ISSN: 2358-8829

ANÁLISE ESTRUTURAL E COMPARATIVA DA TEOBROMINA UTILIZANDO O SOFTWARE AVOGADRO E CÁLCULOS ANÁLITICOS: UMA ABORDAGEM PRÁTICA PARA O ENSINO DE VETORES E MECÂNICA MOLECULAR

Maria Leticia Alves Beserra[1]
Jonathan Alves Rebouças [2]

INTRODUÇÃO

Para muitos estudantes a construção do conhecimento químico pode ser considerado complexo e de difícil compreensão. Um dos fatores que contribui para esse estereótipo é o caráter abstrato da Química, que, apesar de estar presente no cotidiano, nem sempre é facilmente visualizada. Por se tratar de uma área amplamente representada por símbolos e fórmulas, evidencia a complexidade no processo de aprendizagem, especialmente no que se refere à memorização e à interpretação desses elementos.

Nessa perspectiva, diversos educadores têm buscado metodologias menos centradas na teoria e mais contextualizadas, como forma de facilitar a compreensão dos estudantes e aproximá-los do conhecimento científico por meio de uma melhor visualização desses conteúdo para a superação das barreiras entre o conceitual e o real (Barbosa, 2023). Dessa forma, um meio utilizado para a solução desse problema e de grande atratividade aos estudantes, refere-se ao uso das Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs), que atualmente vêm consolidando-se como um recurso estratégico para o avanço da educação.

A adoção dessa metodologia de ensino possibilita a visualização e simulação dos conteúdos abordados em sala de aula de maneira dinâmica, afastando-se, em parte, do modelo tradicional baseado em aulas monótonas e na simples memorização de conceitos e fórmulas (Batista et al., 2018). Como exemplo dessas tecnologias,

[1]Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologias do Ceará - IFCE, alves.leticia09@aluno.ifce.edu.br;
[2] Professor orientador: Doutor, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, jalvesreboucas@ifce.edu.br;

ISSN: 2358-8829

destacam-se os softwares educacionais, recursos digitais utilizados como auxiliares no processo de ensino e aprendizagem, que, segundo Jucá (2006), são ferramentas pedagógicas desenvolvidas com o objetivo de promover a construção do conhecimento em torno de conteúdos didáticos específicos. Dentre os diversos softwares educacionais disponíveis, encontra-se o Avogadro, um programa gratuito, de código aberto e compatível com diferentes sistemas operacionais, como Windows e Linux. Esse software é amplamente utilizado para a compreensão de conceitos químicos, como o cálculo de ligações, geometria molecular e a determinação de ângulos entre átomos.

A partir das propriedades do software de modelagem molecular Avogadro, o presente trabalho buscou desenvolver a molécula teobromina, um alcalóide nitrogenado da família das metilxantinas presente no cacau, com o objetivo de compreender suas ligações e ângulos de formação por meio do uso de calculos análitícos afim de verificar a precisão das coordenadas tridimensionais fornecidas pelo Avogadro para os campos de força GAFF, MMFF94 e UFF.

Espera-se que com a abordagem do software educacional para o ensino das ciências da natureza, conceitos considerados abstratos, como o uso de vetores e geometria molecular, sejam visualizados de maneira dinâmica, como um recurso didático para entender a mecânica molecular. Para a análise de dados, a metodologia aplicada é de valor qualitativo, pois baseia-se na obtenção de dados numéricos provenientes da modelagem molecular da teobromina no Avogadro e na comparação desses valores com aqueles presentes na literatura, a fim de verificar a precisão dos dados gerados pelo software Avogadro.

METODOLOGIA

Resultado de um trabalho acadêmico, esta pesquisa nasce a partir da disciplina de Física Geral I, ofertada aos alunos do 3° semestre do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal do Ceará, campus Iguatu, e caracteriza-se como um estudo descritivo, pautado em uma abordagem qualitativa apoiado em comparações numéricas. O estudo tem como objetivo relacionar a aplicação didática de vetores e produto escalar à geometria molecular através do uso das Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs).

ISSN: 2358-8829

A intervenção pedagógica consistiu em uma atividade na qual cada estudante recebeu uma molécula específica para modelar no software avogadro. Neste trabalho, a molécula sorteada é a teobromina, um composto orgânico presente no cacau. A estrutura molecular da teobromina foi construída no Software Avogadro, versão 2.0 e otimizada por meio do Open Babel para três distintos campos de forças: GAFF, MMFF94 e UFF.

Campos de força são modelos matemáticos parametrizados empregados na mecânica molecular para descrever a energia potencial de um sistema. Como suas formas funcionais e parametrizações diferem, campos distintos podem produzir geometrias ligeiramente diferentes para a mesma molécula (Lewis-Atwell; Townsend; Grayson, 2021).

Após a otimização da estrutura, escolhemos três ângulos de ligação: C-C-N, N-C-O e N-C-N, para a obtenção de suas coordenadas atômicas: x, y e z, utilizadas para determinar os comprimentos e os ângulos de ligação da molécula. Na mecânica molecular, a molécula é vista como átomos mantidos juntos por ligações que podem ser representadas por vetores que indicam a direção, o sentido e o comprimento da ligação. Assim, com o uso dos vetores conseguimos descrever a localização da molécula no espaço tridimensional e compreender os ângulos entre as ligações.

Para cada ângulo A–B–C, os dois vetores devem partir do átomo central (equação 1) Os comprimentos de ligação foram calculados a partir da distância euclidiana entre dois átomos, pelo módulo do vetor deslocamento (equação 2). O ângulo entre as ligações é obtido através do produto escalar entre dois vetores, este ângulo é essencial para determinar a geometria da molécula, visto que influência nas propriedades de hibridização, torções e ângulos diedros da estrutura analisada (equação 3)

Equação 1 — Vetores das ligações, com origem no átomo central B

$$\vec{BA} = \vec{r}_A - \vec{r}_B, \qquad \vec{BC} = \vec{r}_C - \vec{r}_B$$

Equação 2 — Comprimento de ligação (distância euclidiana)

$$d_{AB} = \sqrt{\left(x_B - x_A\right)^2 + \left(y_B - y_A\right)^2 + \left(z_B - z_A\right)^2}$$

ISSN: 2358-8829

Equação 3 — Ângulo de ligação pelo produto escalar

$$\theta = cos^{-1}\left(\frac{\vec{BA}\cdot\vec{BC}}{\left|\vec{BA}\right|\left|\vec{BC}\right|}\right)$$

A partir dos resultados obtidos por meio dos cálculos analíticos para os diferentes campos de forças, os dados foram organizados em tabelas que apresentam os parâmetros estruturais de referência disponíveis no PubChem, para avaliar o uso do Software educacional Avogadro como ferramenta didática, capaz de favorecer a visualização molecular, a interdisciplinaridade entre Física e Química.

REFERENCIAL TEÓRICO

O Trabalho de modelagem molecular tem como ideia abordar o conceito de interdisciplinaridade que pode ser compreendido como um processo de interação mútua entre variadas disciplinas (Matsuo *et al.,* 2024 apud Japiassu, 1976).

No contexto educacional, a interdisciplinaridade é definida como um conjunto de práticas curriculares, didáticas e pedagógicas (Fazenda, 2008). Nesse sentido, programas que objetificam construir um conhecimento interligado em diversas áreas são reconhecidos e recebem alicerce das Diretrizes Curriculares Nacionais da Educação Básica (DCNEB) e a Base Nacional Comum Curricular (BNCC) (Matsuo *et al*., 2024).

Entretanto, apesar deste apoio por parte dos programas educacionais brasileiros, a implantação efetiva da interdisciplinaridade nas escolas, principalmente quando nos referimos ao ensino público brasileiro, não ocorre de maneira homogênea e enfrenta desafios significativos para sua construção. Esses obstáculos se perpetuam, pois para a integração curricular da prática interdisciplinar se faz necessário a "presença efetiva de um projeto educacional centrado numa intencionalidade definida com base nos objetivos a serem alcançados pelos sujeitos educandos" (Fazenda, 2008, p. 40).

Esses entraves para processo de integração curricular multidisciplinar refletem sobretudo para o campo das Ciências da Natureza, que considerando a sua organização acadêmica, apresenta desafios pautados pela integração de diferentes subáreas que compõem este campo científico: Física, Química, Biologia, Geociências e Astronomia (Matsuo *et al*., 2024 apud Brasil, 1998). Para Araújo 2024, o ensino das Ciências da

ISSN: 2358-8829

Natureza limita-se ao uso de livros didáticos e aulas expositivas, apresentam escassez de recursos auxiliares de apoio pedagógico e de metodologias capazes de explorar outros mecanismos de ensino. Esse caráter abstrato contribui para um estigma por parte dos alunos para compreensão desses conceitos que os classificam como tediosos e de difícil compreensão.

Diante disso, diversos educadores têm buscado metodologias menos centradas na teoria e mais contextualizadas, que permitam uma interação entre as ciências experimentais e que facilitem a visualização desses conteúdos. Sendo assim, um recurso em ascensão que se mostra como meio estratégico para avanço educacional e de grande atratividade aos jovens, refere-se ao uso das Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs) como ferramenta para o processo de construção de conhecimentos nessas áreas.

Como exemplos dessas ferramenta, podemos citar os Softwares Educacionais (SE), recursos digitais de caráter didático capazes de auxiliarem no processo de aprendizado e na construção de um conhecimento formativo com ou sem a mediação de um professor (Batista *et al.*, 2018, apud Jucá 2006). Entre os diversos softwares educacionais disponíveis, destaca-se o Avogadro, uma ferramenta educativa gratuita de código aberto, que permite aos usuários visualizar, construir e editar estruturas moleculares no espaço tridimensional. Entre suas funcionalidades, podemos citar seu manuseio para a compreensão de conceitos como: geometria molecular, comprimentos de ligação e ângulos, hibridações e cálculos de energia.

Ciente da capacidade de visualização do Avogadro, este programa torna-se ideal para o ensino-aprendizagem de conceitos microscópicos, subatômicos presentes na Química, em especial a Química orgânica e inorgânica que estuda a posição de átomos e sua formas de ligação. Desse modo, desenvolvemos a molécula Teobromina no Avogadro 2.0, a fim de verificar o seu uso como ferramenta pedagógica para a representação de estruturas moleculares e a sua abordagem como recurso interdisciplinar entre a Física e a Química, uma vez que é por meio dos cálculos analíticos representados por vetores físicos que encontramos uma forma precisa de escrever a localização de uma molécula química no espaço tridimensional.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

ISSN: 2358-8829

A análise dos comprimentos e ângulos de ligação obtidos a partir das coordenadas fornecidas pelo Avogadro 2.0, mostrou diferenças entre as geometrias otimizadas pelos três campos de força, conforme apresentado nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 01: Comparação dos comprimentos de ligação (Å) da teobromina obtidos por campos de força e dados do PubChem. Fonte: Elaboração própria.

ID	LIGAÇÃO	MMFF94	GAFF	UFF	PUBCHEM
1	C-C	1,4219 Å	1,4764 Å	1,3942 Å	1,427 Å
4	C-N	1,3767 Å	1,3487 Å	1,3764 Å	1,403 Å
7	C-O	1,2260 Å	1,2149 Å	1,2177 Å	1,227 Å
8	C-N	1,3804 Å	1,3506 Å	1,3834 Å	1,415 Å
11	C-N	1,3901 Å	1,3609 Å	1,3877 Å	1,418 Å

Tabela 02: Comparação dos ângulos de ligação da teobromina obtidos por campos de força e dados do PubChem. Fonte: Elaboração própria.

ID	ÂNGULO	MMFF94	GAFF	UFF	PUBCHEM
1	C-C-N	112,62°	113,39°	117,86°	111,110°
3	N-C-O	121,85°	120,69°	120,19°	123,475°
14	N-C-N	117,26°	116,28°	120,38°	115,731°

Os valores de referências utilizados para comparar os cálculos analíticos realizados a partir das coordenadas fornecidas pelo Software Avogadro foram extraídos da estrutura molecular da teobromina otimizada presente no PubChem. Ao analisar a tabela, percebe-se pequenas variações entre as medidas realizadas pelos diferentes campos de forças.

A existência de variações entre os resultados encontrados para os três campos de força e aqueles descritos na literatura ocorrem, pois, conforme mencionado, cada campo de força possui parametrizações e aproximações próprias para a otimização e descrição de coordenadas moleculares (Lewis-Atwell; Townsend; Grayson, 2021). Além disso, nem todas as moléculas são igualmente bem representadas por todos os campos de força.

No caso da teobromina, por se tratar de composto orgânico heterocíclico

ISSN: 2358-8829

(Monteiro et al., 2016) sua modelagem pode apresentar limitações em determinados campos de força. Nesse sentido, o campo de força GAFF (Campo de Força Amber Geral), é um modelo amplamente utilizado para a otimização de moléculas orgânicas pequenas, não apresentou uma estrutura tridimensional totalmente compatível com aquela disponível no Pubchem para a teobromina. Do mesmo modo, os seus resultados também conferiram variações em relação ao valores literários, possivelmente devido às particularidades estruturais da molécula.

O campo de força UFF (Campo de Força Universal), por sua vez, foi desenvolvido com o objetivo de reproduzir um conjunto de regras e procedimentos estruturais de toda tabela periódica. Devido a essa característica mais generalista, pode ser utilizado para otimização geométrica de uma ampla variedade de elementos químicos. No entanto, apresenta melhor desempenho para materiais inorgânicos e organometálicos, o que explica os maiores desvios observados nos resultados para a teobromina que é um composto orgânico. (Rappé et al., 1992).

O MMFF94, por se tratar de um campo especificamente parametrizado para a modelagem molecular de compostos orgânicos, apresentou melhor concordância com os valores de referência. Entretanto, esses resultados se restringem aos comprimentos e ângulos selecionados e não permitem estabelecer uma superioridade geral desse campo de força para outras moléculas. Para um maior aprofundamento, são recomendados cálculos de mecânica quântica molecular e comparação com valores obtidos na literatura

De modo geral, considerando a média dos erros percentuais absolutos para os ângulos calculados, obtêm-se aproximadamente 1,33% para MMFF94, 1,59% para GAFF e 4,25% para UFF, enquanto que, para as ligações, encontra-se aproximadamente um desvio de 1,345%, 3,379% e 1,864%, respectivamente. As diferenças observadas evidenciam a importância da escolha do campo de força na otimização geométrica e na análise estrutural da teobromina.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Conclui-se que a escolha do campo de força influencia os parâmetros geométricos obtidos para a teobromina. Para o conjunto analisado, o MMFF94 apresentou maior concordância com os valores de referência, evidenciando que diferentes parametrizações podem produzir pequenas variações na geometria molecular

otimizada. Quanto ao uso do software educacional Avogadro para a representação estrutural da teobromina, os resultados indicam que o software apresenta potencial como ferramenta didática para a representação de estruturas moleculares e para a integração de conceitos de Física e Química

Por meio da otimização molecular da teobromina, foi possível construir, ampliar e editar conceitos microscópicos considerados abstratos: geometria molecular, comprimentos de ligação e ângulos, hibridações e cálculos de energia. A partir disso, conseguimos representar por vetores físicos a localização da teobromina no espaço tridimensional e estudar suas propriedades estruturais.

Embora os dados sejam preliminares, este estudo serve como motivação para a implantação de metodologias dinâmicas, como o uso de softwares de modelagem molecular, para a representação de conceitos abstratos presentes no ensino das ciências exatas, e como recurso capaz de superar as barreiras entre o real e o conceitual.

Palavras-chave: Ensino de Física; Vetores, Mecânica Molecular, Teobromina, Interdisciplinaridade.

REFERÊNCIAS

ARAÚJO, M. R. dos S. de. **análise de metodologias ativas nas práticas de ensino/aprendizagem de ciências: abordagem teórica**. revista foco, *[S. l.]*, v. 17, n. 6, p. e5414 , 2024. DOI: 10.54751/revistafoco.v17n6-088. Disponível em: https://ojs.focopublicacoes.com.br/foco/article/view/5414. Acesso em: 10 ago. 2026.

BARBOSA, Lucas Herman Firmino. **O uso de animações em graphics interchange format (GIF) no processo de ensino-aprendizagem do conteúdo modelos atômicos na educação de Jovens e Adultos**. 2023. 43 f. TCC (Graduação) - Curso de Licenciatura em Química, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará - Campus Aracati, Aracati-CE, 2023. Disponível em: https://gestaoaracati.ifce.edu.br/attachments/download/2482/tcc.pdf. Acesso em: 18 abr. 2026.

BATISTA, G. da C.; MARINHO, E. M.; MARINHO, M. M.; MARINHO, E. S. **Avogadro no ensino de química: um avançado editor molecular de visualização de um grande potencial pedagógico**. **Redin - Revista Educacional Interdisciplinar**, *[S. l.]*, v. 7, n. 1, 2018. Disponível em: https://seer.faccat.br/index.php/redin/article/view/1076. Acesso em: 28 out. 2026.

CENTRO NACIONAL DE INFORMAÇÃO EM BIOTECNOLOGIA. **Resumo do Composto PubChem para CID 5429, Teobromina**. Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Theobromine.. Acesso em: 28 ago. 2026.

FAZENDA, Ivani (org.). **Didática e Interdisciplinaridade**. 13. ed. Campinas: Papirus, 2008. Disponível em: https://educfacil.wordpress.com/wp-content/uploads/2012/11/ivani-fazenda-didc3a1tica-e-interdisciplinaridade.pdf. Acesso em: 28 out. 2026.

JUCÁ, Sandro César Silveira;. **A Relevância dos Softwares Educativos na educação profissional.** Ciência e Cognição, [*s. l*], v. 08, n. 0, p. 22-28, dez. 2006. Disponível em: https://www.revista.cienciasecognicao.org/. Acesso em: 28 ago. 2026.

LEWIS-ATWELL; TOWNSEND, Piers A.; GRAYSON, Matthew N.. **Comparações de diferentes campos de força em análise conformacional e busca de moléculas orgânicas: Uma revisão.** Elsevier, Tetrahedron, v. 79, n. 131865, p. 2-11, jan. 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131865. Acesso em: 28 out. 2026.

MATSUO, Patricia Mie; CHIOSINI, Enrico; ZAMBRANO-GONZÁLEZ, Néstor Alexander; NASSAR, Taynara; GHURON, Erick; OLIVEIRA, Elrismar Auxiliadora Gomes; LEITE, Cristina. **Mapeamento de Diálogos Interdisciplinares em Práticas para o Ensino de Ciências da Natureza na Educação Básica**. **Abakós**, Belo Horizonte, v. 12, n. 2, p. e2024120204, 2024. DOI: 10.5752/P.2316-9451.e2024120204. Disponível em: https://periodicos.pucminas.br/abakos/article/view/33337. Acesso em: 10 ago. 2026.

MONTEIRO, João P. *et al*. **Relações Estrutura-Bioatividade das Metilxantinas: Tentando Compreender Todas as Promessas e Desvantagens.** Molecules, [*s. l*], v. 21, n. 8, p. 1-32, jul. 2016. Disponível em: https://doi.org/10.3390/molecules21080974. Acesso em: 28 ago. 2026.

RAPPE, A. K.; CASEWIT, C. J.; COLWELL, K. S.; GODDARD, W. A.; SKIFF, W. M.. **UFF, um campo de forças completo da tabela periódica para simulações de mecânica molecular e dinâmica molecular**. Revista da Sociedade Americana de Química, [S.I.], v. 114, n. 25, p. 10024-10035, dez. 1992. Disponível em: https://doi.org/10.1021/ja00051a040. Acesso em: 28 ago. 2026.