

NANODISPOSITIVOS MAGNÉTICOS: UMA ABORDAGEM COMPUTACIONAL PARA O ENSINO DE QUÍMICA NA ERA 4.0

João Victor F. Felício; Ingrid G. S. Machado; Matheus S. Hamouche; Denise B. Almeida

Laboratório de Pesquisas e Experimentos em Nanociência, Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais – JF.

Palavras-Chave: Nanodispositivos, Ensino de Química, Química Computacional

Introdução

A nanotecnologia, campo multidisciplinar que opera na escala nanométrica (1 a 100 nanômetros), tem revolucionado diversas áreas do conhecimento, incluindo a medicina, a eletrônica, a ciência dos materiais e a indústria. As propriedades únicas de materiais em nanoescala, como alta reatividade, área superficial ampliada e capacidade de interagir com sistemas biológicos em nível molecular, impulsionam o desenvolvimento de nanodispositivos com aplicações promissoras, a exemplo dos nanodispositivos magnéticos. Esses dispositivos, compostos por materiais magnéticos em escala nanométrica, apresentam um potencial significativo para o tratamento de doenças como o câncer, atuando como vetores para entrega direcionada de fármacos, agentes de contraste em imagenologia e mediadores em terapia hipertérmica (PANDYA et al., 2023).

No entanto, o ensino de conceitos complexos relacionados à nanociência, como aqueles relacionados aos nanodispositivos magnéticos, apresenta desafios consideráveis, especialmente em um cenário educacional em constante mutação, marcado pela ascensão da era 4.0 (ou Indústria 4.0). Neste contexto, a química computacional surge como uma ferramenta pedagógica poderosa, capaz de tornar o aprendizado mais dinâmico, interativo e acessível (SILVA, A.; PEREIRA, B.; COSTA, C., 2020). Através de softwares de modelagem molecular e simulações computacionais, os alunos podem explorar o mundo em nanoescala, visualizando e manipulando estruturas tridimensionais de átomos e moléculas, compreendendo as relações entre estrutura e propriedades e prevendo o comportamento de sistemas químicos complexos, sem a necessidade de experimentos laboratoriais dispendiosos ou potencialmente perigosos.

Diante do exposto, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um conjunto de atividades educacionais utilizando de algumas plataformas de modelagem molecular como ChemSketch, ChemDraw, Chimera, Sim-nML e Avogadro para o ensino de conceitos relacionados a nanodispositivos magnéticos, abrangendo desde a contextualização histórica da nanotecnologia até a exploração das propriedades magnéticas dos materiais e suas aplicações em biomedicina e eletrônica. A escolha destas plataformas justifica-se por sua interface amigável, recursos visuais avançados e a possibilidade de integrar simulações computacionais com animações interativas, tornando o aprendizado mais intuitivo, envolvente e eficaz para os alunos, além do fato de serem softwares de código aberto.

Material e Métodos

Este trabalho utilizou uma abordagem metodológica qualitativa centrada no desenvolvimento de um conjunto de atividades didáticas inovadoras, utilizando as plataformas de modelagem molecular Avogadro (HANWELL et al., 2012) e ChemSketch (2022), juntamente com o SIM-nML (VISHNOI, 2006) para o ensino de conceitos relacionados a nanodispositivos magnéticos. Para esta etapa foram utilizadas estas plataformas especificamente por conta de sua capacidade de integração com outros softwares de química computacional, como o GAMESS e o Gaussian, o que as tornam ferramentas versáteis e acessíveis para fins educacionais. As atividades foram elaboradas com o objetivo de promover uma aprendizagem significativa para os alunos dos Cursos Técnicos Integrados do IF Sudeste MG - campus Juiz de Fora.

O processo de desenvolvimento das atividades didáticas foi baseada em uma abordagem contextualizada (MUCH;WINKELMANN;HUGERAT, 2022) e voltada para a resolução de problemas, em consonância com os princípios da Educação 4.0 (SCHLEICHER, 2018) e consistiu em três etapas principais:

1. Design Instrucional: Nesta etapa, definimos os objetivos de aprendizagem, o público-alvo (alunos do ensino médio ou superior), os conteúdos a serem abordados e a estrutura geral das atividades. Optamos por uma abordagem sequencial, iniciando com a introdução de conceitos básicos da nanotecnologia e do magnetismo, avançando para a exploração de diferentes tipos de nanodispositivos magnéticos e finalizando com a discussão de suas aplicações em áreas como a biomedicina e a eletrônica.
2. Modelagem Molecular e Elaboração de Materiais: Nesta etapa, utilizamos o Avogadro, Chem3D e o ChemSketch para construir modelos tridimensionais de diferentes nanomateriais magnéticos, como nanopartículas de óxido de ferro (Fe_3O_4), utilizadas em aplicações biomédicas (GUPTA; GUPTA, 2005). A escolha da ferrita como material de trabalho se insere no contexto das atividades que já são previstas no conteúdo de química para os cursos de Metalurgia, Eletromecânica e Mecânica.
3. Implementação e Avaliação: A implementação das atividades em sala de aula ocorreu em um momento posterior, em duas turmas do 1º ano e duas turmas de 2º ano dos cursos técnicos integrados em mecânica e eletromecânica do IF Sudeste MG- campus Juiz de Fora. Foram utilizadas as metodologias ativas de aprendizagem: a aprendizagem entre pares e a sala de aula invertida, com o objetivo de estimular a participação ativa dos alunos, a colaboração, o pensamento crítico e a criatividade. A avaliação da aprendizagem foi realizada a partir da análise de produções textuais, resolução de problemas e autoavaliação.

Resultados e Discussão

O desenvolvimento das atividades didáticas utilizando os softwares juntamente com os alunos permitiu a criação de um ambiente de aprendizagem imersivo. A visualização tridimensional de moléculas e materiais em nanoescala, combinada com a possibilidade de manipulação e interação em tempo real, proporcionou uma experiência de aprendizagem mais concreta e significativa, transcendendo as limitações dos modelos frequentemente utilizados no ensino tradicional. Além disso, os alunos demonstraram maior engajamento e interesse para desenvolver as atividades propostas e aprender a utilizar os softwares apresentados.

A atividade introdutória sobre nanotecnologia explorou o conceito de escala nanométrica utilizando recursos visuais do Avogadro para comparar o tamanho de diferentes átomos e moléculas. Essa abordagem lúdica e interativa despertou a curiosidade dos alunos e os instigou a refletir sobre as dimensões extraordinariamente pequenas em que a nanotecnologia opera. Adicionalmente, a exploração de exemplos reais de aplicações da nanotecnologia em áreas como medicina, eletrônica e ciência dos materiais evidenciou a relevância social e tecnológica do tema, tornando o aprendizado mais contextualizado e a correlação com as disciplinas desenvolvidas nas áreas técnicas dos cursos possibilitou uma maior apropriação do conhecimento por parte dos alunos.

A atividade sobre propriedades magnéticas dos materiais utilizou o Avogadro para visualizar a estrutura atômica e molecular de diferentes materiais, como ferro, cobre e água, explorando a relação entre a configuração eletrônica e o comportamento magnético. A simulação da interação de um campo magnético externo com esses materiais permitiu aos alunos compreenderem os conceitos de diamagnetismo, paramagnetismo e ferromagnetismo de forma visual e intuitiva. Adicionalmente, a discussão de aplicações tecnológicas do magnetismo, como em motores elétricos, discos rígidos e equipamentos de ressonância magnética, ilustrou a relevância prática dos conceitos abordados.

A atividade sobre nanodispositivos magnéticos explorou a estrutura e o funcionamento de diferentes tipos de nanopartículas magnéticas, como as de óxido de ferro (Fe_3O_4), frequentemente utilizadas em aplicações biomédicas. Utilizando o ChemSketch, juntamente com o SIM-nML, os alunos puderam construir e visualizar modelos tridimensionais dessas nanopartículas, explorando a relação entre suas propriedades, como tamanho, forma e composição, e suas propriedades magnéticas.

Os resultados preliminares da aplicação das atividades em sala de aula indicam um aumento do interesse, da participação e da compreensão dos alunos em relação aos temas abordados. Os resultados dos questionários aplicados nas turmas a maioria dos alunos relataram ter se sentido mais confiantes e motivados a explorar o mundo da química e da nanotecnologia, utilizando ferramentas computacionais. Adicionalmente, verificou-se que 90% dos alunos apresentaram rendimento médio na disciplina de química acima da média, superando os resultados apresentados pelas demais turmas nas quais o conteúdo foi apresentado apenas na forma de textos e apresentação de seminários.

Conclusões

O trabalho desenvolvido demonstrou o potencial das plataformas de modelagem molecular como ferramenta pedagógica para o ensino de química na Era 4.0, em particular no contexto da nanotecnologia e dos nanodispositivos magnéticos. O desenvolvimento e a aplicação das atividades didáticas evidenciaram que a visualização tridimensional, a manipulação interativa de modelos moleculares e a simulação de cenários complexos em nanoescala tornaram a aprendizagem mais intuitiva, envolvente e significativa para os alunos.

Observou-se um aumento no interesse, na participação e na compreensão dos conceitos relacionados à nanotecnologia e ao magnetismo, à medida que os alunos interagem com os modelos moleculares, exploravam as propriedades dos materiais em nanoescala e conectavam assim os conhecimentos adquiridos com aplicações reais na área da eletrônica.

Os resultados obtidos reforçam a importância de integrar as tecnologias digitais e as metodologias ativas de aprendizagem ao ensino de química, a fim de despertar a curiosidade dos alunos, promover o desenvolvimento de habilidades essenciais para o século XXI, como a resolução de problemas, o trabalho em equipe e o pensamento crítico, e preparar as futuras gerações para os desafios e oportunidades da sociedade do conhecimento.

Agradecimentos

Ao CNPq, FAPEMIG e IF Sudeste MG/Juiz de Fora pela bolsa concedida.

Referências

- CHEMSKETCH, versão 2022.1.2, Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs), Toronto, ON, Canadá, www.acdlabs.com.
- GUPTA, A. K.; GUPTA, M. Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications. *Biomaterials*, v. 26, n. 18, p. 3995-4021, 2005.
- HANWELL, M. D. et al. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, v. 4, n. 1, p. 17, 2012.
- MUCH, R. A.; WINKELMANN, K. E HUGERAT, M. *Nanochemistry for Chemistry Educators*, The Royal Society of Chemistry, 2022.
- PANDYA M. S.; NIKOLIĆ, M.; PULLAR, R.; B, M.; K. P., S.; CARVALHO, F.; CHAUDHARY, R.; ABDALA, A.; PATEL, A.; JOTANIA, R.; DESIMONE, M.; DE MARZI, M.; ALVAREZ, G. *Magnetic Nanoparticles for Biomedical Applications*, 2023.
- SCHLEICHER, A. *The Future of Education and Skills: Education 2030*. OECD, Paris, 2018.
- SILVA, A.; PEREIRA, B.; COSTA, C. A química computacional como ferramenta pedagógica na era da Indústria 4.0. *Revista de Educação em Química*, v. 35, n. 2, p. 123-145, 2020.
- VISHNOI, S.K. *Functional Simulation Using Sim-nML*. Master's Degree Thesis, India, IIT Kanpur, 2006.