ISSN: 2358-8829

MODELAGEM MOLECULAR: UMA PODEROSA FERRAMENTA NO ENSINO DE QUÍMICA E FÍSICA

Davi Felizardo Vieira [1]
Francisca Débora Morais de Carvalho [2]
Jonathan Alves Rebouças [3]

INTRODUÇÃO

A formação inicial de professores de Ciências da Natureza, especificamente nos cursos de Licenciatura em Química, apresenta historicamente programas de graduação marcados por elevadas taxas de reprovação, evasão escolar, desmotivação dos discente e baixa interdisciplinaridade entre as disciplinas ofertadas (Schnetzler, 2002; Freeman et al., 2014). Superar essas barreiras exige o planejamento de estratégias de ensino intencionais que promovam

Em particular, o curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – Campus Iguatu, apresenta essas mesmas dificuldades em relação a disciplina de Física Geral II, sendo inserida no segundo ano da matriz curricular do curso. Essa disciplina demanda de uma sólida base em conceitos matemáticos que boa parte do corpo estudantil apresenta uma grande dificuldade em compreender, além disso, a transição cognitiva entre os conteúdos presentes na mecânica clássica e os conteúdos presentes no eletromagnetismo e física moderna apresentam um aprofundamento dos problemas identificados previamente, pois os fenômenos descritos por essas teorias se tornam ainda mais abstratos e dependentes de formulações matemáticas que dificultam o processo de aprendizagem dos alunos (Gilbert, 2006).

No contexto do curso de Licenciatura em Química, uma das abordagens mais utilizadas para tornar esses fenômenos mais concretos e observáveis são a realização de experimentos em laboratórios envolvendo os conteúdos trabalhados na sala de aula. Entretanto, muitos cursos de Licenciatura em Química não possuem os equipamentos necessários para realizar experimentos

[1] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, davi.felizardo08@aluno.ifce.edu.br;
[2] Graduanda do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, francisca.debora07@aluno.ifce.edu.br;
[3] Professor orientador: Doutor em Física, professor do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, jalvesreboucas@ifce.edu.br.

ISSN: 2358-8829

envolvendo os conteúdos trabalhados fazendo com que a abordagem pedagógica utilizada nessas disciplinas tem sido orientada por um ensino predominantemente expositivo, centrado na reprodução mecânica de fórmulas matemáticas e deduções analíticas descontextualizadas de sistemas microscópicos reais (Prince, 2004; Maldaner, 2000).

Esse modelo pedagógico tradicional gera uma defasagem pedagógica para o futuro professor de química, em que ele frequentemente percebe os conceitos da física como barreiras punitivas em vez de instrumentos teóricos necessários para a compreensão dos fenômenos químicos fundamentais como ligações químicas, estabilidade conformacional de moléculas, forças intermoleculares, espectroscopia, dentre outros (Esselman; Hill, 2016).

Nesse contexto as Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs), especialmente os programas de química computacional e modelagem molecular, como o ORCA ou Avogrado, emergem como poderosas ferramentas pedagógicas, permitindo a conversão de uma abordagem centrada em formulações teóricas e abstratas para uma abordagem mais concreta, dinâmica e interativa através do uso de modelos digitai durante o processo de ensino (Snyder; Kucukkal, 2021; Santos, 2001).

Portanto, esta pesquisa tem como objetivo analisar o trabalho desenvolvido no âmbito da disciplina de Física Geral II do curso de Licenciatura em Química do IFCE – Campus Iguatu, na qual o professor fez uso da metodologia de Aprendizagem Baseada em Projetos (ABP), para potencializar a aquisição de conhecimentos e competências dos alunos por meio de um processo de investigação de questões complexas e produção um trabalho científico ao final da disciplina.

Nesse trabalho cada aluno da turma ficou responsável por realizar uma análise conformacional de determinadas moléculas orgânicas utilizando os softwares de modelagem molecular ORCA e Avogadro. O trabalho teve como objetivo encontrar as conformações mais estáveis, os valores de HOMO-LUMO e as frequências vibracionais de suas respectivas moléculas. Comparando os valores obtidos através da manipulação manual dos eixos de rotação escolhidos com os valores fornecidos, estocasticamente, pelo Algoritmo de Optimização Global (GOAT) do pacote quântico do ORCA.

Os resultados revelam que a experimentação computacional interativa possibilitou uma compreensão mais holística dos conteúdos de geometria molecular, análise conformacional e estrutura eletrônica de moléculas orgânicas ao relacioná-los com os conteúdos de eletromagnetismo e mecânica quântica, proporcionado assim, uma abordagem interdisciplinar que une a Química à Física. Além disso, a estruturação por ABP promoveu uma maior autonomia investigativa, cooperação e letramento científico entre os alunos da turma

ISSN: 2358-8829

culminando na produção de relatórios científicos de alto rigor reflexivo, fortalecendo a formação acadêmica do discente, assim como, a sua formação como pesquisador.

REFERENCIAL TEÓRICO

A modelagem molecular abrange um conjunto diversificado de técnicas teóricas e computacionais fundamentadas nas leis da física clássica e quântica, cujo propósito central é prever, descrever e interpretar o comportamento, a geometria e as propriedades energéticas de sistemas atômico-moleculares (Santos, 2001; Sant'Anna, 2002). Durante décadas, o acesso a essas ferramentas permaneceram restritas a laboratórios de pesquisa de ponta, demandando estações de trabalho de altíssimo custo e licenças de software proprietárias financeiramente inviáveis para os cursos de graduação de universidades e institutos federais periféricos (Esselman; Hill, 2016).

Contudo, nos últimos vinte anos veem se testemunhando uma verdadeira revolução nesse setor, causado pelo amadurecimento de ferramentas abertas e gratuitas para o público geral. Essas ferramentas apresentam alta eficiência e permitem a transposição das simulações computacionais dos centros de pesquisa de ponta diretamente para os computadores pessoais dos estudantes (Snyder; Kucukkal, 2021). No epicentro dessa transformação encontram-se dois softwares de modelagem molecular: *Avogadro e ORCA*.

O Avogadro foi desenvolvido por Hanwell et al. (2012) e atua como uma plataforma de código aberto (GPL), apresentando uma interface gráfica intuitiva que permite aos estudantes desenhar estruturas químicas em 3D, parametrizar coordenadas atômicas com facilidade, realizar pré-otimizações rápidas de geometria via campos de força de Mecânica Molecular, como UFF - Universal Force Field e MMFF94. Além disso, o Avogadro funciona como o gerador de arquivos de entrada e leitor de superfícies de orbitais para softwares quânticos avançados como o ORCA.

O Motor Computacional Quântico de Alta Precisão (ORCA) foi desenvolvido pelo grupo do Prof. Dr. Frank Neese no Instituto Max Planck, sendo amplamente reconhecido como um dos mais avançados, robustos e versáteis programas de estrutura eletrônica ab initio e Teoria do Funcional da Densidade (DFT) do mundo (Neese, 2022). O programa é disponibilizado gratuitamente para a comunidade acadêmica global, oferecendo desde métodos semi-empíricos ultrarrápidos até métodos de pós-Hartree-Fock de altíssima precisão e funcionais de densidade com correções de dispersão de última geração.

ISSN: 2358-8829

O uso desses softwares em conjunto permite aos estudantes explorar conteúdos e problemáticas que são altamente relevantes para a pesquisa científica contemporânea, permitindo aos alunos do curso de licenciatura a fortalecer o seu letramento científico e serem introduzidos a ferramentas e metodologias que podem ser relevantes para a sua futura formação acadêmica. Ademais, essas ferramentas também podem ser utilizadas para contextualizar o ensino das disciplinas de Física nos cursos Licenciatura em Química ao promover uma abordagem interdisciplinar e contextualizada dos conteúdos visto em sala de aula (Nogueira; Marques; Bordin, 2024; Sá; Nascimento; Lima, 2020).

Essa vivência proporcionou aos futuros docentes uma experiência profissional inestimável sobre a natureza da pesquisa científica, ao desafiar a noção de que a ciência é apenas um conjunto de verdades estáticas e dogmáticas oriunda de materiais didáticos, passando assim, a vivenciá-la como um processo dinâmico de modelagem, teste de hipóteses, falsificação e refinamento conceitual aos moldes do "professor-pesquisador" propostos por Maldaner (2000).

Por essa razão, a intervenção didática desenvolvida na disciplina de Física Geral II foi integralmente estruturada sob a égide da Aprendizagem Baseada em Projetos (ABP). A ABP é uma metodologia ativa construtivista que organiza o percurso de ensino-aprendizagem em torno de um processo contínuo de investigação focado em questões autênticas, complexas e desafiadoras, culminando na elaboração coletiva de um produto final concreto e compartilhado (Bender, 2014; Costa et al., 2026).

Ao transformar o aluno da Licenciatura em um investigador ativo que lida diretamente com ferramentas científicas de pesquisa real, a ABP promove não apenas o domínio conceitual da física molecular, mas consolida competências socioemocionais indispensáveis para a futura regência docente, tais como o pensamento crítico, a comunicação científica rigorosa e a capacidade de resolução de problemas complexos (Prince, 2004; Bender, 2014).

METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)

A presente pesquisa configura-se metodologicamente como um estudo de caso qualitativo e investigativo de natureza descritivo-exploratória (Gil, 2017), voltado à avaliação de uma intervenção pedagógica realizada na disciplina de Física Geral II, integrante da matriz curricular obrigatória do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – Campus Iguatu.

A turma foi composta por cinco discentes, incluindo os autores, matriculados no 4º semestre do período letivo correspondente ao período de 2025.2, orientados pelo docente

ISSN: 2358-8829

responsável pela disciplina e articulado em conjunto com os autores deste trabalho. O projeto desenvolvido buscou aprofundar o processo de ensino e aprendizagem de Química e Física dos alunos dessa turma através do uso da modelagem molecular como ferramenta de intervenção pedagógica.

A intervenção didática foi planejada para abordar os conteúdos de fenômenos ondulatórios, mecânica quântica introdutória, geometria molecular, análise conformacional e estrutura eletrônica de moléculas orgânicas. Sendo executado ao longo de quatro etapas consecutivas e articuladas, respeitando os preceitos de centralidade, questão motriz, investigação construtiva, autonomia do discente e produção autêntica da ABP, estabelecidos por Bender (2014). As quatro etapas foram designadas como: *Etapa 1* - Imersão Teórica e Problematização Inicial; *Etapa 2* - Construção Estrutural e Manipulação Manual no Avogadro; *Etapa 3* - Simulação Quântica e Otimização Global via ORCA; *Etapa 4* - Síntese Crítica, Confronto de Dados e Produção do Relatório Final.

Na 1ª Etapa, foi realizado uma breve revisão dos conceitos de forças intermoleculares, ligações químicas covalentes, rotações em torno de eixos σ e apresentação da questão-motriz do projeto. Cada estudante recebeu uma molécula orgânica modelo dotada de centros rotacionais flexíveis (compostos apresentando grupos alifáticos, heteroátomos e potenciais impedimentos estéricos e dipolares).

Na 2ª Etapa, os discentes construíram as moléculas no ambiente tridimensional do Avogadro, limparam as tensões iniciais por meio de campos de força de mecânica molecular para encontrar as conformações mais estáveis e selecionou dois eixos de rotação chamados de R1 e R2. Por meio da ferramenta de manipulação de ângulos diedros (Bond Torsion Tool), cada aluno girou manualmente os eixos selecionados em passos angulares predefinidos de 20 º.

Na 3ª Etapa, os alunos converteram as estruturas para arquivos de entrada do ORCA, configurando rotinas de cálculo de energia para o eixo definido como R1, baseado no gráfico conformacional de energia dessa molécula foi selecionado os ângulos que apresentaram os mínimos de energia para este eixo, em seguida, utilizando os mínimos de energia fornecidos pelo R1 foi realizada uma nova rodada de cálculos de energia utilizando o eixo R2. O mínimo global de energia encontrado foi submetido a um cálculo pontual de estrutura eletrônica para extrair as energias dos orbitais moleculares HOMO e LUMO, bem como gerou-se arquivos para visualização tridimensional das nuvens de probabilidade eletrônica no Avogadro e se obteve as frequências vibracionais dessa molécula.

Na 4ª Etapa cada estudante comparou quantitativamente os valores numéricos de diedros, valores de HOMO e LUMO, energias relativas (ΔE) e frequências vibracionais obtidos

ISSN: 2358-8829

pelo método manual versus os dados fornecidos pelo GOAT. O projeto culminou na redação individual/em grupo de um relatório científico completo, comparando os dados obtidos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A primeira fase da intervenção pedagógica funcionou como uma aula tradicional onde foi introduzido os principais conceitos necessários para compreender a relação entre os conteúdos presentas na disciplina de Física II e as simulações fornecidas pelo ORCA. Além disso, esta aula também funcionou como introdução a funcionalidade, manuseio e utilidade científica do software.

Já na segunda fase da intervenção ao construir as moléculas no Avogadro e girá-las no espaço tridimensional com iluminação volumétrica e modelos de preenchimento espacial de Van der Waals, os alunos puderam constatar sensorialmente o volume efetivo ocupado pela nuvem eletrônica de cada átomo (Ferreira; Arroio; Resende, 2011).

A manipulação manual do ângulo diedro ɵ para os eixos de rotação R1 e R2, permitiu que os estudantes acompanhassem a aproximação crítica entre centros atômicos não ligados, observando o aumento expressivo da repulsão de Coulomb e o impedimento estérico nos pontos em que os átomos eram forçados a uma conformação eclipsada e o abaixamento dessas tensões estéricas e torcionais a partir do estabelecimento de uma conformação eclipsada. Simulando assim, as pequenas atrações eletrostáticas intramoleculares que induzem ligeiras torções angulares na estrutura para maximizar a estabilização global do sistema (Grimme, 2019; Pracht; Bohle; Grimme, 2020).

Esse resultado corrobora diretamente os achados de Wu e Shah (2004) e Kozma e Russell (1997), evidenciando que uso de modelos 3Ds interativos alivia o trabalho necessário para o estudante desenvolver as competências necessárias para o aprendizado e internalização de conceitos complexos.

Durante a terceira fase os alunos realizaram os cálculos e mapeamento dos orbitais moleculares que envolvem as suas moléculas de interesse, assim como os valores de energia, frequência e transição HOMO-LUMO de cada molécula. Permitindo a identificação do cônformero mais estável que possuí a menor energia de transição HOMO-LUMO e necessariamente é o formato menos reativo daquela molécula orgânica (Endeshaw *et al*., 2024; Mariano *et al.*, 2008).

ISSN: 2358-8829

Esta fase também englobou a organização dos dados obtidos pelos softwares ORCA e Avogadro, a montagem de gráficos e tabelas que sintetizem os dados encontrados e a realização de um levantamento bibliográfico que tem como objetivo explicar o comportamento observado das moléculas durante o processo de optimização da geometria molecular e variação do ângulo diedro dos eixos R1 e R2, contribuindo assim para o processo de letramento científico dos alunos da disciplina.

Visto que em uma meta-análise conduzida por Freeman et al. (2014) que catalogou mais de 225 estudos pedagógicos em contexto de ensino superior voltados a cursos de Ciências, Tecnologia, Engenharia e Matemática (STEM). É concluído que a implementação de metodologias ativas eleva em média o desempenho avaliativo dos discentes em 6% e reduze a taxa de reprovação em até 36% em comparação ao ensino puramente tradicional.

Por fim, durante a última fase da ABP foi realizado a escrita dos relatórios científicos onde cada aluno ficou responsável por produzir a síntese das atividades que foram realizadas ao longo da disciplina. O uso da ABP como uma atividade de intervenção na disciplina de Física II permitiu descentralizar a figura do professor do centro da sala de aula e introduziu os alunos da disciplina os comportamentos e atitudes necessários para realizar a verdadeira de prática científica (Bender, 2014). Uma vez que os estudantes foram capazes de enfrentar e superar desafios que são comuns à iniciação científica como falhas no percurso metodológica, dificuldades em encontrar fontes relevantes para o trabalho, dificuldades em ajustar aos padrões da leitura e escrita acadêmica, dentro outros.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A presente pesquisa demonstrou que a metodologia de Aprendizagem Baseada em Projetos (ABP), é uma importante ferramenta pedagógica que pode potencializar o processo de ensino e aprendizagem especialmente de cursos de STEM, portanto, o uso dessa metodologia na disciplina de Física Geral II do curso de Licenciatura em Química do IFCE – Campus Iguatu por meio de um processo de investigação e produção de trabalhos científicos ao longo da disciplina.

Além disso este trabalho também argumenta que a modelagem molecular não apenas permita realizar uma ponte interdisciplina entre áreas da física e da química no ensino superior, como também capacitam os futuros docentes com poderosas ferramentas conceituais e tecnológicas que promovem um ensino de ciências crítico, visual, investigativo e profundamente alinhado aos desafios do século XXI.

Em suma através do diálogo entre as diferentes análises teóricas desenvolvidas ao longo deste estudo, constatou-se que a mediação pedagógica por meio de TICs cumpre um papel formativo fundamental quando articulados a uma organização intencional do ensino, superando assim, o caráter meramente reprodutivo da sala de aula ao estimular o pensamento crítico e científico dos alunos.

Palavras-chave: Ensino de Química, Ensino de Física, Química Computacional, Modelagem Molecular, Metodologias Ativas.

REFERÊNCIAS

BENDER, W. N. **Aprendizagem baseada em projetos: educação diferenciada para o século XXI**. Porto Alegre: Penso, 2014.

COSTA, I. G.; *et al*. De vala a córrego: Transformando a percepção ambiental através da aprendizagem baseada em projeto no ensino de Química. **Química Nova na Escola**, São Paulo, v. 48, n. 1, p. 74-86, 2026.

ENDESHAW, H.; *et al*. Multicolor 3D-Printed Molecular Orbital Models for a First-Semester Organic Chemistry Course. **Journal of Chemical Education**, Easton, v. 101, n. 12, p. 5420-5428, 2024. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.4c00945.

ESSELMAN, B. J.; HILL, N. J. Integration of Computational Chemistry into the Undergraduate Organic Chemistry Laboratory Curriculum. **Journal of Chemical Education**, Easton, v. 93, n. 5, p. 932-936, 2016. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.5b00815.

FERREIRA, C.; ARROIO, A.; REZENDE, D. de B. Uso de modelagem molecular no estudo dos conceitos de nucleofilicidade e basicidade. **Química Nova**, São Paulo, v. 34, n. 9, p. 1661-1665, 2011. DOI: https://doi.org/10.1590/S0100-40422011000900030.

FREEMAN, S.; *et al*. Active learning increases student performance in science, engineering, and mathematics. **Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)**, Washington, v. 111, n. 23, p. 8410-8415, 2014. DOI: https://doi.org/10.1073/pnas.1319030111.

GILBERT, J. K. **Visualization in Science Education**. Dordrecht: Springer Science & Business Media, 2006.

GRIMME, S. Exploration of chemical compound, conformer, and reaction space with meta-dynamics simulations based on tight-binding quantum chemical methods. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Cambridge, v. 21, n. 34, p. 18811-18830, 2019. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00143.

HANWELL, M. D.; *et al*. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. **Journal of Cheminformatics**, London, v. 4, n. 1, p. 17, 2012. DOI: https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17.

KOZMA, R. B.; RUSSELL, J. Multimedia and understanding: Expert and novice responses to different representations of chemical phenomena. **Journal of Research in Science Teaching**, Hoboken, v. 34, n. 9, p. 949-968, 1997.

MARIANO, A.; *et al*. O ensino de reações orgânicas usando química computacional: I. reações de adição eletrofílica a alquenos. **Química Nova**, São Paulo, v. 31, n. 5, p. 1243-1249, 2008. DOI: https://doi.org/10.1590/S0100-40422008000500049.

NEESE, Frank. Software update: The ORCA program system—Version 5.0. **WIREs Computational Molecular Science**, Hoboken, v. 12, n. 5, e1606, 2022. DOI: https://doi.org/10.1002/wcms.1606.

NOGUEIRA, T. P. O.; MARQUES, M. S.; BORDIN, J. R. O pacote LAMMPS como uma ferramenta para o ensino de transição de fases. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, São Paulo, v. 46, e20230336, 2024. DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2023-0336.

PRACHT, P.; BOHLE, F.; GRIMME, S. Automated calculation of absolute free energies and conformational ensembles of flexible molecules with the crest program. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Cambridge, v. 22, n. 9, p. 5169-5181, 2020. DOI: https://doi.org/10.1039/c9cp06869d.

PRINCE, M. Does active learning work? A review of the research. **Journal of Engineering Education**, Washington, v. 93, n. 3, p. 223-231, 2004. DOI: https://doi.org/10.1002/j.2168-9830.2004.tb00809.x.

SÁ, É. R. A. de; NASCIMENTO, L. A. do; LIMA, ALVES F. das C. Termodinâmica: Uma Proposta de Ensino a Partir da Química Computacional. **Revista Virtual de Química**, Niterói, v. 12, n. 3, p. 674-686, 2020. DOI: https://doi.org/10.18227/rct.v7i0.6786.

SANT'ANNA, C. M. R. Glossário de termos usados no planejamento de fármacos baseados na estrutura do receptor (recomendações da IUPAC 1997). **Química Nova**, São Paulo, v. 25, n. 3, p. 505-512, 2002. DOI: https://doi.org/10.1590/S0100-40422002000300027.

SANTOS, H. F. dos. O conceito da modelagem molecular. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, São Paulo, n. 4, p. 4-5, maio 2001.

SNYDER, H. D.; KUCUKKAL, Tugba G. Computational Chemistry Activities with Avogadro and ORCA. **Journal of Chemical Education**, Easton, v. 98, n. 4, p. 1335-1341, 2021. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00959.