Educação (CBIE 2013) XXIV Simpósio Brasileiro de Informática na Educação (SBIE 2013). p. 306–315. 2013.

COSTA, V. M.; ÁVILA, B. G.; BEZ, M. R.; DOS SANTOS, E. F. (Org.). *Objetos de Aprendizagem: teoria e prática*. 1. ed. Porto Alegre: Evangraf, 2014, p. 54-75.

DIAS, C. L. et al. Padrões abertos: aplicabilidade em Objetos de Aprendizagem (Oas). In: Simpósio Brasileiro de Informática na Educação (SBIE), n.20, 2009, Florianópolis.

GALAFASSI, Fabiane Penteadó; GLUZ, João Carlos; GALAFASSI, Cristiano. Análise Crítica das Pesquisas Recentes sobre as Tecnologias de Objetos de Aprendizagem e Ambientes Virtuais de Aprendizagem. *Revista Brasileira de Informática na Educação*, v.21, n.3 p.100, 2014.

HODGINS, H. W. The future of learning objects. In: WILEY, D. A. (Ed.). *The instructional use of learning objects: online version*. 2000. Disponível em: <<http://reusability.org/read/chapters/hodgins.doc>>. Acesso em: 10 jun. 2018.

HODGINS, H. W. The future of learning objects. e-Technologies in Engineering Education: learning outcomes providing future possibilities. In: LOHMANN, J.; CORRADINI, M. (Eds.). ECI Symposium Series. v. P01, 2002. p. 76-82. Disponível em: <<http://dc.engconfintl.org/etechnologies/11>>. Acesso em: 10 jun. 2018.

HUMPHREY, W.; DALKE, A.; SCHULTEN, K. "VMD - Visual Molecular Dynamics", J. Molec. Graphics, v. 14, 1996.

KOOHANG, A.; HARMAN, K. Learning Objects: theory, praxis, issues and trends. Santa Rosa, CA: Informing Science Press, 2007a. p.1- 44.

_____. Learning Objects and Instructional Design. Santa Rosa, CA: Informing Science Press, 2007b.

LEACH, A., Molecular Modelling: Principles and Applications. Prentice Hall: New York, 2001.

LÉVY, P. Cibercultura. 3 ed. Tradução de Carlos Irineu da Costa São Paulo: Editora 34, 2010.

MASETTO, M. T. Mediação pedagógica e o uso da tecnologia. In: Novas Tecnologias e Mediação Pedagógica. 2000. cap. Mediação.

OOSTENBRINK, C.; VILLA, A. E.; VAN GUSTEREN, W. F. A biomolecular force field based on the free enthalpy of hydration and solvation: The GROMOS force-field parameter sets 53A5 and 53A6. Journal of Computational Chemistry, V. 25, No.13, 2004.

PEREIRA, D. M.; SILVA, G. S. As Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs) como aliadas para o desenvolvimento. Cadernos de Ciências Sociais Aplicadas, n. 8, p. 151–174, 2010.

RIOS, M. P. G. et al. Desafios contemporâneos para a incorporação das TIC nos processos do ensino e da aprendizagem. Revista Educação e Cultura Contemporânea, v. 11, n. 23, p. 209–230, 2014.

RIVED. (2008). Rede Interativa Virtual de Educação da SEED-MEC. Disponível em <http://rived.mec.gov.br>. Acesso em 09 jun. 2018.

SANTOS, H. O conceito de modelagem molecular. Cadernos temáticos de química nova na escola, p. 4–5, 2001.

SILVA FILHO, A., J. Ligações de hidrogênio intermoleculares: um estudo teórico da interação entre os heterocíclicos (RC_2H_4N), $R = -H, -OH$ e $-CH_3$ e ácidos monopróticos HX , COM $X = F, Cl$ e CN . Dissertação (Mestrado em Química) – Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba. Paraíba, p. 25. 2014.

SILVA, M. G. M. Novas aprendizagens. In: Congresso Internacional de Educação a Distância, 11, 2004, São Paulo. Anais... São Paulo: SENAC, 2004. Disponível em <http://www.abed.org.br/congresso2004/por/htm/146-TC-D2.htm>. Acesso em 24 jun. 2018.

THE MASIE CENTER'S E-LEARNING CONSORTIUM. Learning and Technology e-lab & think-Tank. Making sense of learning specification & standards: a decision maker's guide to their adoption. 2003. Disponível em <http://www.masie.com>. Acesso em 30 jun. 2018.

TORRÃO, S. Produção de Objetos de Aprendizagem para E-Learning. In Baptista, Ana Alice et al. E-Conteúdos para E-Formadores. Guimarães: TecMinho, 2008. (pp 71–88).

WALLQVIST, A.; MOUNTAIN, R. D. Molecular models of water: Derivation and description, Reviews in Computational Chemistry V. **13**, p. 183-247. 1999.

WILEY, D. A. Learning object design and sequencing theory. Unpublished doctoral dissertation, Brigham Young University. 2000. Disponível em <http://www.reusability.org/read/chapters/wiley.doc>. Acesso em 01 jun. 2018.

_____. The instructional use of learning objects. 2002. Disponível em: <<http://www.reusability.org/read/>>. Acesso em: 01 jun. 2018.

_____. Connecting learning objects to instructional design theory: A definition, a metaphor and a taxonomy, 2003.