

Emprego de softwares *SciDavis* e *ACD/ChemSketch*[®] como ferramenta no Ensino de Química.

Rafael de Q. Ferreira (PQ)¹, Alexandre de O. Legendre (PQ)^{1,2}, Pedro M. Takahashi (PQ)^{1*}
*pedrtaka@gmail.com ou pedrtaka@yahoo.com.br

¹Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Química – Av. Fernando Ferrari, s/n, CEP. 29075-910, Goiabeiras, Vitória-ES.

²Universidade Federal de Alfenas, Instituto de Ciências Exatas – Rua Gabriel Monteiro da Silva, 714, CEP. 37130-000, Centro, Alfenas-MG.

Palavras Chave: Ensino de Química, *SciDavis*, *ACD/ChemSketch*, Software em química.

Introdução

Atualmente, a aquisição de dados para o desenvolvimento de pesquisas científicas pode ser realizada por meio de uma enorme gama de instrumentos analíticos. Contudo, para análise e interpretação destes resultados se faz necessário o emprego de um software específico, como ferramenta para auxiliar na interpretação dos dados. Porém, a utilização destes programas nem sempre é abordada pelos discentes.

Deste modo, o presente trabalho apresentará como utilizar os softwares gratuitos *SciDavis* (gráfico) e *ACD/ChemSketch*[®] (modelagem), como alternativa aos programas comerciais, no Ensino de Química, além de apresentar suas principais funcionalidades. Este tópico deverá, futuramente, ser ministrado como uma disciplina optativa para os cursos de Bacharelado e Licenciatura em Química da UFES.

Resultados e Discussão

A partir da aquisição de dados experimentais, tais como: um espectro eletrônico de um composto (nome do arquivo: exemplo.txt), pode-se plotar seu espectro ou gráfico usando o programa *SciDavis*¹, conforme demonstrado na Figura 1.

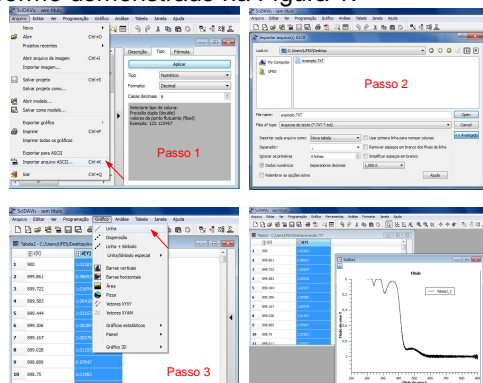


Figura 1. Ilustração do uso do programa *SciDavis*.

Para criar ou plotar o gráfico para um dado composto deve-se seguir os seguintes passos:

Passo 1 – Abrir o programa e importar os dados;
Passo 2 – Selecionar o arquivo de dados, neste caso, o arquivo: “exemplo.txt”;
Passo 3 – Selecionar a coluna “y” da tabela de dados e criar o gráfico usando os seguintes comandos: “Gráfico → Linha”, como observado na Figura 1.

Além disso, este software permite realizar operações matemáticas, como, por exemplo: regressão linear, regressão polinomial, entre outras funções.

A próxima etapa deste trabalho será explicar a utilização de um programa para criar e visualizar estruturas químicas, a partir do software *ACD/ChemSketch*^{®2}. Este programa possibilita criar e visualizar estruturas químicas em 2D ou 3D, além de informar a massa molar e a porcentagem de cada elemento da molécula criada, conforme observado na Figura 2.

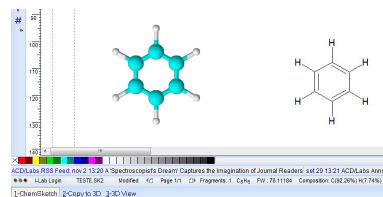


Figura 2. Ilustração da utilização do programa *ACD/ChemSketch*[®].

Conclusões

Como visto, o emprego de software no ensino de química é muito importante, já que, atualmente, eles são imprescindíveis para a manipulação dos dados obtidos ou simplesmente para auxiliar na visualização das moléculas. Além disso, a futura disciplina optativa poderá proporcionar aos alunos um maior entendimento sobre essas ferramentas.

Agradecimentos

UFES

¹ *SciDavis* - <http://scidavis.sourceforge.net/download.html> - acessado em 02/02/2010.

² *ACD/ChemSketch*[®] - <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/> - acessado em 02/02/2011.