ISSN: 2358-8829

FERRAMENTAS DIGITAIS: O USO DE SOFTWARES NA FORMAÇÃO DOCENTE

Ryan Gabriel Neves de Oliveira [1]
Maria Inês Pereira de Almeida [2]
Gabriel Lima da Silva [3]
Marcell Bezerra Rebouças Félix [4]
Jonathan Alves Rebouças [5]

RESUMO
Este trabalho analisa a geometria molecular da Salicilamida ($C_7H_7NO_2$) sob a óptica da Física Geral I, validando dados do software Avogadro 2 por meio de álgebra vetorial. A metodologia envolveu a extração de coordenadas cartesianas (x, y, z) após otimização pelos campos de força MMFF94, GAFF e UFF. Através do cálculo da norma de vetores e do produto escalar, determinou-se o comprimento das ligações e a geometria trigonal planar nos centros de carbono. O confronto dos cálculos manuais com a literatura científica confirmou a precisão da modelagem computacional na descrição da estabilidade e das propriedades estruturais da matéria.

Palavras-chave: Simulação molecular, Salicilamida, Avogadro, Vetores, Ensino de física.

INTRODUÇÃO

A modelagem molecular moderna fundamenta-se na descrição da matéria em escala atômica através de coordenadas cartesianas, o que a torna um dos pilares fundamentais para a compreensão das propriedades físico-químicas de estruturas moleculares. Na óptica da Física Geral, uma molécula é interpretada como um sistema dinâmico de partículas onde a estabilidade estrutural é regida pelo equilíbrio de forças e pela busca do estado de menor energia. Segundo Silva et al. (2020), a utilização de softwares de

[1] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, neve.gabriel61@aluno.ifce.edu.br;
[2] Graduanda do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, ines.almeida11@aluno.ifce.edu.br;
[3] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, lima.gabriel05@aluno.ifce.edu.br;
[4] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, marcell.bezerra06@aluno.ifce.edu.br;
[5] Professor orientador: Doutor em Física, professor do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, jalvesreboucas@ifce.edu.br.

ISSN: 2358-8829

modelagem e simulação computacional, como o **Avogadro 2**, torna-se essencial para a interpretação de coordenadas atômicas, transformando-as em informações estruturais compreensíveis e permitindo que conceitos teóricos abstratos sejam visualizados de forma tangível. A precisão desses softwares depende intrinsecamente da aplicação da **álgebra vetorial**. Cada átomo no espaço tridimensional é definido por coordenadas (x, y, z), e as propriedades estruturais são derivadas de operações matemáticas sobre esses pontos: o comprimento das ligações químicas é calculado por meio do módulo do vetor entre dois núcleos, enquanto os ângulos de abertura entre as ligações são determinados através do produto escalar entre os vetores de ligação que partem de um átomo central (vértice). Sem a álgebra vetorial, não seria possível converter dados brutos de posição em geometrias moleculares precisas, fundamentais para prever a estabilidade e a reatividade de sistemas quimicamente relevantes.

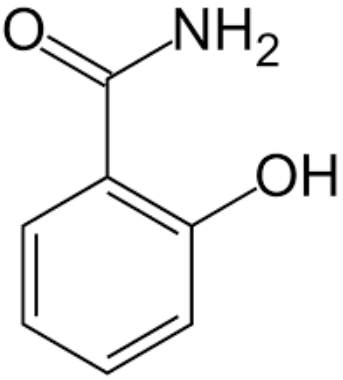
A molécula escolhida para este estudo é a **Salicilamida (C7H7NO2)**, um composto orgânico derivado do ácido salicílico com importantes propriedades analgésicas e antitérmicas. O interesse científico no estudo estrutural da salicilamida reside na complexidade da sua geometria plana e na presença de grupos funcionais distintos — a hidroxila fenólica e o grupo amida — ligados a um anel aromático. A disposição espacial desses grupos é crítica, pois influencia a formação de ligações de hidrogênio intramoleculares e intermoleculares, determinando sua eficácia na interação com receptores biológicos. Estudar analiticamente a geometria da salicilamida através de cálculos vetoriais permite validar modelos teóricos e observar como diferentes parametrizações de **campos de força (MMFF94, GAFF e UFF)** podem prever variações nas distâncias e ângulos de ligação. Assim, o estudo desta molécula serve como uma ponte ideal entre o rigor matemático dos vetores e a modelagem molecular prática, utilizando dados de referência para validar a eficácia dos métodos computacionais aplicados no curso de Química.

METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)

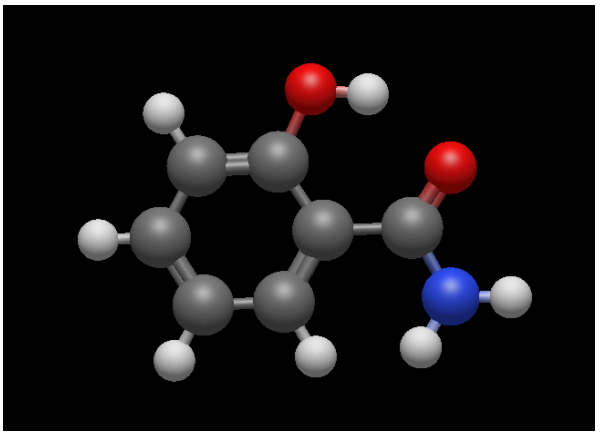
A molécula estudada possui a fórmula molecular C7H7NO2. A otimização geométrica foi realizada no software Avogadro 2.0.0, utilizando três campos de força distintos para comparação: MMFF94, GAFF e UFF.

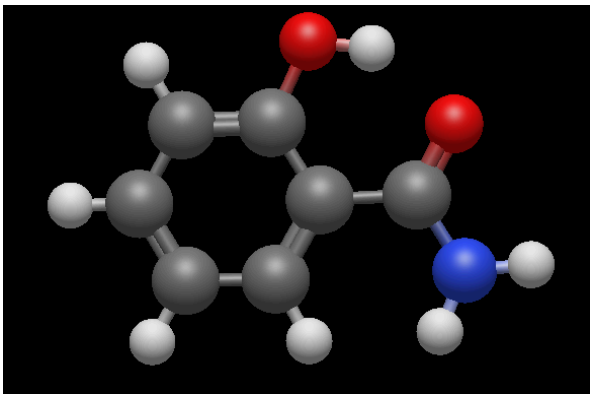
ISSN: 2358-8829

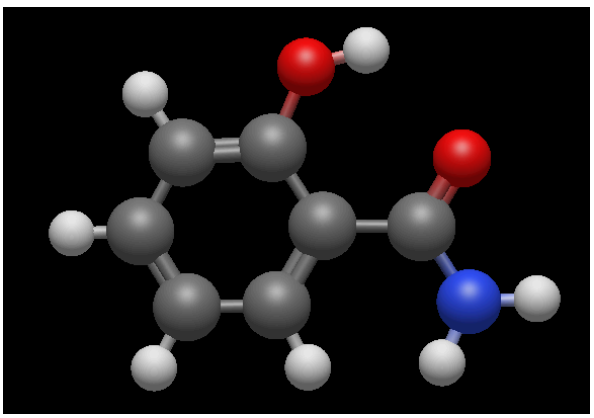
- FÓRMULA ESTRUTURAL



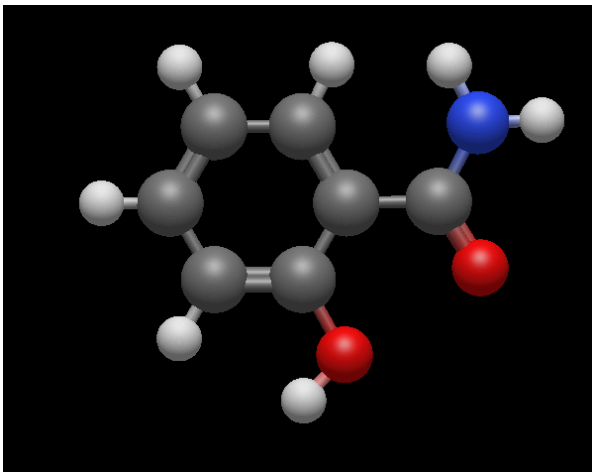
- MOLÉCULAS OTIMIZADAS

GAFF 

MMFF94 

UFF 

ISSN: 2358-8829

LITERATURA 

- PROCEDIMENTO:
  1. A modelagem foi realizada no software Avogadro 2, sendo inicialmente feita a construção da estrutura básica da salicilamida
- 2. Logo após, foi feita a otimização da geometria utilizando os três campos de forças distintos: MMFF94, GAFF, UFF, sempre buscando minimizar a energia potencial do sistema, aproximando as distâncias atômicas das condições reais do equilíbrio.
  3. Concluído isso, as coordenadas (x, y, z) foram extraídas para a realização dos cálculos analíticos de validação.
- CÁLCULOS: Para validar os dados fornecidos pelo Avogadro 2, utilizou-se o rigor da geometria analítica e do cálculo vetorial. 1. Cálculo para o tamanho das ligações: O comprimento de uma ligação entre dois átomos, é definido fisicamente como o módulo do vetor que os une. Dadas as coordenadas A(x1, y1, z1) e B(x2, y2, z2), a distancia é calculada pela fórmula: *Ligação* = raiz de $(x2 - x1)$ao quadrado + $(y2 - y1)$ao quadrado + $(z2 - z1)$ao quadrado. Cálculo dos ângulos de abertura Θ Para encontrar o ângulo duas ligações que partem de um mesmo átomo central , utilizou-se a definição de produto escalar entre dois vetores, 1. $Ln1 \times Ln2$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A validação da modelagem computacional foi realizada confrontando os valores fornecidos pelo Avogadro 2, após otimização pelos três campos de força, com os resultados obtidos manualmente por álgebra vetorial. Para os comprimentos de ligação, aplicou-se o módulo do vetor que une dois núcleos; para os ângulos de abertura, empregou-se a definição de produto escalar entre os vetores de ligação que partem de um átomo central. A Tabela 1 reúne os comprimentos de ligação (em angströms) das principais ligações da região do anel aromático e da conexão com a carbonila.

Tabela 1 — Comprimentos de ligação (Å) da salicilamida por campo de força.

ISSN: 2358-8829

ID	Ligação	MMFF94 (calc.)	GAFF (calc.)	UFF (calc.)	Literatura
1	C1–C2	1,406	1,410	1,438	≈ 1,40
5	C2–C6	1,395	1,395	1,402	≈ 1,39
7	C2–O8	1,371	1,365	1,353	≈ 1,36

Tabela 2 — Ângulos de ligação (°) na vizinhança do átomo central C2.

ID	Ângulo	MMFF94 (calc.)	GAFF (calc.)	UFF (calc.)	Literatura
4	C1–C2–C6	120,89	120,46	119,94	≈ 120,0°
5	C1–C2–C8	123,43	122,38	124,59	≈ 123,0°
6	C6–C2–C8	115,66	117,15	115,48	≈ 117,0°

Em primeiro lugar, observou-se que os resultados calculados manualmente coincidem com os valores fornecidos pelo software, o que confirma a consistência interna da modelagem: os comprimentos obtidos pelo módulo dos vetores e os ângulos obtidos pelo produto escalar reproduzem, dentro da precisão adotada, as coordenadas cartesianas geradas na otimização. Esse acordo é a evidência central de que o Avogadro 2 pode ser auditado por ferramentas elementares de geometria analítica, e de que os dados brutos de posição foram corretamente convertidos em propriedades estruturais.

Quanto aos comprimentos de ligação (Tabela 1), o campo de força UFF apresentou as maiores variações frente aos valores de referência, chegando a 1,438 Å na ligação C1–C2, cerca de 0,04 Å acima do valor típico (1,40 Å) de uma ligação aromática. Esse desvio é coerente com a natureza do UFF, um campo de força genérico, parametrizado para cobrir toda a tabela periódica, e que por isso descreve com menos fidelidade a ressonância característica do anel benzênico. Já o MMFF94 e o GAFF, parametrizados especificamente para sistemas orgânicos, mantiveram-se mais próximos dos valores aromáticos esperados: ambos convergiram para 1,395 Å na ligação C2–C6 e ficaram a poucos milésimos de angström da referência nas demais ligações. A ligação C2–O8,

ISSN: 2358-8829

que conecta o anel ao átomo de oxigênio, também seguiu esse padrão, com os três campos variando entre 1,353 e 1,371 Å em torno do valor de literatura (1,36 Å).

No que se refere aos ângulos (Tabela 2), todos os campos de força reproduziram a geometria trigonal planar esperada para o carbono C2, com valores próximos de 120°, somatório dos três ângulos ao redor do centro consistente com um átomo sp^2 e desvios menores que 2° em relação à literatura. As pequenas variações angulares refletem a forma como cada algoritmo trata a repulsão eletrônica entre a carbonila e o anel benzênico: o ângulo C1–C2–C8, que posiciona o substituinte em relação ao anel, foi o mais sensível ao método, variando de 122,38° (GAFF) a 124,59° (UFF). Essa abertura ligeiramente maior no UFF, acompanhada do fechamento correspondente do ângulo C6–C2–C8, indica uma descrição distinta do equilíbrio de forças na vizinhança do grupo funcional, exatamente o ponto em que a parametrização genérica tende a divergir das parametrizações dedicadas.

Em síntese, os resultados mostram que, embora os três campos de força convirjam para uma mesma geometria plana e trigonal, próxima do mínimo de energia potencial do sistema, a escolha do método influencia diretamente a precisão quantitativa. MMFF94 e GAFF se mostraram mais adequados para a salicilamida por respeitarem o caráter aromático do anel, enquanto o UFF, apesar de útil como estimativa inicial, acumula os maiores desvios. Do ponto de vista da Física Geral, o estudo evidencia como operações vetoriais simples, o módulo de um vetor e o produto escalar, são suficientes para validar, de forma independente, a modelagem computacional e para interpretar a estabilidade estrutural como resultado do equilíbrio de forças que conduz a molécula ao estado de menor energia.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O trabalho validou com sucesso a aplicação da álgebra vetorial na modelagem molecular da salicilamida. A partir das coordenadas cartesianas extraídas do Avogadro 2, o cálculo do módulo dos vetores de ligação e do produto escalar entre vetores que partem de um átomo central permitiu reconstruir, de forma independente, os

ISSN: 2358-8829

comprimentos e os ângulos de ligação fornecidos pelo software. Esse procedimento confirmou que ferramentas elementares de geometria analítica são suficientes para auditar dados de modelagem computacional, reforçando a ponte, proposta na introdução, entre o rigor matemático dos vetores e a prática da simulação molecular.

A principal contribuição do estudo está na precisão dos cálculos manuais, que ratificaram os dados computacionais dentro da margem adotada. Essa coincidência entre os valores calculados e os gerados pelo programa demonstra a consistência interna do método e evidencia como a estabilidade estrutural pode ser interpretada fisicamente, como resultado do equilíbrio de forças que conduz a molécula ao estado de menor energia potencial, princípio ilustrado de forma concreta pela geometria trigonal planar observada nos centros de carbono, com ângulos próximos de 120°. Por outro lado, os resultados também revelaram que a geometria final depende sensivelmente do campo de força escolhido: enquanto o MMFF94 e o GAFF, parametrizados para sistemas orgânicos, permaneceram próximos dos valores aromáticos de referência, o UFF, de caráter genérico, acumulou os maiores desvios (como 1,438 Å na ligação C1–C2, frente ao esperado de ≈ 1,40 Å), lembrando que a qualidade do resultado não depende apenas do método de validação, mas também da adequação do modelo físico empregado na otimização.

Como continuidade, sugere-se a análise da energia vibracional da molécula, cujo cálculo dos modos normais permitiria confirmar se a geometria obtida corresponde de fato a um mínimo estável, além de informar sobre a rigidez das ligações e a dinâmica dos grupos funcionais; estudos futuros poderiam ainda explorar as ligações de hidrogênio intramoleculares da salicilamida e compará-las com métodos de mecânica quântica. Mais do que validar dados estruturais, porém, a experiência reforça o papel das ferramentas digitais na formação docente: ao integrar a álgebra vetorial à modelagem molecular, o estudo transforma conceitos abstratos de Física Geral em evidências visíveis e verificáveis, oferecendo ao futuro professor de Química um recurso didático que une o rigor matemático à interpretação concreta da matéria e amplia suas estratégias de ensino em sala de aula.

ISSN: 2358-8829

REFERÊNCIAS

NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. PubChem Compound Summary for CID 5147, **Salicylamide**. Bethesda: National Library of Medicine (US), 2026. Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5147. Acesso em: 9 maio 2026.

REBOUÇAS, J. A. **Tutorial e distribuição de moléculas para o trabalho de Física Geral I.** Iguatu: IFCE, 2026.

SILVA, J. R.; DIAS, R. P.; VASCONCELOS, F. C. G. C. Simulação computacional no ensino de química: o uso do programa Avogadro® como ferramenta auxiliar no ensino de ligações químicas. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 15, n. 2, p. 247-261, 2020. Disponível em: https://fisica.ufmt.br/eenciojs/index.php/eenci/article/view/722. Acesso em: 11 maio 2026.