

## QUIMIOINFORMÁTICA EM SALA DE AULA: ENSINO DE FUNÇÕES ORGÂNICAS COM PYTHON E RDKIT

João Paulo C. Ribeiro<sup>1</sup>; Bruno R. V. Ferreira<sup>1</sup>.

IFNMG - Instituto Federal do Norte de Minas Gerais, Campus Salinas<sup>1</sup>. [jpcr@aluno.ifnmg.edu.br](mailto:jpcr@aluno.ifnmg.edu.br)

**Palavras-Chave:** Ensino de Química, programação, ensino técnico.

### Introdução

O ensino de Química, por vezes, enfrenta dificuldades para lidar com situações distantes da realidade dos estudantes. As funções orgânicas, em especial, esbarram em barreiras como a abstração, a carga horária insuficiente e, em alguns casos, o desinteresse (Chaves; Soares; Prott, 2025). Apesar disso, com o avanço tecnológico, surgiram novas maneiras de atrair a atenção dos estudantes. Metodologias que incorporam as Tecnologias da Informação e Comunicação (TIC) rompem a rotina sequencial, promovem maior engajamento e ampliam o repertório de estratégias. A literatura apresenta diversas formas de utilizar a tecnologia. Entretanto, é necessário avaliar as competências dos estudantes e as condições da escola antes de desenvolver qualquer prática (NIC.br, 2024).

Os alunos dos Institutos Federais (IFs), por exemplo, que cursam o Técnico Integrado em Informática juntamente com o ensino médio, desenvolvem habilidades em áreas mais específicas da tecnologia, como programação. Aprendem, desde o 1º ano do ensino médio, noções de lógica e, consequentemente, linguagens de programação. Além disso, os *campi* dispõem de recursos que atendem às necessidades. (IFNMG, 2025).

É comum que o conteúdo de funções orgânicas seja apresentado no 3º ano do ensino médio. Em paralelo, os estudantes do curso Técnico em Informática já possuem maior familiaridade com linguagens de programação; especificamente, já no primeiro ano, aprendem os fundamentos de *Python*, considerada por muitos uma linguagem educacional devido à sua organização, simplicidade e caráter universal (Tulchak; Marchuk, 2016).

De acordo com os PCNs, a interdisciplinaridade constitui princípio central (Brasil, 1999). Ainda assim, permanecem fragilidades na integração entre a formação geral e a técnico-profissional, como PPCs produzidos de forma isolada, pouca comunicação entre docentes e uma articulação entre núcleos que exige planejamento deliberado, em vez de ser tomada como espontânea (Silva; Mafra, 2024). Em alguns *campi*, a separação entre o ensino técnico e o médio regular persiste, o que evidencia a necessidade de práticas integradoras e de gestão curricular colaborativa.

O ensino de funções orgânicas no 3º ano do ensino médio costuma ser desafiador. Frequentemente, as funções são trabalhadas de forma isolada e, posteriormente, os estudantes precisam reconhecer, em uma mesma molécula, a presença simultânea de diferentes funções químicas. Neste contexto, o uso de recursos tecnológicos torna-se extremamente relevante.

Diante disso, evidencia-se a necessidade de uma integração mais efetiva entre os conteúdos básicos e técnicos, tornando as aulas menos monótonas, mais significativas. O presente trabalho tem como objetivo aproveitar a estrutura do Ensino Médio Técnico dos (IFs), articulando os conhecimentos técnicos dos estudantes do 3º ano do curso Técnico em Informática ao uso de uma ferramenta que auxilie no ensino de funções orgânicas, reduzindo as dificuldades na compreensão das funções orgânicas e promovendo a interdisciplinaridade.

A integração entre química e computação vem de décadas e tornou mais robusto o estudo em escala atômica, hoje, química computacional e modelagem molecular permitem prever geometria, energias, reatividade e conformações por métodos quânticos e clássicos (Jensen, 2017; Leach, 2009). Diante da explosão de compostos conhecidos, surgiram notações formais para representar estruturas no computador, viabilizando seu armazenamento e

manipulação digital tarefa central da quimioinformática e etapa inicial da química computacional, que converte estruturas para formatos legíveis por máquina (Gasteiger e Engel, 2003). Entre as notações lineares clássicas, destaca-se *SMILES* (*Simplified Molecular Input Line Entry System*), proposta por David Weininger, por ser compacta, simples e fácil de aprender, baseada em poucas regras (Gasteiger e Engel, 2003).

Em termos práticos, para trabalhar essas representações emprega-se uma linguagem de computação, por exemplo, *Python*, desenvolvedores criaram *scripts* utilizando essa notação e assim conseguem desde uma simples visualização de uma molécula a cálculos complexos de reações, como é o caso da biblioteca RDKit, um projeto aberto amplamente adotado que interpreta *SMILES* e gera visualizações moleculares em poucas linhas de código (Landrum, 2023).

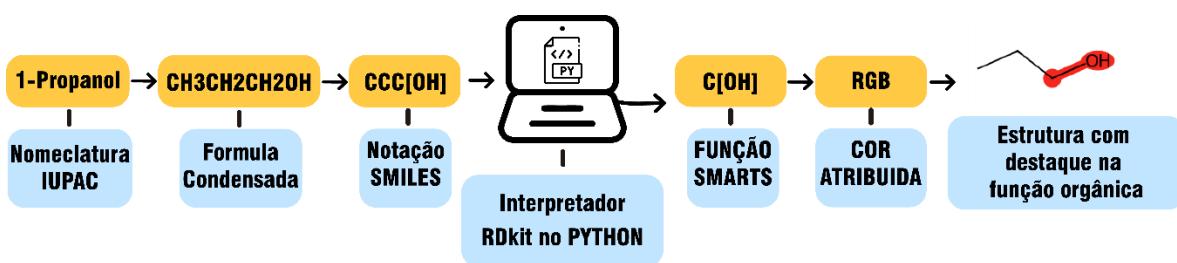
Inspirado nesses recursos, os próximos tópicos deste trabalho apresentarão a integração entre a linguagem de programação *Python* e a Química Orgânica, empregando o RDKit para aplicar cores e estilos personalizados e evidenciar regiões de interesse, neste caso as funções orgânicas. Além disso, o RDKit permite definir cores específicas para cada átomo e ligação por meio de um dicionário que associa os respectivos índices a valores RGB, tornando a visualização mais clara e intuitiva (RDKit Developers, 2025). Dessa forma, as cores são diretamente correlacionadas a cada função orgânica presente na estrutura.

## Material e Métodos

A pesquisa foi desenvolvida no Instituto Federal do Norte de Minas Gerais (IFNMG) - Campus Salinas, com 60 estudantes do 3º ano do Ensino Médio Técnico em Informática, distribuídos em duas turmas. O estudo adotou abordagem mista (qualitativa e quantitativa), conforme Creswell e Clark (2013), e configurou-se como pesquisa-ação, segundo Thiollent (2011). As atividades foram realizadas no laboratório de informática da instituição, em dez encontros de 50 minutos cada.

A abordagem pedagógica foi organizada em três etapas experimentais, estruturadas segundo as classes de compostos orgânicos: (I) hidrocarbonetos; (II) funções oxigenadas; e (III) funções nitrogenadas, além de outras funções, executadas em paralelo ao conteúdo ministrado pelo professor responsável. Como ferramenta principal, adaptou-se um *script* em linguagem *Python* utilizando a biblioteca de quimioinformática RDKit, cuja lógica está descrita na (Figura 1). Utilizou-se o Google *Colab* como ambiente de desenvolvimento, escolhido por sua acessibilidade e gratuidade.

**Figura 1:** Lógica do código a ser usado.



**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

Em termos gerais, a molécula é fornecida em *SMILES*, por exemplo, o 1-propanol como “CCC[OH]” e o RDKit a transforma em um objeto com átomos e ligações. As funções orgânicas que se deseja destacar são descritas por padrões SMARTS como “C[OH]” para o grupo álcool. O RDKit percorre a estrutura, encontra as correspondências e identifica os átomos envolvidos. Para cada ocorrência, aplica-se uma cor definida no código, convertendo os valores RGB convencionais (0–255) para o formato normalizado (0–1). Com isso, o módulo de desenho

“rdMolDraw2D” gera a imagem da molécula, já com as regiões que batem com os SMARTS realçadas nas cores escolhidas.

A primeira etapa instrumentalizou os alunos na representação molecular computacional por meio da notação *SMILES*; com hidrocarbonetos, trabalhou-se a nomenclatura de alkanos, alcenos e alcinos.

Na segunda etapa, com foco em compostos oxigenados, os estudantes foram desafiados a destacar visualmente os grupos funcionais com cores padronizadas definidas por eles. Para isso, propuseram-se tarefas como a montagem de uma molécula a partir de sua fórmula condensada ou de seu nome IUPAC. Selecionaram-se moléculas específicas da classe, contendo até três funções, de acordo com o grau de dificuldade e sua relevância biológica.

A terceira e última etapa ampliou o escopo para funções nitrogenadas e moléculas mais complexas, introduzindo conceitos de isomeria. Os desafios dessa fase simularam um processo de síntese pelo qual um composto passa, partindo de uma molécula inicial, realizando rearranjos e evoluindo até o produto final.

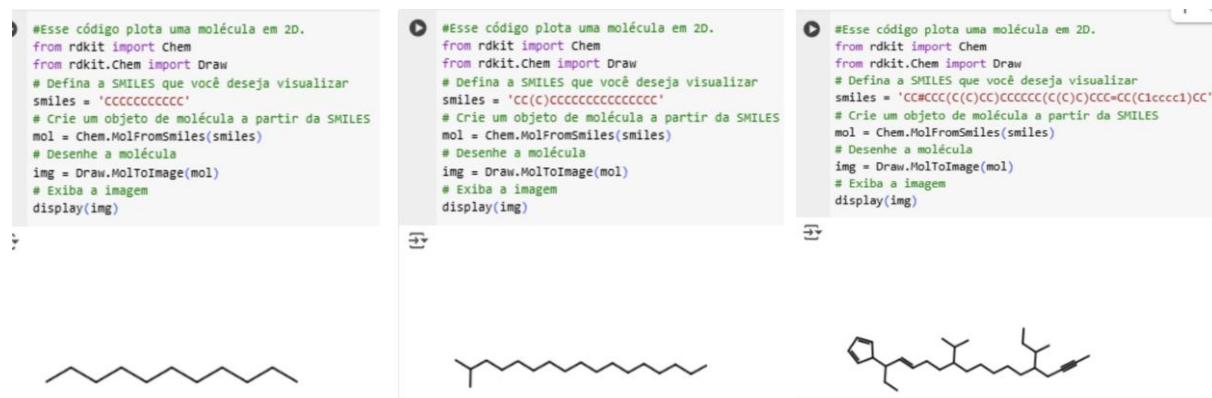
Para a coleta de dados, aplicou-se aos alunos um questionário online (*Google Forms*), individualmente, para avaliar o interesse, a percepção de aprendizagem e obter sugestões. A análise quantitativa baseou-se no desempenho nos desafios, considerando a capacidade de identificação dos grupos funcionais.

## Resultados e Discussão

A aplicação da metodologia que integra Química Orgânica e programação Python gerou resultados efetivos na aprendizagem dos alunos. Durante as etapas, a abordagem permitiu uma experiência de aprendizado visual e interativa.

Na primeira etapa, realizada no laboratório de informática, os alunos foram capacitados no uso da notação *SMILES* e do código inicial, para isso foi trabalhado os hidrocarbonetos. A atividade central consistiu em diferenciar a cadeia principal das ramificações. Com *SMILES*, eles visualizam como inserir ramificações na cadeia principal: na notação, ramificações são indicadas por parênteses, sempre respeitando a valência dos átomos ao redor. O desafio dessa etapa foi a progressão de substituintes (Figura 2), conduzida de forma gradual, permitindo explorar um grande número de combinações e diferentes ramificações. Ao final, os alunos souberam representar diversos tipos de hidrocarbonetos e compreender, por analogia, como a estrutura varia com a adição de carbonos e ligações, caracterizando alkanos, alcenos, alcinos e compostos cíclicos e assim influenciando no seu nome IUPAC.

**Figura 2:** Estudo dos Hidrocarbonetos no computador.



```
#Esse código plota uma molécula em 2D.
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw
# Defina a SMILES que você deseja visualizar
smiles = 'CCCCCCCCCCCC'
# Crie um objeto de molécula a partir da SMILES
mol = Chem.MolFromSmiles(smiles)
# Desenhe a molécula
img = Draw.MolToImage(mol)
# Exiba a imagem
display(img)
```

```
#Esse código plota uma molécula em 2D.
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw
# Defina a SMILES que você deseja visualizar
smiles = 'CCC(C)CCCCCCCCCCCC'
# Crie um objeto de molécula a partir da SMILES
mol = Chem.MolFromSmiles(smiles)
# Desenhe a molécula
img = Draw.MolToImage(mol)
# Exiba a imagem
display(img)
```

```
#Esse código plota uma molécula em 2D.
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw
# Defina a SMILES que você deseja visualizar
smiles = 'CC(C)CC(C(CC)CC)CCCC(C(C)C)CCC=CC(Ccccc1)CC'
# Crie um objeto de molécula a partir da SMILES
mol = Chem.MolFromSmiles(smiles)
# Desenhe a molécula
img = Draw.MolToImage(mol)
# Exiba a imagem
display(img)
```

**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

Na segunda etapa, introduziu-se o realce por cores de grupos funcionais. Ao analisar o ácido salicílico (Figura 3), a ferramenta evidenciou um erro conceitual recorrente: a confusão entre fenol, álcool e, por vezes, enol. A classificação da hidroxila depende do tipo de carbono

ao qual ela está ligada: quando o oxigênio se liga a carbono  $sp^3$  alifático, trata-se de álcool; ligado a carbono aromático do anel ( $sp^2$ ), tem-se fenol; e quando a hidroxila está diretamente ligada a um carbono de dupla C=C ( $sp^2$  vinílico), obtém-se um enol. Na notação *SMILES* isso fica transparente: no fenol não há necessidade de “=” porque a ligação ao anel aromático é indicada pelos átomos minúsculos (por exemplo, c1ccccc1O); já nos enóis a dupla é explícita com “=” e o oxigênio se liga ao próprio carbono insaturado (por exemplo, C=CO); em alcoóis simples o carbono é saturado (por exemplo, CCO). Importa notar que a presença de “=” só caracteriza enol quando a hidroxila está presa ao carbono da dupla; assim, C=CCO descreve um álcool alílico, não um enol.

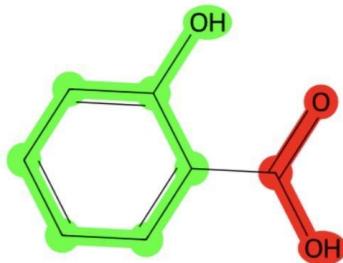
Outro equívoco sanado foi distinguir hidroxila “(OH)” de carbonila “(C=O)”: no ácido salicílico coexistem um grupo carboxílico “O=C(O)” e uma hidroxila fenólica, o destaque por cores ajuda a evitar confusões. Além disso, em *SMILES* os hidrogênios são, em geral, implícitos; escrever “[OH]” é opcional e usado quando se deseja explicitar o hidrogênio ou estados especiais. Com isso, em algumas vezes o código apresentava o erro e destacava tanto a hidroxila quanto a carbonila da mesma cor, então explicitava o hidrogênio com o “[OH]”. A escolha das cores fica a critério dos alunos; porém, para estimular as habilidades de programação, a cor usada em cada situação deve ser definida no código. Desse modo, a leitura correta das fórmulas exige articular a visualização computacional com o conhecimento teórico trabalhado em sala, tornando visíveis nuances conceituais que costumam passar despercebidas.

**Figura 3:** Desafio etapa 2: destacar as funções presentes e atribuir cores.

```
# Definir a molécula (modifique o SMILES aqui)
smi = "Cl=CC=C(C(=C1)C(=O)O)O"
mol = Chem.MolFromSmiles(smi)

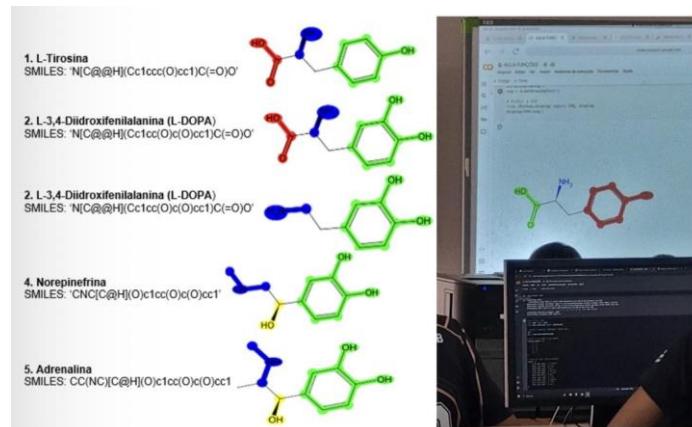
# Definir as funções e suas SMARTS
funcoes_smarts = {
    "Ac. carb": "C(=O)O",
    "Fenol": "c1ccc(cc1)O",
    "": "",
    "": "",
    "": ""
}

# Paleta de cores (até 10 funções)
cores = [
    (1.0, 0.0, 0.0), # Vermelho
    (0.0, 1.0, 0.0), # Verde
]
```



**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

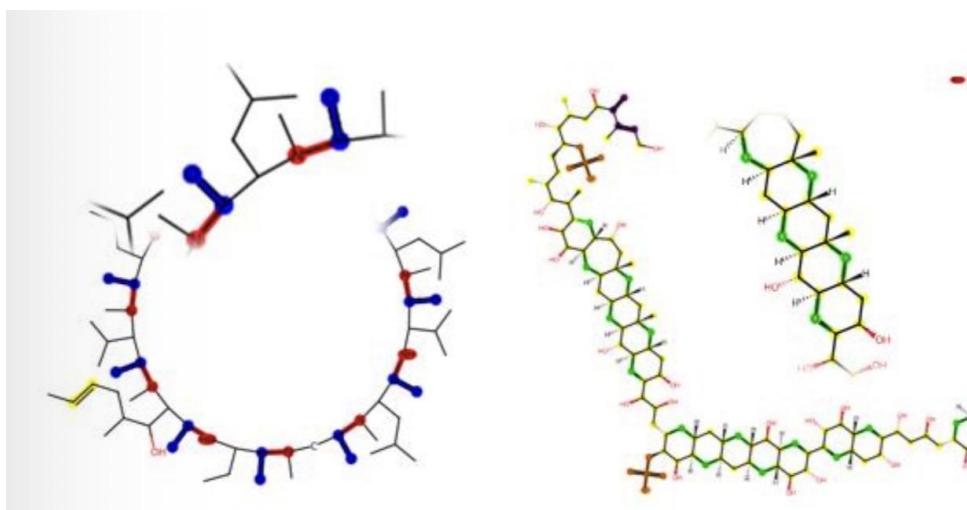
Na terceira etapa, os alunos aplicaram o conhecimento adquirido em moléculas com maior complexidade, como a adrenalina, que possui conformações ópticas. Em um dos desafios os alunos foram desafiados a partir da *L*-tirosina chegar à molécula da adrenalina (figura 4). Este exercício introduziu a estereoquímica por meio das notações em *SMILES* com novos caracteres como o uso de um "@" para a cunha frente do plano e o uso de dois "@@" para destacar a cunha para trás do plano, assim explorando conceitos essenciais para diferenciar isômeros com distintas atividades biológicas, essa etapa mostrou aos alunos a importância das funções orgânicas nas nossas vidas e como a simples troca, retirada ou adição de uma função impacta na sua atividade.

**Figura 4:** Síntese da Adrenalina, desafio da terceira etapa.

**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

Também na terceira etapa, em um outro desafio, com moléculas como a maitotoxina e a ciclosporina (figura 5), os alunos inicialmente se intimidaram com a extensão das notações *SMILES*, assim como o tamanho da estrutura quando as plotaram sem os destaques. Contudo, logo perceberam que as funções se repetiam, desenvolvendo uma estratégia de identificação por padrões. Esta atividade demonstrou a percepção visual dos alunos, que assim como a notação computacional um composto constituído de um arranjo grande com muitas funções as representações possuem padrões que os caracterizam e se repetem ao longo da cadeia.

Em moléculas grandes, as variações de grupos funcionais ao longo da cadeia tornam-se especialmente úteis para o ensino. Em sala de aula, os alunos costumam estudar cada função isoladamente; quando se deparam com estruturas que reúnem cinco ou mais funções, muitos acabam se perdendo. Nesse contexto, o uso de ferramentas computacionais mostra-se especialmente vantajoso, pois torna objetiva a identificação de cada grupo funcional.

A carbonila de uma cetona por exemplo é escrita como “C(=O)”, e a acetona pode ser representada por “CC(=O)C”, evidenciando que o carbono carbonílico está ligado a dois átomos de carbono. Já na amida “C(=O)N”, a diferença em relação à cetona é a presença do nitrogênio ligado ao carbono da carbonila, algo indicado explicitamente pela notação, que usa as siglas da tabela periódica (C, N, O).

**Figura 5:** Estrutura da ciclosporina e maitotoxina com destaque nas suas funções presentes.

**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

Na ciclosporina, estudada no laboratório, o motivo estrutural predominante é a ligação peptídica, uma amida que une os aminoácidos. Onze aminoácidos conectados por ligações

amida; em *SMILES*, essa função aparece como C(=O)N. Com isso, os alunos consolidam o conceito que caracteriza uma amida. Já na maitotoxina, apresenta uma sequência de anéis de éter fundidos que se repete ao longo da cadeia. Em *SMILES*, o padrão de éter aparece de forma recorrente como "COC". Assim como na identificação de amidas na ciclosporina, a linguagem computacional deixa claro as diferentes funções orgânicas.

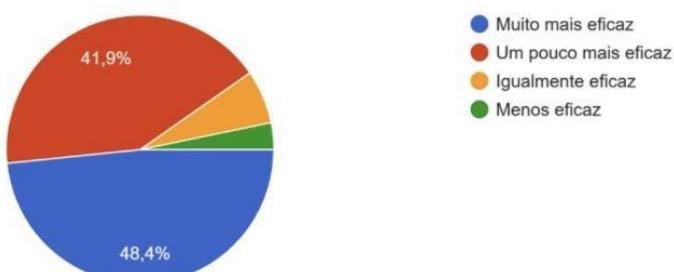
Cada etapa favoreceu a construção do conhecimento sobre funções orgânicas, respeitando o percurso de aprendizagem dos estudantes. A seleção das moléculas considerou as dificuldades diagnosticadas nas aulas tradicionais, o nível de escolaridade e os conteúdos previamente abordados. Desse modo, a ferramenta assume caráter personalizado em cada turma.

Os resultados do questionário aplicado resultaram em 31 participantes, que confirmou a percepção positiva. Mais de 90% dos alunos (figura 6) avaliaram a metodologia como "mais eficaz" ou "muito mais eficaz" que os métodos tradicionais.

**Figura 6:** Comparando a outros métodos.

Comparado a métodos tradicionais (ex: livros), como você avalia o uso de programação para aprender química orgânica?

31 respostas



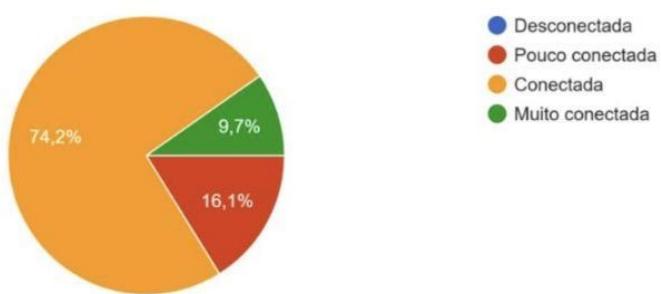
**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

Quase 75% consideraram a integração entre programação e química "muito conectada" ou "conectada" (figura 7).

**Figura 7:** Nível de interação

Como você avalia a integração entre programação e o conteúdo de química orgânica?

31 respostas



**Fonte:** Acervo do Autor, 2025.

Os comentários qualitativos reforçaram esses dados, os alunos registraram comentários sobre a experiência de utilizar a ferramenta durante as aulas. As observações compartilhadas revelam percepções variadas e detalhadas sobre a atividade: "**A metodologia de ensino foi muito boa**".

**"Eu acho que foi bom, porque acabamos por sair da rotina"** - Este comentário ressalta o valor da diversificação metodológica, conceito fundamental em pedagogia ativa. A quebra da rotina tradicional de ensino pode aumentar a motivação e engajamento.

**"Foi melhor para meu entendimento em química e no código em python"** - Este depoimento evidencia benefício bidirecional: melhoria tanto na compreensão química quanto em habilidades computacionais.

## Conclusões

Este trabalho demonstrou que a utilização de conhecimentos prévios em programação *Python*, especificamente com a biblioteca RDKit, é uma metodologia eficaz e contextualizada para o ensino de funções orgânicas no Ensino Médio Técnico em Informática. A abordagem interdisciplinar permitiu reduzir a abstração dos conceitos químicos, tornando o aprendizado mais visual, interativo e significativo.

Os objetivos específicos foram alcançados, pois os alunos foram capazes de identificar funções em moléculas com uma elevada complexidade, superando dificuldades comuns, como a diferenciação de grupos funcionais próximos e a compreensão de arranjos espaciais. A avaliação do desempenho durante as aulas e o questionário final indicaram um alto nível de aproveitamento e de interesse dos estudantes, que avaliaram a ferramenta positivamente.

A metodologia não só auxiliou na compreensão dos conteúdos de Química Orgânica, mas também desenvolveu habilidades em programação de forma integrada, mostrando o potencial de conectar a base curricular comum ao ensino técnico. Conclui-se que a proposta tem grande potencial para aumentar o engajamento dos alunos e pode servir como um modelo para outras instituições que buscam inovar e promover uma educação tecnológica e interdisciplinar, além disso, pensando na reproduzibilidade deste trabalho o código usado e as atividades foram disponibilizadas na plataforma "*GitHub*" de forma gratuita tanto para colaboração quanto para o uso em reproduções, o acesso é por meio do link: <https://github.com/Lab-de-Quimica-Computacional-do-IFNMG>.

## Referências

CHAVES, J. de O.; SOARES, B. R.; PROTTI, L. M. L. Aplicação de sequência didática no ensino de Química Orgânica com plantas medicinais. **Química Nova na Escola**, v. 47, n. 2, p. 167-174, 2025.

NÚCLEO DE INFORMAÇÃO E COORDENAÇÃO DO PONTO BR (NIC.br). Pesquisa sobre o uso das tecnologias de informação e comunicação nas escolas brasileiras: **TIC Educação 2023**. São Paulo: Comitê Gestor da Internet no Brasil (CGI.br), 2024.

INSTITUTO FEDERAL DO NORTE DE MINAS GERAIS (IFNMG). Curso Técnico em Informática integrado ao ensino médio – Campus Salinas. Disponível em: <https://www.ifnmg.edu.br/cursos/344-portal/salinas/salinas-cursos-tecnicos/tecnico-em-informatica-integrado/13549-tecnico-em-informatica-integrado>. Acesso em: 05 ago. 2025.

TULCHAK, L. V.; MARCHUK, A. O. **History of Python**. 2016. Tese (Doutorado) – Vinnytsia National Technical University (BHTY). Disponível em: <http://ir.lib.vntu.edu.ua/bitstream/handle/123456789/10471/461.pdf>. Acesso em: 05 ago. 2025.

BRASIL. Ministério da Educação. Secretaria de Educação Média e Tecnológica. **Parâmetros Curriculares Nacionais: Ensino Médio – Bases Legais**. Brasília: MEC/SEMTEC, 1999. Disponível em: <https://portal.mec.gov.br/seb/arquivos/pdf/blegais.pdf>. Acesso em: 05 ago. 2025.

SILVA, L. S.; MAFRA, J. R. e S.. Interdisciplinaridade e tecnologias digitais no ensino técnico integrado: perspectivas de professores de matemática. Areté -**Revista Amazônica de Ensino de Ciências**, Manaus, v. 22,n.36,e24027, jan./dez., 2024.

JENSEN, F. **Introduction to Computational Chemistry**. 3. ed. Chichester: Wiley, 2017.

LEACH, A. R. Molecular Modelling: Principles and Applications. 2. ed. Harlow: Pearson/Prentice Hall, 2009.

LANDRUM, G. RDKit\_Paper: Text.md. **GitHub repository**, 2023. Disponível em: [https://github.com/greyclandrum/RDKit\\_Paper/blob/master/Text.md](https://github.com/greyclandrum/RDKit_Paper/blob/master/Text.md). Acesso em: 01 ago. 2025.



64º Congresso Brasileiro de Química  
04 a 07 de novembro de 2025  
Belo Horizonte - MG

RDKit Developers. Getting Started with the RDKit in Python. In: **The RDKit Documentation.** [S.l.]: The RDKit Project, 2025. Disponível em: <https://www.rdkit.org/docs/GettingStartedInPython.html>. Acesso em: 06 ago. 2025.

CRESWELL, J. W.; CLARK, V. L. Plano. **Pesquisa de métodos mistos.** 2. ed. Tradução de Magda França Lopes. Revisão técnica de Dirceu da Silva. Porto Alegre: Penso, 2013.

THIOLLENT, M. **Metodologia da pesquisa-ação.** 18. ed. São Paulo: Cortez, 2011.