

A UTILIZAÇÃO DE SOFTWARES DE QUÍMICA COMPUTACIONAL NA SIMULAÇÃO DE ESPECTROS DE CUMARINAS COMO FERRAMENTA AUXILIADORA NO ENSINO DE QUÍMICA ORGÂNICA

Alan S. Benevides¹; Vanderlúcia F. de Paula²; Luís F. S. Aguiar³; Júlia E. B. das Virgens⁴; Erenilson dos S. Moreira⁵.

¹Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

²Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

³Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

⁴Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

⁵Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB)

alanbenevides11@outlook.com

Palavras-Chave: espectroscopia; ensino de química; modelagem.

Introdução

O conhecimento químico, ao longo da história, tem se configurado como um campo em constante construção e transformação, sendo resultado de diferentes abordagens metodológicas e de avanços tecnológicos que ampliam sua aplicabilidade. A cada novo passo da ciência, surgem perspectivas capazes de enriquecer o processo de ensino-aprendizagem, estimulando debates sobre metodologias que podem ser aproveitadas como ferramentas auxiliares na compreensão da Química. No estudo da Química Orgânica, especificamente, o domínio das técnicas espectroscópicas tornou-se imprescindível para a identificação de moléculas, sejam elas obtidas por síntese ou extraídas de fontes naturais. Entre essas técnicas, destacam-se a espectroscopia no Infravermelho (IV), a de Ultravioleta-Visível (UV-Vis) e a Ressonância Magnética Nuclear (RMN), amplamente empregadas e reconhecidas como métodos confiáveis de caracterização estrutural (Silva; Leite, 2021).

Com o avanço da ciência e da tecnologia, a humanidade também passa a contar com recursos computacionais cada vez mais robustos, que ampliam significativamente as possibilidades de investigação e análise de sistemas químicos. A Química Computacional, nesse cenário, surge como uma área de grande relevância, estabelecendo conexões diretas com a Química Orgânica e, consequentemente, com a espectroscopia de compostos orgânicos. Trata-se de um campo que permite compreender, por meio de cálculos e simulações, sistemas complexos e interações moleculares detalhadas, oferecendo respostas que, muitas vezes, não poderiam ser obtidas apenas pela experimentação tradicional. Segundo Lira Junior (2025), a Química Computacional atua em diversas áreas, desde a catálise até a biotecnologia, sendo uma ferramenta essencial para o avanço científico, sobretudo pela possibilidade de realizar estudos confiáveis com diferentes custos computacionais.

Apesar de já estar presente na formação dos estudantes de Química desde os primeiros semestres da graduação, a utilização da Química Computacional ainda é, em muitos casos, subaproveitada. Seu potencial pedagógico poderia ser mais explorado, especialmente pela capacidade de integrar conceitos de áreas distintas, como química, física, matemática e ciência da computação, favorecendo um aprendizado interdisciplinar e aprofundado. Essa integração é particularmente importante quando se considera a dificuldade que muitos estudantes apresentam na compreensão de fenômenos abstratos, problema recorrente no ensino de

Química e que, conforme apontam Ribeiro e Greca (2003), representa um dos principais obstáculos para o avanço conceitual dos discentes.

Ferramentas computacionais como Gaussian, ORCA, Spartan, HyperChem, Avogadro, ChemDraw, GAMESS, entre outras, possibilitam a realização de cálculos avançados e a simulação de espectros de IV, UV-Vis e RMN. Tais softwares oferecem recursos que permitem ao estudante visualizar estruturas moleculares em diferentes dimensões, analisar propriedades eletrônicas e espectroscópicas e, consequentemente, estabelecer conexões mais sólidas entre teoria e prática. Assim, a utilização dessas ferramentas em atividades acadêmicas pode contribuir significativamente para a consolidação do conhecimento, além de despertar maior interesse dos discentes pela pesquisa e pela experimentação em Química Orgânica.

Nesta pesquisa, optou-se por investigar a aplicação da modelagem computacional em compostos orgânicos da classe das cumarinas, mais especificamente das piranocumarinas, a fim de comparar os resultados simulados com dados experimentais disponíveis na literatura. As cumarinas são compostos naturais pertencentes à classe das benzopironas, caracterizadas por um anel benzênico fundido a uma lactona α,β -insaturada. Amplamente distribuídas em plantas e fungos, exercem função de metabólitos secundários e possuem grande importância biológica, sendo associadas a atividades anticoagulantes, antimicrobianas, anti-inflamatórias, antioxidantes e fotossensibilizantes (Dewick, 2009). Essa diversidade de propriedades, somada à versatilidade estrutural, faz das cumarinas um objeto de estudo recorrente tanto em pesquisas aplicadas quanto no ensino de Química Orgânica.

No contexto acadêmico, as cumarinas são frequentemente abordadas em disciplinas optativas, como Química de Produtos Naturais e Síntese Orgânica, que representam momentos cruciais na formação do estudante, pois aliam teoria, prática laboratorial e interpretação espectroscópica. A inserção de ferramentas computacionais nesse processo amplia as possibilidades pedagógicas, permitindo que os alunos compreendam, de maneira mais clara, as propriedades e comportamentos dessas moléculas.

Os resultados desta investigação evidenciam a relevância dessa abordagem. A simulação espectroscópica das piranocumarinas 5-metoxixantiletina e aloxantoxiletina gerou espectros de IV, UV-Vis e RMN que apresentaram significativa concordância com dados experimentais descritos em trabalhos anteriores (Santana, 2012; Ju, 2001; Cazal, 2009; Meliou, 2005). Essa correspondência entre os resultados teóricos e experimentais confirma a confiabilidade da Química Computacional e aponta seu potencial como ferramenta didática e científica.

Ao estabelecer uma ponte entre espectroscopia e modelagem computacional, este trabalho contribui para a valorização de abordagens integradas no ensino e na pesquisa. A adoção dessas ferramentas permite superar barreiras conceituais e possibilita uma formação mais sólida e crítica, capacitando os discentes para compreenderem os desafios contemporâneos da Química e da ciência em geral. Assim, ao mesmo tempo em que promove um avanço no campo acadêmico, essa integração também potencializa o desenvolvimento de metodologias de ensino mais inovadoras e eficazes, em sintonia com as demandas atuais da formação científica.

Material e Métodos

Esta pesquisa adota uma abordagem metodológica predominantemente quantitativa, cujo objetivo principal é a simulação computacional de espectros moleculares e a comparação direta com dados experimentais disponíveis na literatura. A escolha por uma perspectiva quantitativa justifica-se pela análise de propriedades mensuráveis, como comprimentos de onda

de absorção e emissão, energias de transição eletrônica, deslocamentos químicos (δ) em RMN e frequências vibracionais em espectros de infravermelho.

Foram simulados os espectros de Infravermelho (IV), Ultravioleta-Visível (UV-Vis) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de duas cumarinas de interesse farmacológico e estrutural: 5-metoxixantiletina e aloxantoxiletina. A seleção dessas moléculas fundamenta-se em sua relevância como produtos naturais e em sua estrutura conjugada, que favorece a análise espectroscópica. Os cálculos teóricos foram realizados no programa ORCA, um pacote de química computacional baseado em métodos quânticos, especialmente indicado para cálculos de estrutura eletrônica por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e da TD-DFT (Time-Dependent DFT), voltada para simulações eletrônicas. Foram adotados funcionais e conjuntos de base compatíveis com os sistemas moleculares estudados, de modo a equilibrar custo computacional e precisão dos resultados.

A construção das estruturas moleculares, bem como a visualização tridimensional dos orbitais, das propriedades eletrônicas e dos espectros simulados, foi realizada no programa Avogadro, uma plataforma gráfica de código aberto. Essa ferramenta possibilitou a inspeção interativa dos resultados teóricos e a exportação dos dados espectroscópicos em diferentes formatos visuais.

Embora a análise seja essencialmente quantitativa, a pesquisa também incorpora uma discussão qualitativa e interpretativa dos espectros simulados, indispensável para a atribuição das bandas de absorção eletrônica (UV-Vis), das frequências vibracionais características (IV) e dos sinais de deslocamento químico (RMN). Esse procedimento possibilita uma correlação crítica entre os dados teóricos e os experimentais, aprofundando a compreensão dos fenômenos moleculares envolvidos nas duas cumarinas analisadas.

As simulações foram realizadas em um notebook Lenovo, equipado com processador Intel® Core™ i3-10110U CPU @ 2.10 GHz (2.59 GHz), placa de vídeo integrada Intel® UHD Graphics, 12 GB de memória RAM e sistema operacional Windows 11 Home Single Language, versão 24H2. Foram utilizadas as versões 4.2.1 do ORCA, 20.0 do ChemDraw e 1.2.0 do Avogadro. A elaboração do input no software ORCA iniciou-se com o símbolo !, seguido de instruções como RKS, adequado para moléculas sem radicais, e o funcional B3LYP, amplamente utilizado em simulações espectroscópicas. Para otimização geométrica aplicou-se TightOPT, enquanto FREQ é utilizado para cálculos vibracionais. A precisão é garantida por parâmetros como def2-TZVPP (conjunto de base), Grid 7 (malha numérica densa), NoFinalGrid (evita recálculos) e VeryTightSCF (convergência rigorosa).

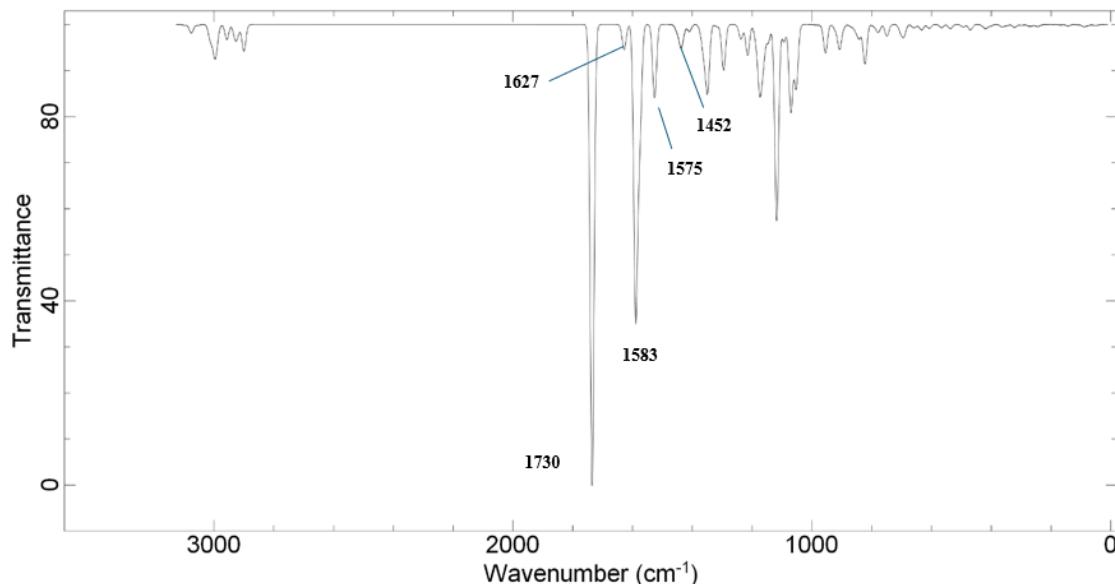
Resultados e Discussão

O estudo concentrou-se na análise espectroscópica de duas piranocumarinas, 5-metoxixantiletina e aloxantoxiletina por meio de simulações computacionais e comparação com dados experimentais disponíveis na literatura. As moléculas foram escolhidas em razão de sua relevância farmacológica e estrutural, bem como pela conjugação eletrônica característica, que favorece análises espectroscópicas.

No espectro de infravermelho (IV), as simulações realizadas no ORCA com o funcional híbrido B3LYP e o conjunto de base def2-TZVPP mostraram grande proximidade em relação aos valores experimentais (figura 1). Para a 5-metoxixantiletina (figura 2), destacou-se a banda de absorção intensa em torno de 1730 cm^{-1} , atribuída à carbonila da lactona conjugada, acompanhada de absorções entre 1627 e 1452 cm^{-1} , correspondentes ao anel aromático. Esses resultados apresentaram desvios inferiores a 1% em comparação à literatura (Santana, 2012;

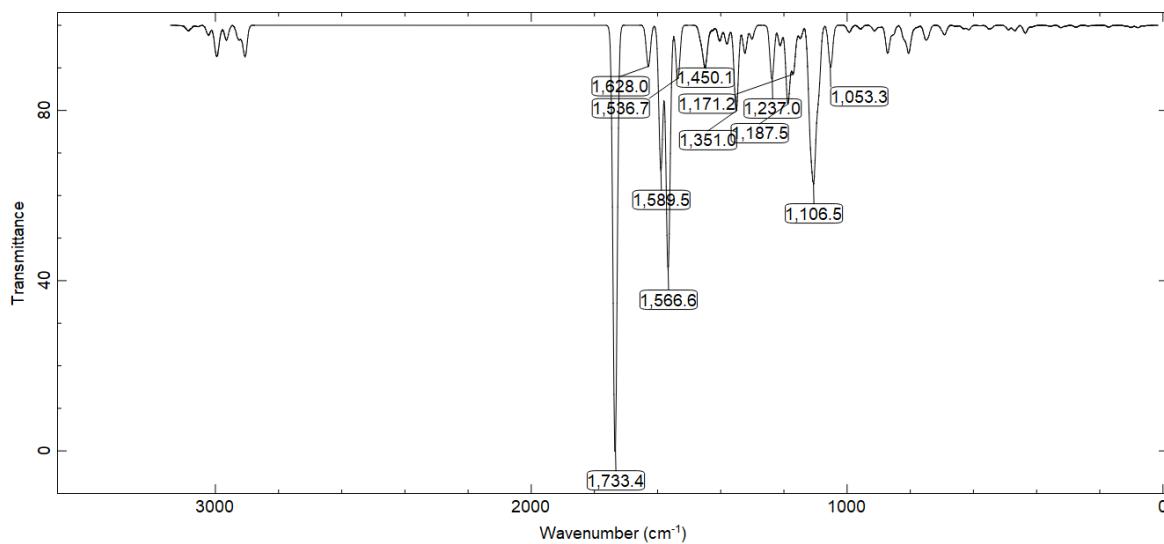
Cazal, 2009), demonstrando a confiabilidade da simulação. De forma semelhante, a aloxantoxiletina apresentou bandas em 1733 cm^{-1} ($\text{C}=\text{O}$) e 1628 cm^{-1} ($\text{C}=\text{C}$ conjugado), além de absorções típicas do anel aromático. A proximidade dos valores simulados com os experimentais relatados por Ju et al. (2001) e Santana (2012) confirma a validade do método aplicado.

Figura 1: Espectro IV da 5-metoxixantiletina simulado pelo software ORCA.



Fonte: Autoral.

Figura 2: Espectro IV simulado pelo software ORCA da aloxantoxiletina



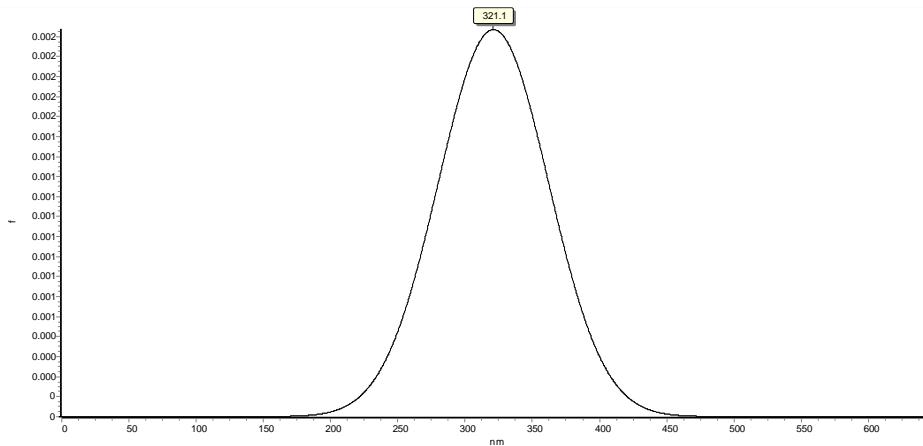
Fonte: Autoral.

Na análise UV-Vis, também realizada no ORCA, os resultados mostraram desvios maiores em relação aos experimentais, mas ainda dentro de limites aceitáveis para análises comparativas. Para a 5-metoxixantiletina, a simulação (figura 3) indicou absorção máxima em 321,1 nm, enquanto os dados experimentais apontam valores próximos a 348 nm (Ju, 2001).

Para a aloxantoxiletina, o espectro simulado (figura 4) revelou a absorção máxima em 334,8 nm, comparado a valores entre 224 ~ 323 nm relatados na literatura. Os desvios observados foram atribuídos principalmente à ausência de simulação em solvente e ao uso de conjuntos de base mais simples (SVP). Apesar disso, as simulações permitiram diferenciar as

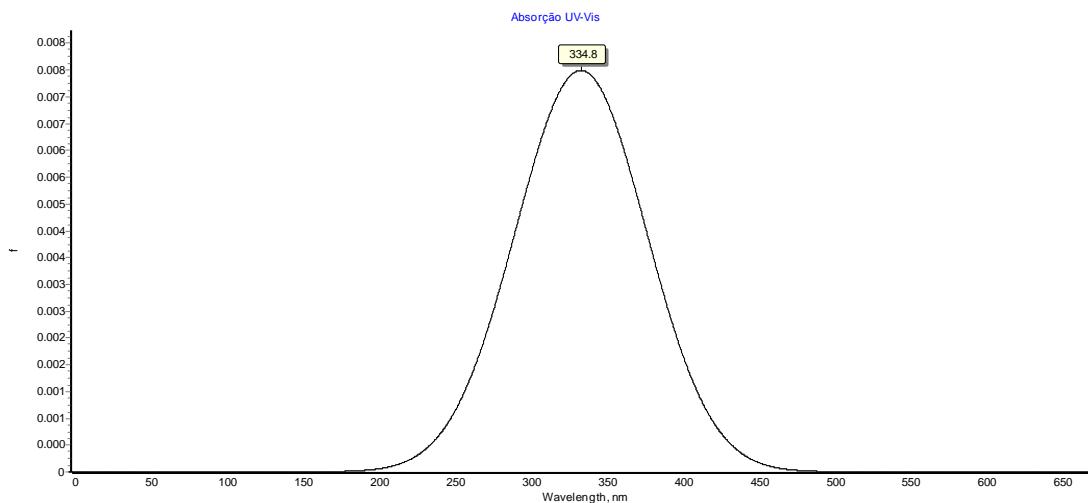
duas moléculas e identificar suas propriedades fluorescentes, mostrando-se úteis para fins educacionais e de pré-análise.

Figura 3: Espectro UV-Vis da 5-metoxixantiletina, simulado pelo ORCA.



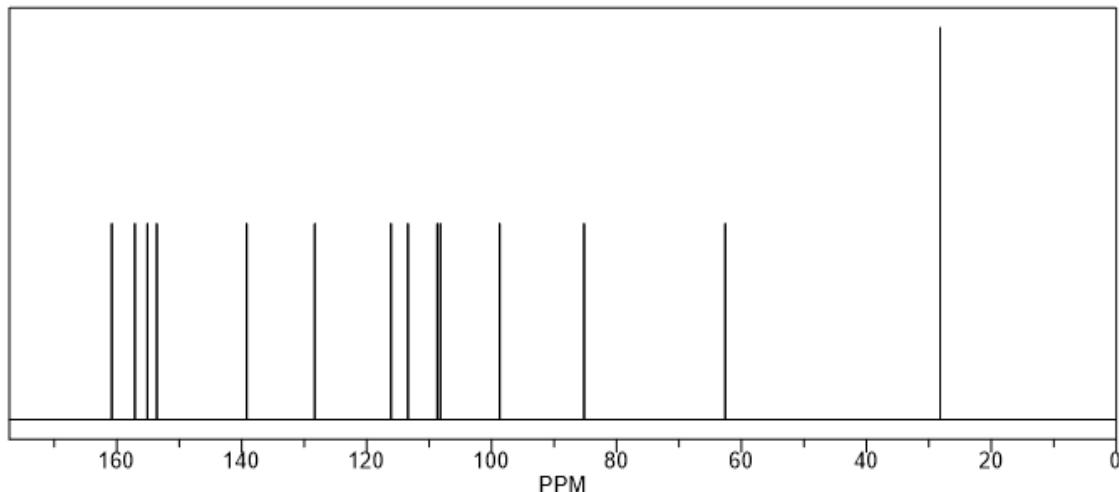
Fonte: Autoral.

Figura 4: Espectro UV-Vis da aloxantoxiletina, simulado pelo ORCA.

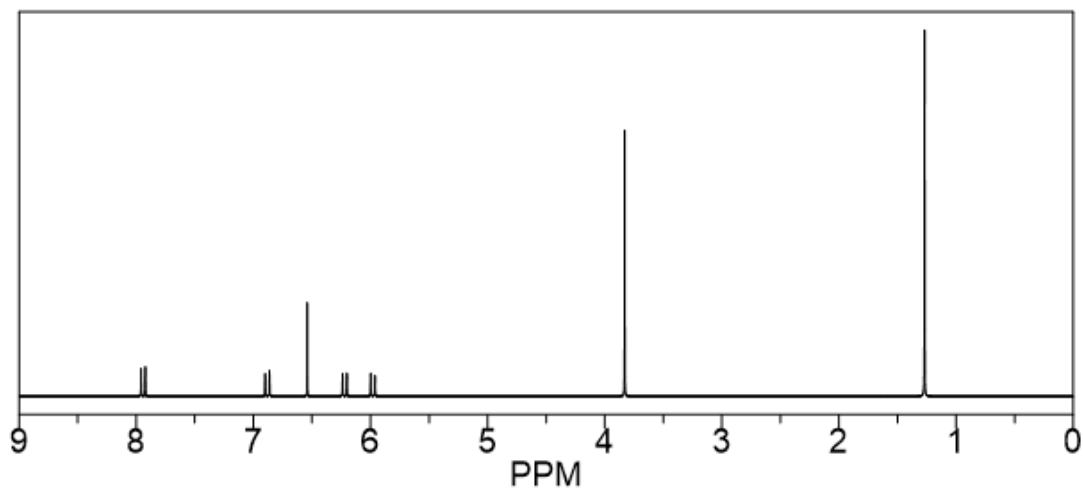


Fonte: Autoral.

Na etapa de ressonância magnética nuclear (RMN), foram utilizados recursos empíricos do ChemDraw, que se baseiam em extensos bancos de dados espectrais. Os resultados de deslocamento químico (δ) de ^1H e ^{13}C para ambas as moléculas foram bastante próximos aos valores experimentais, reforçando a aplicabilidade do software como ferramenta preditiva. Para a 5-metoxixantiletina, por exemplo, os sinais simulados em δ 7,94 e 6,22 mostraram excelente concordância com os experimentais em δ 7,84 e 6,20 (Santana, 2012). Nas figuras 5 e 6, os espectros gerados pelo ChemDraw, da 5-metoxixantiletina e da aloxantoxiletina, respectivamente.

Figura 5: Espectro RMN ^{13}C da 5-metoxixantiletina pelo ChemDraw.


Fonte: Autoral.

 Figura 6: Espectro RMN de ^1H da aloxantoxiletina simulado pelo ChemDraw.


Fonte: Autoral.

Os espectros de ^{13}C (tabelas 1 e 2) também apresentaram diferenças mínimas, geralmente inferiores a 2 ppm, com raras exceções atribuídas a simplificações do modelo. A aloxantoxiletina seguiu o mesmo padrão, exibindo deslocamentos de ^1H e ^{13}C que coincidem em grande parte com os reportados por Santana (2012) e Ju (2001).

 Tabela 1: Valores obtidos pelo espectro RMN ^{13}C do ChemDraw em comparação com os valores relatados experimentalmente na literatura, 5-metoxixantiletina.

C/H	δC	δC (SANTANA, 2012)	$ \Delta\delta $
2	160,8	161,1	0,3
3	113,4	112,5	0,9
4	139,2	138,6	0,6
5	155,1	153,0	2,1
6	108,7	107,5	1,2
7	153,6	157,1	3,5

8	98,7	100,9	2,2
8^a	157,1	155,7	1,4
4^a	108,2	107,5	0,7
2'	85,2	77,0	8,2
3'	128,3	130,7	2,4
4'	116,1	115,5	0,6
5'/6'	28,2	28,3	0,1
OMe	62,6	63,8	1,2

Fonte: Adaptado, Santana (2012).

Tabela 2: Valores obtidos pelo espectro RMN ^{13}C do ChemDraw em comparação com os valores relatados experimentalmente na literatura, aloxantoxiletina.

C/H	δC	δC (SANTANA, 2012)	$ \Delta\delta $
2	160,8	161,6	0,8
3	113,4	111,3	2,1
4	139,2	138,7	0,5
5	151,1	150,3	0,8
6	108,7	106,6	2,1
7	157,8	158,4	0,6
8	97,9	91,3	6,6
8^a	157,1	156,0	1,1
4^a	109,0	103,8	5,2
2'	85,6	77,9	7,7
3'	116,1	116,2	0,1
4'	128,3	127,6	0,7
5'/6'	28,2	28,1	0,1
OMe	56,2	56,1	0,1

Fonte: Adaptado, Santana (2012).

A comparação entre resultados simulados e experimentais demonstra que, mesmo com recursos computacionais acessíveis e sem metodologias de maior custo (como cálculos pós-Hartree-Fock), é possível alcançar alta precisão, principalmente nas análises de IV e RMN. O UV-Vis apresentou limitações, mas manteve utilidade didática e comparativa.

Do ponto de vista pedagógico, as simulações realizadas destacam-se como ferramentas eficazes para complementar práticas laboratoriais, especialmente no ensino de Química Orgânica e Produtos Naturais. A visualização de estruturas, orbitais e espectros em plataformas como ORCA, Avogadro e ChemDraw auxilia na superação da abstração típica da disciplina, favorecendo a aprendizagem significativa e a integração entre teoria e prática.

Por fim, os resultados reforçam o potencial da química computacional para apoiar tanto a pesquisa científica quanto a formação acadêmica. As simulações possibilitam compreender

fenômenos moleculares, confirmar estruturas e desenvolver habilidades analíticas, oferecendo ainda vantagens de baixo custo e acessibilidade.

Conclusões

pesquisa demonstrou que a utilização de softwares de química computacional, como ORCA, Avogadro e ChemDraw, constitui uma estratégia eficiente para complementar práticas experimentais no estudo de compostos orgânicos. As simulações espectroscópicas realizadas para as cumarinas 5-metoxixantiletina e aloxantoxiletina apresentaram forte concordância com os dados experimentais relatados na literatura, sobretudo nos espectros de infravermelho (IV) e ressonância magnética nuclear (RMN), com baixo desvio. No caso do espectro UV-Vis, os resultados mostraram diferenças moderadas, justificadas pela ausência da consideração de solventes e pelo uso de conjuntos de base menos sofisticados, mas ainda assim forneceram informações relevantes para a caracterização molecular.

Conclui-se que as ferramentas computacionais podem ser integradas de forma efetiva ao ensino e à pesquisa em Química Orgânica, auxiliando na compreensão de conceitos abstratos e na interpretação de dados espectroscópicos. Além de reduzir custos e tempo em análises laboratoriais, essas ferramentas oferecem ao estudante a possibilidade de explorar representações tridimensionais, orbitais moleculares e propriedades eletrônicas de forma interativa, promovendo uma aprendizagem mais significativa.

Como limitações, destacam-se a não inclusão dos efeitos de solventes nos cálculos de UV-Vis e o foco restrito a apenas duas moléculas. Ainda assim, os resultados confirmam a viabilidade da química computacional como recurso acessível e confiável. Sugere-se, para trabalhos futuros, a ampliação do número de compostos estudados, a aplicação de métodos mais avançados e a exploração do uso de inteligência artificial para predição automatizada de espectros.

Em síntese, o estudo evidencia o potencial da simulação computacional como ferramenta moderna de apoio ao ensino e à investigação científica, contribuindo para a consolidação da Química Orgânica como área de integração entre teoria, prática e tecnologia.

Agradecimentos

Agradeço à Prof. Dra. Vanderlúcia Fonseca de Paula e à UESB pela valiosa colaboração e apoio, fundamentais para a construção deste trabalho.

Referências

- CAZAL, Cristiane de Melo; DOMINGUES, Vanessa de Cássia; BATALHÃO, Jaqueline Raquel; BUENO, Odair Corrêa; FILHO, Edson Rodrigues; SILVA, Maria Fátima G. Fernandes da; VIEIRA, Paulo Cesar; FERNANDES, João Batista. Isolation of xanthyletin, an inhibitor of ants' symbiotic fungus, by high-speed counter-current chromatography. **Journal of Chromatography A**, v. 1216, p. 4307–4312, 2009. Disponível em: <https://www.elsevier.com/locate/chroma>. Acesso em: abril de 2025.
- BÖCK, F. C.; HELFER, G. A.; COSTA, A. DEWICK, Paul M. Medicinal natural products: a biosynthetic approach. 3. ed. Chichester: Wiley, 2009.
- JU, Yong; STILL, Cecil C.; SACALIS, John N.; LI, Jiangang; HO, Chi-Tang. Cytotoxic coumarins and lignans from extracts of the Northern Prickly Ash (*Zanthoxylum americanum*). **Phytotherapy Research**, v. 15, p. 441–443, 2001. DOI: 10.1002/ptr.686.
- LEWARS, Errol G. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. New York: Springer, 2011.
- LIRA JUNIOR, C. A.; NASCIMENTO, W. da C. L. do; LIMA, E. da C.; SOEIRO, Y. R. M. S.; SOUSA, N. de S.; SANTOS, A. M. dos; MACIEL, A. P. Química computacional: uma revisão sobre métodos, fundamentos e aplicações científicas. **Cuadernos de Educación y Desarrollo**, [S. I.], v. 17, n. 1, p. e7238, 2025. DOI: 10.55905/cuadv17n1-080. Disponível em: <https://ojs.cuadernoseducacion.com/ojs/index.php/ced/article/view/7238>. Acesso em: 17 maio. 2025.

MELIOU, Eleni; MAGIATIS, Prokopios; MITAKU, Sofia; SKALTSOUNIS, Alexios-Leandros; CHINOU, Efrosini; CHINOU, Ioanna. Natural and synthetic 2,2-dimethylpyranocoumarins with antibacterial activity. **Journal of Natural Products**, Washington, v. 68, p. 78–82, 2005.

SANTANA, Ana Maura Lago. Variabilidade na constituição química e toxicidade de extratos de *Metrodorea maracasana* Kaastra (Rutaceae), de espécimes coletados em fragmentos de mata de cipó no sudoeste da Bahia. 2012. Dissertação (Mestrado em Genética, Biodiversidade e Conservação) – **Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia**, Jequié, 2012.