ISSN: 2358-8829

# PRÁTICA EXPERIMENTAL: FERRAMENTAS DE MODELAGEM MOLECULAR NO ENSINO DA QUÍMICA E FÍSICA

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

## INTRODUÇÃO

O ensino de ciências tem como obstáculo a grande abstração dos conteúdos teóricos ensinados. No ensino de química, tal realidade se mostra ainda mais acentuada devido a necessidade de uma boa base matemática para uma melhor compreensão do conteúdo. A química é uma ciência interdisciplinar, segundo a perspectiva de Brown et al. (2005) que defende que a química possui vínculos intrínsecos com as demais ciências. Dessa forma, pela necessidade de conhecimentos de diversas áreas faz-se necessário o uso de ferramentas e estratégias que facilitem o processo de assimilação dos conteúdos estudados. Nesse contexto, softwares de simulação molecular como ORCA e Avogadro surgem como ferramentas auxiliares na formação inicial de docentes, mitigando a abstração e ocasionando futuramente um melhor repasse dos conteúdos.

Oliveira, Paschoal e Paschoal (2025) explicam que existem diversos programas de uso livre para manipulação e visualização molecular, capazes de auxiliar a aprendizagem significativa em atividades realizadas em sala de aula. Para os autores, dentre os programas, o Avogadro se destaca pelo grande número de ferramentas para

[1] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, lima.gabriel05@aluno.ifce.edu.br;
[2] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, neves.gabriel61@aluno.ifce.edu.br;
[3] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, ines.almeida11@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.

facilitar a construção de moléculas e sistemas complexos, permitindo a visualização de orbitais atômicos e moleculares, bem como a abordagem de temáticas como geometria molecular, alotropia ou comprimento e ângulo das ligações.

Diante do exposto, o presente trabalho tem como objetivo analisar o modelo digital da antipirina como um recurso didático, utilizando o software Avogadro como ferramenta mediadora. Para isso, a molécula foi construída e otimizada dentro do programa e suas ligações foram calculadas a partir de vetores. Os resultados obtidos foram posteriormente comparados com os dados disponíveis no Pubchem para identificar a proximidade dos resultados obtidos por cálculos manuais com a literatura. O estudo surge a partir de um trabalho solicitado na disciplina de Física 1, no qual os resultados indicam que não houve uma grande variação entre os dados obtidos.

## METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)

No trabalho elaborado na disciplina de Física Geral 1, foram sorteadas moléculas para cada aluno, sendo a Antipirina a molécula central neste presente estudo. Logo quando foi analisada a posição tridimensional dos átomos na molécula é definida por vetores de posição em coordenadas cartesianas $(x, y, z)$ em ângströms (Å):

Átomo 1: $C_1(x_1, y_1, z_1)$

Átomo 2: $C_2(x_2, y_2, z_2)$

Átomo 6: $C_6(x_6, y_6, z_6)$

Átomo 12: $N_{12}(x_{12}, y_{12}, z_{12})$

Para determinar o comprimento das ligações e os ângulos de abertura, são definidos os vetores de ligação $(\vec{L})$ tomando o átomo central $C_2$ como a origem (ponto inicial) em direção aos átomos vizinhos $C_1$, $C_6$ e $N_{12}$ (pontos finais):

ISSN: 2358-8829

$\vec{L}_1 = (X_1\text{-}X_2)i + (Y_1\text{-}Y_2)j + (Z_1\text{-}Z_2)k$

$\vec{L}_2 = (X_6\text{-}X_2)i + (Y_6\text{-}Y_2)j + (Z_6\text{-}Z_2)k$

$\vec{L}_3 = (X_{12}\text{-}X_2)i + (Y_{12}\text{-}Y_2)j + (Z_{12}\text{-}Z_2)k$

O comprimento da ligação corresponde ao módulo do respectivo vetor deslocamento:

$$|\vec{L}_1| = \sqrt{(X1 - X2)^2 + (Y1 - Y2)^2 + (Z1 - Z2)^2}$$

$$|\vec{L}_2| = \sqrt{(X6 - X2)^2 + (Y6 - Y2)^2 + (Z6 - Z2)^2}$$

$$|\vec{L}_3| = \sqrt{(X12 - X2)^2 + (Y12 - Y2)^2 + (Z12 - Z2)^2}$$

Os ângulos de abertura (α) entre as ligações são calculados através da relação do produto escalar:

$$\alpha_{126} = arccos[(\vec{L}_1 \cdot \vec{L}_2)/(|\vec{L}_1|.|\vec{L}_2|)]$$

Em que o produto escalar entre os vetores $\vec{L}_1$ e $\vec{L}_2$ é calculado por:

$$\vec{L}_1 \cdot \vec{L}_2 = (x_1 - x_2)(x_6 - x_2) + (y_1 - y_2)(y_6 - y_2) + (z_1 - z_2)(z_6 - z_2)$$

## REFERENCIAL TEÓRICO

O ensino de ciências, especialmente Química e Física, enfrenta desafios devido à abstração que é exigida do aluno para compreender estruturas tão pequenas quanto o átomo e suas representações vetoriais tridimensionais. Para reduzir essa barreira

ISSN: 2358-8829

cognitiva, por isso o uso de softwares de modelagem molecular surge como ferramenta pedagógica essencial. Segundo Gomes et al. (2023), essa estratégia conecta a teoria à prática permitindo o gerenciamento molecular, viabilizando a transição entre os níveis macro e submicroscópico, assim é estimulado o pensamento crítico e a compreensão científica para absorção do conteúdo.

De Freitas, Kohn e Sangiogo (2022) destacam que a modelagem no ensino de Química abrange uma boa quantidade de abordagem desde a Educação Básica ate o Ensino Superior, não apenas como um recurso ilustrativo, mas como um processo investigativo e reconstrução de saberes para os alunos formularem hipóteses, testar parâmetros e interpretam resultados a partir de ferramentas tecnológicas, A inclusão e a democratização do conhecimento cientifico também são impulsionadas por essas metodologias; como apontam Vidrik et al, (2024), o uso de modelos e representações no ensino de Química Orgânica mostra-se altamente eficaz para promover a aprendizagem inclusiva, inclusive para estudantes com deficiência intelectual, ao transformar conceitos em representações visualmente acessíveis e de maior absorção do abstrato.

No contexto das ferramentas digitais e computacionais, o uso de softwares tem permeado as metodologias de ensino de ciências. Santos (2022) ressalta que a inserção do computador e de softwares educativos em sala de aula funciona como um catalisador metodológico que estimula o interesse dos alunos e dinamiza o processo de ensino-aprendizagem. Em complemento, Betti et al. (2025) e Martins (2025) reforçam que as tecnologias interativas e a modelagem molecular proporcionam suporte direto à compreensão visual e espacial de propriedades geométricas moleculares, auxiliando na superação de dificuldades em tópicos estruturais complexos.

Dentre os softwares disponíveis para modelagem molecular e visualização 3D, o Avogadro destaca-se por sua gama de ferramentas e uma interface intuitiva. Conforme abordado por Oliveira, Paschoal e Paschoal (2025), o Avogadro permite a construção, otimização e manipulação de estruturas moleculares complexas no Ensino Superior, facilitando a compreensão de propriedades físico-químicas, orbitais moleculares, ângulos de ligação e geometria.

A relevância do Avogadro na pedagogia expande-se quando associada ao conceito de Objetos de Aprendizagem (OAs). Aguiar e Flôres (2014) definem os OAs como recursos digitais de aprendizagem caracterizados pela utilização, e flexibilidade temática. Ao usar o modelo digital de uma molécula no software Avogadro, o docente

ISSN: 2358-8829

pode transformá-la em um objeto de aprendizagem interdisciplinar, integrando tópicos de Química Orgânica (como funções orgânicas, hibridização e tautomeria) e de Física Geral (como cálculo vetorial tridimensional, coordenadas cartesianas $X, Y, Z$, produto escalar e normas de vetores).

Para além da simulação da molécula, para validar as estruturas e propriedades moleculares requer a consulta de bancos de dados químicos consolidados e reconhecidos internacionalmente por seu rigor científico. Nesse contexto, plataformas como o PubChem Database e o DrugBank figuram como fontes de referência fundamentais. O PubChem fornece dados bibliográficos, bibliotecas de coordenadas tridimensionais, geometrias de menor energia e propriedades físico-químicas de moléculas como a antipirina ($C_{11}H_{12}N_2O$). Por sua vez, o DrugBank complementa ao detalhar a parte dos farmacológicos, que inclui os dados cristalográficos e propriedades termodinâmicas de fármacos e compostos bioativos. Assim a construção molecular no Avogadro e o confronto com os dados estruturais do PubChem e do DrugBank permite ao estudante mensurar a precisão dos modelos construídos e desenvolver o rigor analítico necessário nesta prática científica.

Apesar de seus benefícios, a implementação de softwares computacionais no ensino enfrenta desafios. Barbosa, Mesquita e Paiva (2025) demonstra que muitos docentes ainda enfrentam lacunas na formação inicial e continuada no que refere-se ao uso seguro de softwares educacionais. Do ponto de vista metodológico e computacional, programas baseados em mecânica molecular utilizam campos de força para a otimização geométrica, os quais se fundamentam em equações clássicas da física (como a teoria VSEPR e potenciais de estiramento/deformação). Como discutido por di Felice et al. (2023) e Lewis-Atwell, Townsend e Grayson (2021), embora a mecânica molecular forneça excelentes aproximações para pequenas estruturas orgânicas, podem ocorrer pequenos desvios em relação a métodos quânticos mais rigorosos ou a dados experimentais de referência dispostos no PubChem e DrugBank. Contudo, no contexto educacional, o Avogadro permanece como uma ferramenta mediadora de grande valor pedagógico para promover a aprendizagem e a interdisciplinaridade entre a Física e a Química.

ISSN: 2358-8829

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

**Tabela 1: Tamanho de ligação (Å) calculados e literatura.**

| ID da Ligação | MMFF94 | GAFF | UFF | Literatura |
|---|---|---|---|---|
| $C_1 - C_2$ | 1,494 | 1,502 | 1,503 | 1,502 |
| $C_2 - C_6$ | 1,337 | 1,353 | 1,369 | 1,352 |
| $C_2 - N_{12}$ | 1,401 | 1,356 | 1,361 | 1,355 |

**Tabela 2: Ângulos de abertura (α, graus) calculados e literatura.**

| ID do Ângulo | MMFF94 | GAFF | UFF | Literatura |
|---|---|---|---|---|
| $C_1 - C_2 - C_6$ | $123,590^{\circ}$ | $127,981^{\circ}$ | $123,443^{\circ}$ | $127,932^{\circ}$ |
| $C_1 - C_2 - N_{12}$ | $123,360^{\circ}$ | $132,276^{\circ}$ | $126,806^{\circ}$ | $132,257^{\circ}$ |
| $C_6 - C_2 - N_{12}$ | $112,935^{\circ}$ | $98,858^{\circ}$ | $109,597^{\circ}$ | $98,594^{\circ}$ |

A análise estrutural da antipirina ($C_{11}H_{12}N_2O$), foi realizada no Avogadro 2 utilizando as otimizações MMFF94, GAFF e UFF. A extração das coordenadas cartesianas $(X, Y, Z)$ permitiu a aplicação vetorial de Física Geral 1.

O GAFF apresentou desvio angular absoluto médio de aproximadamente 0,11° nos três ângulos analisados. As variações nos demais campos ocorrem devido aos algoritmos de minimização de energia, que ajustam tensões de estiramento, repulsão de pares isolados (modelo VSEPR) e hibridação para atingir o estado de menor energia potencial. Com isso foi possível observar que para os demais campos de força não houve uma boa semelhança de acordo com a literatura, significando assim que a molécula em sua forma computacional, foi melhor descrita e parametrizada pelo campo de força GAFF, levando em consideração que as divergências tanto em ligações como nos ângulos são mínimos.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Por fim, concluímos que o Avogadro demonstra ser um software potencial didático para os processos de manipulações vetoriais e de geometrias moleculares, contribuindo para uma melhor visualização de modelos tridimensionais, porém ainda são necessários estudos avaliando os impactos da utilização do programa na prática pedagógica. Apesar de ser uma ferramenta de ensino completo, é necessário que para o pleno aproveitamento da abordagem haja uma formação docente continuada e a inserção da metodologia na formação inicial, bem como um planejamento prévio das atividades realizadas considerando as limitações da utilização. Assim a Antipirina como ferramenta didática demonstrou uma boa versatilidade, permitindo a análise interdisciplinar de diferentes aspectos e áreas.

**Palavras-chave:** Modelagem Molecular; Vetores; Avogadro; Formação Docente.

## REFERÊNCIAS

AGUIAR, Eliane Vigneron Barreto; FLÔRES, Maria Lucia Pozzatti. Objetos de Aprendizagem: conceitos básicos. *In*: TAROUCO, Liane Margarida Rockenbach et al. (org.). **Objetos de Aprendizagem**: teoria e prática. Porto Alegre: Evangraf, 2014. cap. 1, p. 12-28.

BARBOSA, Jakeline S. B.; MESQUITA, Adrielle M. C.; PAIVA, Joseilson A. Utilização de softwares educacionais no ensino de química. *In*: **CONGRESSO BRASILEIRO DE QUÍMICA**, 64., 2025, Belo Horizonte. Anais... Belo Horizonte: Associação Brasileira de Química, 2025.

BETTI, Pedro Malavasi et al. MOLE: Aplicação de Realidade Aumentada em Dispositivos Móveis para Ensino em Química. *In*: **CONGRESSO DE INOVAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO IFSP**, 2025. Anais... 2025.

BROWN, Theodore L.; LEMAY, H. Eugene Jr.; BURSTEN, Bruce E.; BURDGE, Julia R. **Química: a ciência central**. 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

DE FREITAS, Flávia Moura; KOHN, Paola Bork Abib; SANGIOGO, Fábio André. Modelagem no Ensino de Química: alguns fundamentos e abordagens da Educação Básica ao Ensino Superior. **Anais dos Encontros de Debates sobre o Ensino de Química**, n. 41, 2022.

DI FELICE, Rosa et al. A perspective on sustainable computational chemistry software development and integration. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 19, n. 20, p. 7056–7076, 2023.

DRUGBANK ONLINE. **Antipyrine**: DB01435. Disponível em: https://go.drugbank.com/drugs/DB01435. Acesso em: 29 out. 2026.

GOMES, Deyvisson Dayllon Pereira et al. **Modelagem como estratégia pedagógica para o ensino de Química**. 2023.

LEWIS-ATWELL, Toby; TOWNSEND, Piers A.; GRAYSON, Matthew N. Comparisons of different force fields in conformational analysis and searching of organic molecules: a review. **Tetrahedron**, v. 79, art. 131865, 2021.

MARTINS, Vanilson de Sousa. **Utilização de modelagem molecular como ferramenta auxiliadora do ensino de geometria molecular em uma escola de ensino médio de Paulistana-PI**. Monografia (Licenciatura em Química) – Instituto Federal do Piauí, Paulistana, 2025.

OLIVEIRA, Júlio de Paula Campbell; PASCHOAL, Caroline Reis Santiago; PASCHOAL, Diego Fernando da Silva. Metodologias Alternativas no Ensino de Química: O Uso do Software Avogadro para Compreensão de Propriedades Químicas no Ensino Superior. **Revista Virtual de Química**, v. 17, n. 1, p. 106-119, 2025.

PUBCHEM DATABASE. **Antipyrine**: CID 2206. Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2206. Acesso em: 29 out. 2026.

ISSN: 2358-8829

SANTOS, Thaynara de Lima dos. **A utilização de software e/ou aplicativos como ferramenta metodológica no ensino de química**. 2022. Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Estadual da Paraíba, 2022.

VIDRIK, Elisandra Chastel Francischini et al. Utilização de Modelagem no ensino de Química Orgânica para estudantes com deficiência intelectual. **Com a Palavra, o Professor**, v. 9, n. 23, 2024.