

## Utilização de softwares no ensino da modelagem molecular

## Use of software in the teaching of molecular modeling

### RESUMO

Marcos Antonio Cheretti Junior  
[Marjun.2018@alunos.utfpr.edu.br](mailto:Marjun.2018@alunos.utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal  
do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Marcos Brown Gonçalves  
[marcosb@utfpr.edu.br](mailto:marcosb@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal  
do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Desenvolver interesse em algo que envolva química e biologia não é uma tarefa simples. A utilização das disciplinas citadas anteriormente requer partes específicas de cada uma para poder criar algo útil e que demonstre interesse aos alunos. Através da tecnologia visual, foi possível sincronizar as duas áreas para visualizar um modelo 3D de processos químicos e biológicos de forma educativa. O projeto teve como foco disseminar conhecimento por intermédio do Youtube para alunos tanto de ensino médio como de ensino superior das áreas biológicas e da química a conhecerem a área. Este tutorial apresentou de forma acessível como compreender a ação de um fármaco que inativa o vírus do HIV. Por meio do projeto, conseguimos compartilhar o conhecimento do uso dos softwares para diferentes áreas científicas que possam utilizar os fármacos em seus estudos e suas pesquisas.

**PALAVRAS-CHAVE:** Biologia. Fármacos. Modelagem Molecular

### ABSTRACT

Developing an interest in something that involves chemistry and biology is not a simple task. The use of the subjects mentioned above requires specific parts of each one in order to create something useful and that shows interest to students. Through visual technology, it was possible to synchronize the two areas to visualize a 3D model of chemical and biological processes in an educational way. The project focused on disseminating knowledge through YouTube for students from both high school and higher education in the biological and chemical fields to get to know the area. This tutorial presented in an accessible way how to understand the action of a drug that inactivates the HIV virus. Through the project, we were able to share knowledge of the use of software for different scientific areas that can use the drugs in their studies and research.

**KEYWORDS:** Biology. Pharmaceuticals. Molecular modeling.

**Recebido:** 19 ago. 2020.

**Aprovado:** 01 out. 2020.

**Direito autoral:** Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



## INTRODUÇÃO

Uns dos tópicos mais discutidos no meio educacional é sobre como tornar o ensino-aprendizagem mais atrativo, envolvente e interessante. Também, o que fazer para cativar mais o aluno para este se tornar o sujeito da construção do conhecimento. De acordo com pedagogo, Paulo Sergio Garcia em seu artigo, ele diz que *“Uma das maiores vantagens da Internet é que ela é uma ferramenta que fornece acesso a uma enorme quantidade de informações que estão disponíveis em todo o mundo”* (GARCIA. Paulo Sergio, 1998). A internet provou-se de grande importância nessa luta no compartilhamento de informações pelo seu fácil acesso aos mais diversos conteúdos.

O *YouTube*, plataforma na qual são disponibilizados diferentes assuntos no formato de vídeo, é um excelente meio de transmitir o conhecimento. Com uma conta no site, qualquer pessoa pode publicar seus vídeos, permitindo assim uma maior inclusão entre as pessoas que a frequentam. A motivação do projeto Modelagem Molecular, visa a ampliação do acesso ao conteúdo de mesmo nome para os públicos de ensino médio e superior, por conta de o assunto ser pouco conhecido mas de grande impacto na composição de um ensino sólido e agradável.

No decorrer das décadas, o número de pessoas com acesso à internet cresceu, entretanto muitas pessoas ainda não possuem acesso a computadores, utilizando apenas *smartphones*. O aprendizado na internet pode ser um ambiente novo para os alunos menos favorecidos socialmente, por ser um assunto atual que requer um conhecimento prévio de informática, o processo de criação dos vídeos didáticos foi criado com o intuito de facilitar a didática, visto que algumas pessoas podem não ter uma absorção tão rápida do conteúdo. Ao mesmo tempo que empregamos uma abordagem simples, direta e objetiva.

O ensino dessas técnicas por vídeo poderá permitir uma visão mais ampla sobre o assunto e conseguirá engajar os alunos a estudarem, principalmente aos alunos do ensino médio, que ao ter um contato com conteúdos mais avançados, poderão se motivar a cursar o ensino superior em áreas tecnológicas. Enquanto aos alunos de ensino superior, terão acesso ao conteúdo que complementar as disciplinas da graduação e pesquisas.

## MATERIAL E MÉTODOS

Para explorar o mundo microscópio e incentivar o conhecimento da Modelagem Molecular, foi preciso escolher os *softwares* para trabalhar no projeto, os programas utilizados para a construção do material foram: *AutoDockTools*, *AutoDockVina*, *Discovery Studio DS* e *Camtasia Studio*. Cada programa possui uma função nos vídeos. O *AutoDockTools* é uma ferramenta para inspecionar o objeto de maneira 3D. O *AutoDockVina* serve um intermédio que achará as menores energias de ligação calculada para interligar dois arquivos, no caso do vídeo foi uma proteína e um fármaco. O *Discovery Studio DS* manipula livremente o objeto gerado pela união dos dois arquivos. Através dele é possível observar todas as posições de ligações e os mais diversos modelos visuais da molécula, até mesmo em sua cadeia química em 2D.

O primeiro passo a ser discutido foi como criar um vídeo compreensível utilizando ações simples do computador. Para isso, cria-se primeiramente os slides, cada passo do slide estava acompanhado de imagens que, levando em conta *AutoDockTools*, *AutoDockVina* e *Discovery Studio* para facilitar a aprendizagem. O programa para gravação foi decidido por testes, foram utilizados o *OBS Studio* e o *Camtasia Studio*. Contudo, o *Camtasia* apresentou melhores possibilidades de edição e gravação.

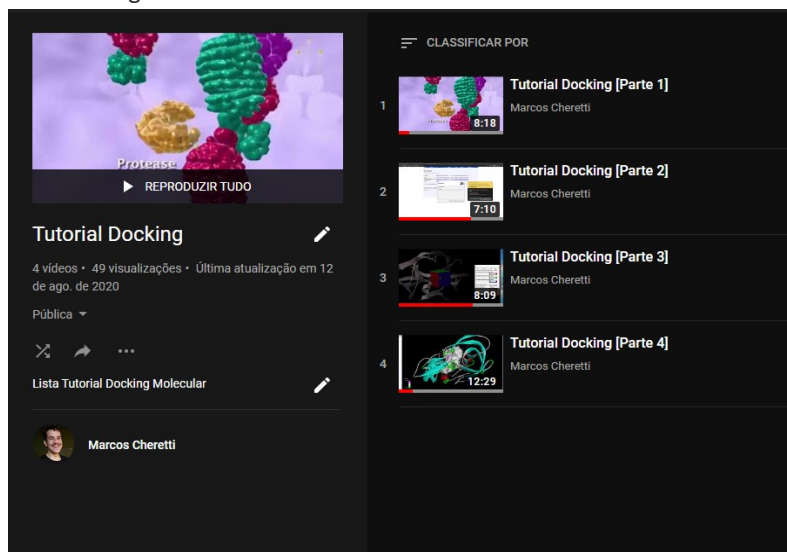
Em seguida, foram elaborados *slides* para introduzir os programas ao público e auxiliar posteriormente nos vídeos de forma mais clara e complementar. Ao mesmo tempo em que os *slides* servem para acompanhar, eles possuem mais conteúdo para caso alguém queira aprofundar-se mais em determinado assunto. De maneira que muitos podem ficar perdidos ao acompanharem o vídeo com os slides em decorrência de algumas ações não usuais no computador, foram empregadas imagens de cada local de ação. A próxima fase foram as gravações, foram separadas as filmagens em dois aspectos: programas e tópicos. A parte dos programas, foi decidido que seria em ordem de utilização, influenciando a ordem dos vídeos. Em contrapartida, os tópicos influenciaram a ordem de explicação dentro dos programas, dessa forma, cada um teve um próprio vídeo e sua duração em média de 10 minutos para não ficar tão maçante aos alunos, como visto na Figura.

No último vídeo do tutorial, foi elaborado uma comparação entre o resultado ideal e os resultados obtidos de cada teste. Neste processo, cada aluno gerou um arquivo que possui uma ligação com a proteína teste. Para a comparação, foi disponibilizado um arquivo exemplo de melhor interação para analisar a discrepância dos resultados. Por intermédio do modelo referente pode-se observar as posições que divergiram do resultado ideal. Após equiparar os resultados, o tutorial está encerrado.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos foram satisfatórios, grande parte do grupo de alunos da graduação em biologia com seus professores, que assistiram os vídeos tutoriais (Figura 1) deram o *feedback*. Dentro das respostas sobre o tutorial, surgiram pequenas questões sobre a postura em vídeo, o ajuste de animações e até mesmo contribuições sobre pequenos detalhes, os quais serão alterados futuramente. Apesar de alguns relatos de problemas durante as experiências, do qual o processo de utilização do programa *AutoDockVina* não estava sendo executado, conseguimos achar a causa do problema que era apenas caracteres extra no nome da página. Após responder a todos mediante e-mail, os alunos conquistaram êxito na execução desta etapa do tutorial. Dessa forma, poderemos futuramente ajustar os vídeos para que não permaneça nenhum equívoco no final do projeto. Apesar do problema citado acima, grande parte das dificuldades foram resolvidas e desse modo prossegui com os testes.

Figura 1 – Canal do Youtube com os vídeos elaborados.

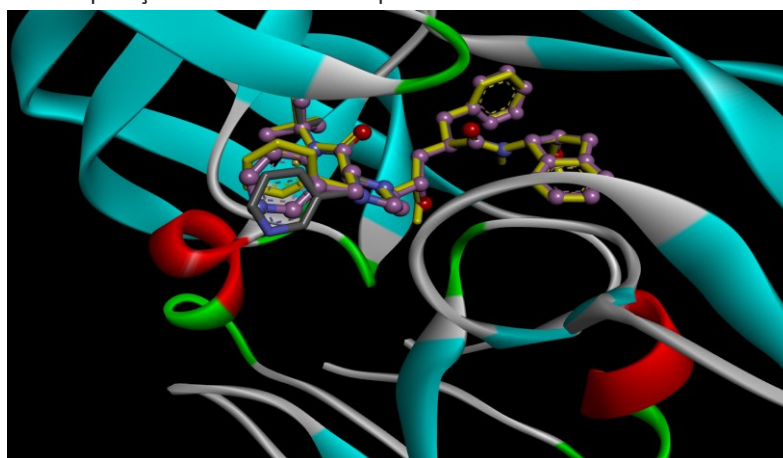


Fonte: Autoria própria (2020).

Com todos os participantes prontos com seus arquivos gerados por intermédio do tutorial, foi disponibilizado o arquivo para sobreposição com o intuito de comparar os resultados (Figura 2) que cada um obteve, por meio desta etapa. Ainda na Figura 2, podemos observar a cadeia amarela, que é o resultado obtido, enquanto o roxo pertence ao fármaco em sua posição real. Ao verificarmos que quase todos obtiveram resultados semelhantes ao ideal -apenas poucas divergências nas rotações em comparação com o ideal- o resultado do tutorial foi satisfatório, restando apenas os ajustes para os vídeos no final do projeto.

Posteriormente, foi marcada uma conferência com os alunos que participaram dos testes. Nela, foi aprofundado o conhecimento dos softwares, igualmente sobre uma explicação mais complexa da modelagem molecular, e suas aplicações na ciência e no mercado de fármacos.

Figura 2 - Sobreposição da HIV *protease* com o resultado obtido em comparação com o resultado aproximado em laboratório.



Fonte: Autoria própria (2020).



## CONCLUSÕES

Por meio dos vídeos disponibilizados no *YouTube*, foi possível compartilhar o conhecimento do uso de programas de Modelagem 3D para todos os alunos que tiveram interesse em conhecer sobre o conteúdo, principalmente nos ensinamentos da Biologia e da Química. O aprendizado gerado pelo tutorial poderá proporcionar diferencial no futuro dos alunos da graduação, incentivando-os a descobrirem novas áreas de aplicações em seus estudos.

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer aos meus amigos por terem me apoiado no projeto, assim como a orientação do projeto e aos grupos de pesquisa das universidades públicas que contribuíram assistindo aos vídeos para melhorar nossa proposta. Também gostaria de agradecer a bolsa PROREC provida pela instituição que veio a me proporcionar o benefício durante a participação do projeto.

## REFERÊNCIAS

GARCIA, Paulo Sergio. **A Internet como nova mídia na educação**, jul 1998.

Disponível em:

[http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos\\_teses/EAD/NOVAMIDIA.PDF](http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos_teses/EAD/NOVAMIDIA.PDF). Acesso: em 31 ago. 2020

Google, 2005. Disponível em: <https://www.youtube.com/>

*The Scripps Research Institute*, Versão 4.2, 1989. Disponível em:

<http://autodock.scripps.edu/>. Acesso em: 22 abr. 2020.

O. Trott, A.J Olson. Versão 1.1.2. [entre 1990 e 2000]. Disponível em:

<http://vina.scripps.edu/>. Acesso em: 22 abr. 2020

Dessault Systèmes. Versão 4.5. 2002. Disponível em:

<https://discover.3ds.com/discovery-studio-visualizer-download>. Acesso em: 22 abr. 2020.

TechSmith Corporation. Versão 2020.0.8. 1995. Disponível em: <https://camtasia-studio.br.uptodown.com/windows>. Acesso em: 22 abr. 2020

OBS Studio Contributors. Versão 26.0.2. 2012. Disponível em:

<https://obsproject.com/pt-br> . Acesso em: 22 abril. 2020.