ISSN: 2358-8829

DA TEORIA À PRÁTICA COMPUTACIONAL: O ESTUDO DE GEOMETRIA MOLECULAR ATRAVÉS DA MODELAGEM DO PARACETAMOL.

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

RESUMO

A manipulação de programas e softwares de modelagem molecular no estudo de Química é significativa para a superação da abstração teórica, abrindo caminhos para a visualizações tangíveis de conceitos complexos e cientificamente mensuráveis. Este trabalho possui a descrição acadêmica da molécula de paracetamol, trabalhada na disciplina de física Geral I, do curso de Licenciatura em Química, no Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) - Campus Iguatu, sob a orientação docente. O objetivo foi realizar a análise e modelagem da molécula de paracetamol no software Avogadro 2, explorando as potencialidades que o ensino da Química Teórica pode obter. A metodologia consistiu na construção da estrutura molecular por meio de cálculos analíticos e na otimização da geometria, buscando o estado de menor energia do sistema molecular, além da aplicação de campos de forças como MMFF94, GAFF e UFF para obter comprimentos de ligações e ângulos de abertura. Para a validação dos resultados, foram realizadas etapas de mineração de dados fundamentados, em bancos científicos como DrugBank e PubChem, permitindo análises e comparações rigorosas dos cálculos realizados com parâmetros mais próximos das estruturas reais e já documentadas na literatura. Utilizando a óptica da Física Geral, o trabalho realizado explorou a relação entre forças intermoleculares e permitiu visualizar propriedades estruturais importantes, ligando grandezas físicas à estabilidade química. Para a formação docente, essa prática se mostra essencial, pois o futuro professor adquire instrumentos digitais que dinamizam o ensino e promovem a alfabetização científica. Em suma, o estudo reafirmou que a integração de modelagem computacional e cálculos analíticos fortalece a compreensão da Química como uma ciência tecnológica e exata, capacitando o graduando para práticas pedagógicas inovadoras que criam que conecta a teoria da sala de aula à pesquisa contemporânea.

Palavras-chave: Software Avogadro, Molécula de Paracetamol, Modelagem Molecular, Formação Docente, Química Teórica.

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