



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO – CAMPUS DOM DELGADO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA QUÍMICA
LICENCIATURA EM QUÍMICA**

RODRIGO DE AQUINO ALMEIDA

**UTILIZAÇÃO DO PROGRAMA PASS ONLINE PARA IDENTIFICAÇÃO DE
COMPOSTOS ORGÂNICOS ATIVOS NO ÓLEO ESSENCIAL DE *Pimenta dioica*
L. COMO UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA NA ÁREA DE QUÍMICA**

**SÃO LUÍS – MA
2023**

RODRIGO DE AQUINO ALMEIDA

**UTILIZAÇÃO DO PROGRAMA PASS ONLINE PARA IDENTIFICAÇÃO DE
COMPOSTOS ORGÂNICOS ATIVOS NO ÓLEO ESSENCIAL DE *Pimenta dioica*
L. COMO UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA NA ÁREA DE QUÍMICA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Química Licenciatura da Universidade Federal do Maranhão como requisito para a obtenção do título de Licenciado em Química.

Orientador: Prof. Dr. Victor Elias Mouchrek Filho.

**SÃO LUÍS – MA
2023**

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a)
autor(a). Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

De Alquino Almeida, RODRIGO.

UTILIZAÇÃO DO PROGRAMA PASS ONLINE PARA IDENTIFICAÇÃO
DE COMPOSTOS ORGÂNICOS ATIVOS NO ÓLEO ESSENCIAL DE Pimenta
dioica L. COMO UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA NA ÁREA DE QUÍMICA
/ RODRIGO De Alquino Almeida. - 2023.

101 f.

Coorientador(a): GUSTAVO OLIVEIRA EVERTON.

Orientador(a): VICTOR ELIAS MOUCHREK FILHO.

Monografia (Graduação) - Curso de Química, Universidade
Federal do Maranhão, SÃO LUÍS, 2023.

1. Antioxidante. 2. Funções Orgânicas. 3. Sequência
Pedagógica. I. EVERTON, GUSTAVO OLIVEIRA. II. MOUCHREK
FILHO, VICTOR ELIAS. III. Título.

RODRIGO DE AQUINO ALMEIDA

**UTILIZAÇÃO DO PROGRAMA PASS ONLINE PARA IDENTIFICAÇÃO DE
COMPOSTOS ORGÂNICOS ATIVOS NO ÓLEO ESSENCIAL DE *Pimenta dioica*
L. COMO UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA NA ÁREA DE QUÍMICA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Curso de Química Licenciatura da
Universidade Federal do Maranhão como
requisito para a obtenção do título de Licenciado
em Química.

Aprovada em ___/___/___

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Victor Elias Mouchrek Filho (Orientador)

Doutorado em Química (USP)
Universidade Federal do Maranhão

Prof. Ms. Ana Patrícia Matos Pereira

Doutoranda em Biotecnologia- RENOBIO (UFMA)
Universidade Federal do Maranhão

Prof. Dr. Gilvan de Oliveira Costa Dias

Doutorado em Química (UFMA)
Universidade Federal do Maranhão

AGRADECIMENTOS

Eu gostaria de expressar a minha sincera gratidão a todas as pessoas que contribuíram para a realização deste trabalho de conclusão de curso.

Primeiramente, agradeço aos meus orientadores, Professor Victor Elias Mouchrek Filho e Gustavo Oliveira Everton, pela paciência, dedicação e valiosas orientações durante todo o processo de desenvolvimento da minha Monografia. Obrigado por compartilharem seus conhecimentos e por me encorajarem a explorar diferentes abordagens e perspectivas.

Aos meus amigos e familiares, principalmente a Cecília Barbosa de Aquino, Cassiano Vasques Frota Guterres, Marcelle Adriane Ataíde Matos, Brendha Araújo de Sousa, Beatriz Jardim Rodrigues Chagas, Thaylanna Pinto de Lima, Ana Patrícia Matos Pereira, Maria Giulia Alves Carneiro Felizardo, Lais Silva Luz, Juliana Deyse Amorim Vilela, Thamires de Jesus Teles Ribeiro, Victória Laysla Silva Ramos. O meu profundo agradecimento por todo o apoio e incentivo ao longo desta jornada. Vocês foram verdadeiros pilares, acreditando em mim e me motivando a seguir em frente mesmo nas adversidades. Agradeço por sempre estarem ao meu lado, me compreendendo e me encorajando a nunca desistir.

Aos colegas de curso, agradeço pela troca de experiências, debates construtivos e momentos compartilhados. Foi engrandecedor poder contar com a colaboração e incentivo de vocês ao longo dessa caminhada.

Mais uma vez, expresso a minha gratidão a todos que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho. Que o reconhecimento e a valorização de cada um façam ecoar o meu agradecimento!

Muito obrigado a todos!

***"Ninguém nasce feito, é
experimentando-nos no mundo que nós
nos fazemos."***

(Paulo Freire)

RESUMO

Buscou-se identificar, por meio de análise computacional, substâncias naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) em laboratório que poderiam ter propriedades antioxidantes, semelhantes a estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas com base nessa relação. Para adquirir o óleo essencial, foi utilizado o método de hidrodestilação utilizando um extrator de Clevenger feito de vidro, o qual estava conectado a um balão de fundo redondo e aquecido por uma manta elétrica. Para isso, as folhas da planta foram moídas e, em seguida, adicionou-se água destilada em uma proporção de (1:8) em relação ao material vegetal dentro do balão. Para caracterização química empregou-se a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), sendo utilizado o software AMDIS (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System) para identificar os componentes presentes na amostra. Em seguida, para a atividade *in silico* foram empregados os programas PASS Online e PubChem, com o intuito de estabelecer a atividade antioxidante por meio das configurações moleculares. Sobre a sequência didática, discutiu-se o tema dos antioxidantes relacionado ao conteúdo das funções orgânicas, desenvolvendo atividades encadeadas de acordo com o padrão de pesquisa baseada na similaridade dos compostos identificados. Para atividade antioxidante utilizou-se o método de descoloração de radicais DPPH. De acordo com metodologia de GC-MS foram identificados 7 constituintes químicos, sendo majoritário o Eugenol, correspondendo a 85,68%. Posteriormente, por meio da análise computacional, a atividade *in silico* revelou que o óleo essencial de *Pimenta dioica* (l.) possui um potencial ativo (Pa) de 0,585 indicando uma ação antioxidante moderada e predominante nesse estudo. Para efeito de comparação, validou-se a consistência do estudo *in silico* por meio de experimentação *in vitro*. O OE apresentou atividade antioxidante ativa frente ao método DPPH, com uma Concentração Eficiente 50% (CE₅₀) de 39,54 mg/L. Adicionalmente, utilizando os achados da investigação por semelhança, desenvolveu-se a Sequência Pedagógica (SP), tratando da temática de compostos bioativos e antioxidantes em conjunto com o servidor do PASS Online e PubChem voltados para o tópico de funções Orgânicas. Essa abordagem educacional tem como foco principal incentivar a percepção dos estudantes em relação à utilização apropriada dessas substâncias, ao mesmo tempo em que promove uma experiência imersiva na visualização dessas estruturas em três dimensões. Isso oferece

facilidades no estudo das configurações, composições moleculares e na Estereoquímica.

Palavras-chave: Sequência Pedagógica; Antioxidante; Funções Orgânicas.

.

ABSTRACT

We sought to identify, through computational analysis, natural substances present in the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) in the laboratory that could have antioxidant properties, similar to experimental studies for teaching Organic Functions based on this relationship. To acquire the essential oil, the hydrodistillation method was used using a Clevenger extractor made of glass, which was connected to a round bottom flask and heated by an electric blanket. For this, the leaves of the plant were ground and then distilled water was added in a ratio of (1:8) in relation to the plant material inside the flask. For chemical characterization, gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) was used, using the AMDIS software (Automated Mass Spectral Deconvolution Mass & Identification System) to identify the components present in the sample. Then, for the *in silico* activity, the PASS Online and PubChem programs were used, in order to establish the antioxidant activity through molecular configurations. Regarding the didactic sequence, the topic of antioxidants related to the content of organic functions was discussed, developing chained activities according to the research pattern based on the similarity of the identified compounds. For antioxidant activity, the DPPH radical decolorization method was used. According to the GC-MS methodology, 7 chemical constituents were identified, the majority being Eugenol, corresponding to 85.68%. Subsequently, through computational analysis, the activity *in silico* revealed that the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) has an active potential (Pa) of 0,585, indicating a highly intense and predominant antioxidant action. For comparison purposes, the consistency of the *in silico* study was validated through *in vitro* experimentation. The EO showed active antioxidant activity against the DPPH method, with a 50% Efficient Concentration (EC₅₀) of 39.54 mg/L. Additionally, using the findings of the research by similarity, the Pedagogical Sequence (SP) was developed, dealing with the theme of bioactive compounds and antioxidants in conjunction with the PASS Online server and PubChem focused on the topic of Organic functions. This educational approach is primarily focused on encouraging students' perception of the appropriate use of these substances, while promoting an immersive experience in visualizing these structures in three dimensions. This offers facilities in the study of configurations, molecular compositions and stereochemistry.

Keywords: Pedagogical Sequence; Antioxidant; Organic Functions.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- <i>Pimenta dioica</i>.....	17
---	-----------

LISTA DE TABELAS

Tabela1 - Caracterização química do OE de <i>Pimenta dioica</i>	40
Tabela2 - Predição da Atividade Antioxidante do OE de <i>Pimenta dioica</i> através por meio do software PASS Online.....	42

LISTA DE SIGLAS

(CE₅₀/IC₅₀)– Concentração Efetiva 50%

(CE₉₀/IC₉₀)- Concentração Efetiva 90%

2D- Bidimensional

3D- Tridimensional

DMSO– Dimetilsulfóxido

DPPH- 2,2-difenil-1-picrilhidrazil

g– Grama

h– Hora

GC-MS - Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas

m/v – Massa por volume

mg/L – Miligrama por litro

min – Minuto

mL – Mililitro

nm – Nanômetro

OE – Óleo Essencial

Pa- Provável ativo

Pi – Provável inatividade

ppm- Parte por milhão

SD- Sequência didática

UFMA – Universidade Federal do Maranhão

UV/VIS – Espectroscopia no Ultravioleta Visível

v/v – Volume por volume

µg – Micrograma

µL – Microlitro

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	8
2. OBJETIVOS	11
2.1. OBJETIVO GERAL.....	11
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	11
3. RESULTADOS E DISCUSSÃO- CAPÍTULO 1 – LIVRO	12
STUDY IN SILICO.....	12
RESUMO	17
1. INTRODUCTION.....	20
2. OBJECTIVES	26
2.1. General Purpose	26
2.2. Specific objectives	26
3. METHODOLOGY	27
3.1. Extraction and characterization of Pimento dioica essential oil.....	27
3.2. In silico activity prediction	28
3.3. Didactic sequence	29
3.4. Antioxidant activity by scavenging DPPH radicals.....	30
4. RESULTS AND DISCUSSION.....	31
4.1. High Performance Liquid Chromatography Coupled to Mass Spectrometry.....	31
4.2. Antioxidant activity prediction.....	33
4.3. Comparison with antioxidant actions	35
4.4. Formulated didactic sequences	36
4.4.1. 1st Stage – Presentation of the theme	36
4.4.2. Objectives:	36
4.4.3. Methodology	37
4.4.4. Activities.....	38
4.4.5. Teaching materials	38
4.4.6. 2nd Stage – Theoretical explanation of the contents of organic functions	39
4.4.7. Objectives	39
4.4.8. Methodology	40
4.4.9. Activities.....	40
4.4.10. Teaching material.....	40
4.4.11. 3rd Moment – use of the pass online software	41
4.4.12. Objectives	41
4.4.13. Methodology	42
4.4.14. Activities.....	43
4.4.15. Teaching material.....	43
4.4.16. 4th MOMENT – EVALUATION.....	44

4.4.17.	Objectives	44
4.4.18.	Methodology	45
4.4.19.	Teaching material.....	46
5.	CONCLUSION	47
	REFERENCES	48
	UTILIZAÇÃO DO PROGRAMA PASS ONLINE PARA IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS ATIVOS NO ÓLEO ESSENCIAL DE <i>Pimenta dioica</i> L. COMO UMA ABORDAGEM PEDAGÓGICA NA ÁREA DE QUÍMICA.....	54
	ABSTRACT	53
	RESUMO 56	
1.	INTRODUÇÃO.....	59
2.	OBJETIVOS.....	65
2.1.	Objetivo Geral	65
2.2.	Objetivos específicos.....	65
3.	METODOLOGIA	66
3.1.	Extração e caracterização do Óleo essencial de <i>Pimenta dioica</i>	66
3.2.	Predição de atividade in sílico	67
3.3.	Sequência didática	68
3.4.	Atividade antioxidante por eliminação de radicais DPPH.....	69
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	71
4.1.	Cromatografia Líquida de Alta Eficiência Acoplada a Espectrometria de Massas. 71	
4.2.	Predição de atividade Antioxidantes	73
4.3.	Comparativo com ações antioxidantes	75
4.4.	Sequências didáticas formuladas	76
4.4.1.	1ª Etapa – Apresentação da temática.....	76
4.4.2.	Objetivos:	76
4.4.3.	Metodologia	77
4.4.4.	Atividades	78
4.4.5.	Materiais didáticos.....	78
4.4.6.	2ª Etapa – Explicação teórica dos conteúdos de funções orgânicas	79
4.4.7.	Objetivos	79
4.4.8.	Metodologia	80
4.4.9.	Atividades	80
4.4.10.	Material didático.....	80
4.4.11.	3º Momento – utilização do software pass online	81
4.4.12.	Objetivos 81	
4.4.13.	Metodologia	82
4.4.14.	Atividades	83
4.4.15.	Material didático.....	83
4.4.16.	4º MOMENTO – AVALIAÇÃO	84
4.4.17.	Objetivos 84	
4.4.18.	Metodologia	85
4.4.19.	Material didático.....	86
5.	CONCLUSÃO	87

REFERÊNCIAS.....	88
-------------------------	-----------

1. INTRODUÇÃO

Constata-se hoje uma intensa tendência a empregar as tecnologias digitais como recurso no processo de ensino e aprendizagem, visto a inclusão e popularização destas tecnologias e a demanda de mídias digitais no cotidiano dos sujeitos. Dessa forma, refletir e organizar metodologias diferenciadas, que possam ser empregadas para a dissipação do conhecimento de maneira que propiciem aprendizagens significativas e colaborativas são táticas que, possivelmente proporcionarão saldos mais reais na procura de melhores desempenhos nos processos de aprendizagem (GUERIN, 2023).

Entretanto, a tecnologia é essencial no processo de visualização, e ela, por sua vez, ocupa um papel pedagógico fundamental na compreensão de conteúdos científicos. Assim se percebe a importância do estudo das tecnologias no ensino do componente curricular, uma vez que, existem muitos obstáculos que impedem os professores a usarem os recursos tecnológicos, dentre eles é a não formação específica e também pelo fato de a escola não disponibilizar laboratório de Informática. (CAMPOS et al., 2011).

O uso de um recurso didático nas aulas leva os alunos a aprenderem o conteúdo de uma forma dinâmica e pensativa e não de uma forma já pronta e acabada, pois o recurso dispõe da capacidade de pensar do aluno, ou seja, é o momento em que o estudante coloca a mente para funcionar. O uso da tecnologia na sala de aula faz com que o aluno se sinta motivado a aprender de maneira dinâmica e que traga resultados positivos (OLIVEIRA & CUNHA, 2021).

Sendo assim, é necessário refletir sobre quais os caminhos possíveis para a aprendizagem diante da nova realidade de trabalho dos professores que se iniciaram posteriormente como tutores online em cursos superiores. Encontrar trilhas para a (re)construção da identidade profissional desse educador pode torná-lo mais flexível à mudança em uma modalidade de educação em que sua experiência e seu conhecimento constituídos no magistério presencial podem se revelar insuficientes ou inadequados para o desenvolvimento da docência online. Nesse sentido, os saberes docentes renovados devem se mostrar úteis na organização de uma rotina de trabalho tutorial em licenciaturas cujos espaços de ensino e aprendizagem integram seus participantes em tempos e espaços diversos por meio das tecnologias digitais de interação e comunicação (CARMO & FRANCO, 2019).

Nesse contexto, a Química é citada pelos alunos como uma das mais difíceis. São diversos os fatores que podem resultar em dificuldades de aprendizagem, entre elas a forma descontextualizada como a Química é apresentada no ensino fundamental gerando nos alunos um grande desinteresse pela matéria no ensino médio, bem como dificuldade de aprender e de relacionar o conteúdo estudado ao cotidiano, mesmo a Química estando presente na realidade (NASCIMENTO, 2014).

Diante desta realidade, o recurso da web de livre acesso PASS Online é apresentado. Este recurso é projetado para a previsão dos espectros de atividade biológica de compostos orgânicos com base em suas fórmulas estruturais para mais de 4000 tipos de atividade biológica com precisão média acima de 95%. A previsão é baseada em uma análise das relações estrutura-atividade no conjunto de treinamento contendo informações sobre a estrutura e atividade biológica de mais de 300.000 compostos orgânicos. As possibilidades e limitações desta abordagem são descritas. Recomendações são dadas para interpretar os resultados da previsão. Exemplos são dados para o uso prático do recurso da web PASS Online, a fim de estabelecer prioridades para síntese química e testes biológicos de substâncias com base em resultados de previsão (FILIMONOV, 2014).

Portanto, é utilizado o óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) como objeto de estudo, na qual é extraído das folhas e bagas e é utilizado na indústria alimentar, especialmente na indústria da carne, como ingrediente em produtos cosméticos e no tratamento de algumas doenças do aparelho digestivo como diabetes, hipertensão, neuralgia, estresse etc. (RAO; NAVINCHANDRA; JAYAVEERA, 2012).

Figure 1. *Pimenta dioica*



Fonte: <https://powo.science.kew.org/taxon/urn:lsid:ipni.org>

Os estudos revelaram que o óleo essencial de *P. dioica* (L.) tem uma boa atividade sequestradora de radicais livres no caso do radical hidroxila, radical DPPH, ânion superóxido, e que inibe a formação de dienos conjugados (JIROVETZ *et al.*, 2007; RAO *et al.*, 2012).

Dentre a imensidão de produtos vegetais, os óleos essenciais merecem atenção especial. São misturas complexas de hidrocarbonetos e hidrocarbonetos oxigenados provenientes das vias isoprenoides, constituídas principalmente por monoterpenos e sesquiterpenos. Os óleos essenciais são produzidos e secretados por tricomas glandulares, tecidos secretores especializados difundidos na superfície dos órgãos das plantas, particularmente flores e folhas (IRITI, 2006).

Com base nessas suposições, o objetivo deste estudo foi identificar, por meio de um estudo *in silico*, as moléculas naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) extraído em laboratório que poderiam desempenhar uma ação antioxidante, semelhante a estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas baseado nessa interação.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

- Realizar uma análise computacional para identificar as moléculas naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) que possuem potencial ação antioxidante, buscando estabelecer um paralelo com estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas com base nessa interação.

2.2. Objetivos Específicos

- Caracterizar quimicamente o óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.)
- Determinar a Concentração Eficiente a 50 % (CE₅₀) para atividade antioxidante do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) pelo método de descoloração do radical DPPH.
- Avaliar a atividade *in silico* dos constituintes químicos do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) através de predições obtidas pelo PASS Online.
- Elaborar sequências didáticas em prol do assunto de Funções Orgânicas, moléculas bioativos e de uso dos softwares para o ensino de química.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO- CAPÍTULO 1 – LIVRO

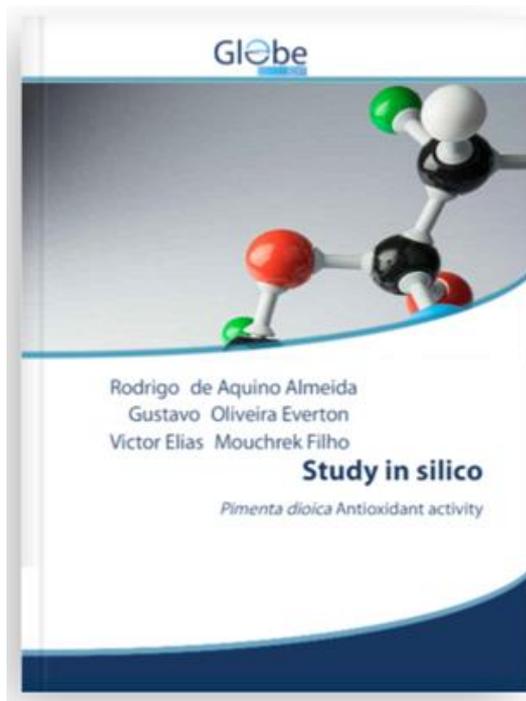
Título: *Study in silico*

Autores: Rodrigo de Aquino
Almeida Victor Elias
Mouchrek Filho, Gustavo
Oliveira Everton.

Área: Química

Editora: Editorial Globeedit

Classificação: L3



STUDY IN SILICO**Rodrigo de Aquino Almeida****Victor Elias Mouchrek Filho****Gustavo Oliveira Everton**

ABSTRACT

we sought to identify, through computational analysis, natural substances present in the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) in the laboratory that could have antioxidant properties, similar to experimental studies for teaching Organic Functions based on this relationship. To acquire the essential oil, the hydrodistillation method was used using a Clevenger extractor made of glass, which was connected to a round bottom flask and heated by an electric blanket. For this, the bark of the plant was ground and then distilled water was added in a proportion (1:8) in relation to the plant material inside the flask. For chemical characterization, gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) was used, using the AMDIS software (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System) to identify the components present in the sample. Then, for the *in silico* activity, the PASS Online and PubChem programs were used, in order to establish the antioxidant activity through molecular configurations. Regarding the didactic sequence, the topic of antioxidants related to the content of organic

functions was discussed, developing chained activities according to the research pattern based on the similarity of the identified compounds. For antioxidant activity, the DPPH radical decolorization method was used. According to the GC-MS methodology, 7 chemical constituents were identified, the majority being Eugenol, corresponding to 85.68%. Subsequently, through computational analysis, the activity *in silico* revealed that the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) has an active potential (Pa) of 0.585, indicating a moderate and predominant antioxidant action. For comparison purposes, the consistency of the *in silico* study was validated through *in vitro* experimentation. The EO showed active antioxidant activity against the DPPH method, with a 50% Efficient Concentration (EC50) of 39.54 mg/L. Additionally, using the findings of the research by similarity, the Pedagogical Sequence (SP) was developed, dealing with the theme of bioactive compounds and antioxidants in conjunction with the PASS Online server and PubChem focused on the topic of Organic Functions. This educational approach is primarily focused on encouraging students' perception of the

appropriate use of these substances, while promoting an immersive experience in visualizing these structures in three dimensions. This offers facilities in the study of configurations, molecular compositions and stereochemistry.

Keywords: Pedagogical Sequence; Antioxidant; Organic Functions.

RESUMO

Buscou-se identificar, por meio de análise computacional, substâncias naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) em laboratório que poderiam ter propriedades antioxidantes, semelhantes a estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas com base nessa relação. Para adquirir o óleo essencial, foi utilizado o método de hidrodestilação utilizando um extrator de Clevenger feito de vidro, o qual estava conectado a um balão de fundo redondo e aquecido por uma manta elétrica. Para isso, as folhas da planta foram moídas e, em seguida, adicionou-se água destilada em uma proporção de (1:8) em relação ao material vegetal dentro do balão. Para caracterização química empregou-se a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS), sendo utilizado o software AMDIS (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System) para identificar os componentes presentes na amostra. Em seguida, para a atividade *in silico* foram empregados os programas PASS Online e PubChem, com o intuito de estabelecer a atividade antioxidante por meio das

configurações moleculares. Sobre a sequência didática, discutiu-se o tema dos antioxidantes relacionado ao conteúdo das funções orgânicas, desenvolvendo atividades encadeadas de acordo com o padrão de pesquisa baseada na similaridade dos compostos identificados. Para atividade antioxidante utilizou-se o método de descoloração de radicais DPPH. De acordo com metodologia de CG-EM foram identificados 7 constituintes químicos, sendo majoritário o Eugenol, correspondendo a 85,68%. Posteriormente, por meio da análise computacional, a atividade *in silico* revelou que o óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) possui um potencial ativo (Pa) de 0,585, indicando uma ação antioxidante moderada e predominante. QQPara efeito de comparação, validou-se a consistência do estudo *in silico* por meio de experimentação *in vitro*. O OE apresentou atividade antioxidante ativa frente ao método DPPH, com uma Concentração Eficiente 50% (CE₅₀) de 39,54 mg/L. Adicionalmente, utilizando os achados da investigação por semelhança, desenvolveu-se a Sequência Pedagógica (SP), tratando da temática de compostos bioativos e antioxidantes em conjunto com o servidor do PASS Online e

PubChem voltados para o tópico de Funções Orgânicas. Essa abordagem educacional tem como foco principal incentivar a percepção dos estudantes em relação à utilização apropriada dessas substâncias, ao mesmo tempo em que promove uma experiência imersiva na visualização dessas estruturas em três dimensões. Isso oferece facilidades no estudo das configurações, composições moleculares e na Estereoquímica.

Palavras-chave: Sequência Pedagógica; Antioxidante; Funções Orgânicas.

1. INTRODUCTION

Today, there is an intense tendency to use digital technologies as a resource in the teaching and learning process, given the inclusion and popularization of these technologies and the demand for digital media in the daily lives of subjects. Thus, reflecting on and organizing different methodologies that can be used to disseminate knowledge in a way that provides meaningful and collaborative learning are tactics that will possibly provide more real balances in the search for better performances in the learning processes. (GUERIN, 2023).

However, technology is essential in the visualization process, and it, in turn, plays a fundamental pedagogical role in understanding scientific content. Thus, the importance of studying technologies in the teaching of the curricular component is perceived, since there are many obstacles that prevent teachers from using technological resources, among them is the lack of specific training and also the fact that the school does not provide a laboratory for Computing. (CAMPOS et al., 2011)

The use of a didactic resource in classes leads students to learn the content in a dynamic and thoughtful way and not in a ready-made and finished way, as the resource has the student's ability to think, that is, it is the moment when the student puts his mind to work. The use of technology in the classroom makes the student feel motivated to learn dynamically and that brings positive results. (OLIVEIRA & CUNHA, 2021)

Therefore, it is necessary to reflect on the possible paths for learning in the face of the new work reality of teachers who later started as online tutors in higher education courses. Finding paths for the (re)construction of this educator's professional identity can make them more flexible to change in an education modality in which their experience and knowledge constituted in face-to-face teaching may prove insufficient or inadequate for the development of online teaching. In this sense, renewed teaching knowledge should prove useful in organizing a tutorial work routine in undergraduate courses whose teaching and learning spaces integrate their participants in

different times and spaces through digital technologies of interaction and communication. (CARMO & FRANCO, 2019)

In this context, Chemistry is cited by students as one of the most difficult. There are several factors that can result in learning difficulties, including the decontextualized way in which Chemistry is presented in elementary school, generating in students a great lack of interest in the subject in high school, as well as difficulty in learning and relating the content studied to everyday life., even though Chemistry is present in reality. (BIRTH, 2014)

Faced with this reality, the free access web resource PASS Online is presented. This feature is designed for prediction of biological activity spectra of organic compounds based on their structural formulas for more than 4000 types of biological activity with average accuracy above 95%. The prediction is based on an analysis of structure-activity relationships in the training set containing information on the structure and biological activity of over 300,000 organic compounds. The possibilities and limitations of this approach are described. Recommendations are given for interpreting the

forecast results. Examples are given for the practical use of the PASS Online web resource in order to establish priorities for chemical synthesis and biological testing of substances based on prediction results. (FILIMONOV, 2014)

Pimenta dioica (L.) is used as an object of study, in which it is extracted from the leaves and berries and is used in the food industry, especially in the meat industry, as an ingredient in cosmetic products and in the treatment of some diseases of the digestive system such as diabetes, hypertension, neuralgia, stress, etc. (RAO NAVINCHANDRA, & JAYAVEERA, 2012).

Figure 1. *Pimenta dioica*



Source: <https://powo.science.kew.org/taxon/urn:lsid:ipni.org>

The studies revealed that the essential oil of *P. dioica* (L.) has a good free radical scavenging activity in the case of hydroxyl radical, DPPH radical, superoxide anion, and that it inhibits the formation of conjugated dienes (JIROVETZ et al., 2007; RAO et al., 2012).

Among the multitude of plant products, essential oils deserve special attention. They are complex mixtures of hydrocarbons and oxygenated hydrocarbons from the isoprenoid pathways, consisting

mainly of monoterpenes and sesquiterpenes. Essential oils are produced and secreted by glandular trichomes, specialized secretory tissues widespread on the surface of plant organs, particularly flowers and leaves. (IRITI, 2006)

Based on these assumptions, the objective of this study was to identify, through an *in silico* study, the natural molecules present in the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) extracted in the laboratory that could perform an antioxidant action, similar to experimental studies for the teaching of Organic Functions based on this interaction.

2. OBJECTIVES

2.1. General Purpose

- Perform a computational analysis to identify the natural molecules present in the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) that have potential antioxidant action, seeking to establish a parallel with experimental studies for teaching Organic Functions based on this interaction.

2.2. Specific objectives

- Chemical characterize of *Pimenta dioica* (L.) essential oil.
- Determine the 50% Efficient Concentration for antioxidant activity of *Pimenta dioica* (L.) essential oil by the DPPH radical decolorization method.

- Evaluate the *in silico* activity of the chemical constituents of *Pimenta dioica* (L.) essential oil through predictions obtained by PASS Online.

- Elaborate didactic sequences *in silico* of the subject of Organic functions, bioactive molecules and the use of software for teaching chemistry.

3. METHODOLOGY

3.1. Extraction and characterization of *Pimento dioica* essential oil

For essential oil extraction, the hydrodistillation technique was applied with a glass Clevenger extractor coupled to a round-bottom flask placed in an electric blanket as a source of heat. 105 g of ground vegetable peels were used, adding distilled water (1:8) to the plant material contained in the flask.

Hydrodistillation was conducted at 100°C for 3 hours and then the extracted essential oil was collected. The essential oil was dried by percolation with anhydrous sodium sulfate (Na₂SO₄). Samples

were stored in amber glass vials under 4°C refrigeration. Subsequently submitted to analysis.

The essential oil constituents were identified by gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS). For the identification of the compounds in the sample, the program AMDIS (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System) was used.

3.2. In silico activity prediction

For the prediction of biological activity, PASS Online (<http://www.way2drug.com/PASSOnline/index.php>) was used, a server that predicts the biological activity of compounds, taking into account pharmacological characteristics, mechanisms of action, metabolic interactions and enzyme transporters, among others. PASS Online is based on the structure-activity relationship, with an average forecast accuracy of 96% (FILIMONOV et al., 2014).

The set of bioactive compounds obtained in the HPLC-MS assay were selected to predict the biological activity spectra. The canonical

structures function as the formula of these phytochemical drugs and these were obtained from PubMed (www.pubchem.ncbi.nlm.nih.gov). The canonical structures of the individual compounds were pasted into the PASS software for the prediction of antioxidant activity, obtaining values of activity (Pa) and probable inactivity (Pi) of each compound, these were recorded and compared with the drug standard (Ascorbic acid, BHT) .

3.3. Didactic sequence

The didactic sequence (SD) will focus on the approach to antioxidant activity and the study of the content of Organic Functions, based on molecular structures. For this, educational software will be used to demonstrate activity predictions, since the use of virtual models provides greater availability, flexibility and variety in the study of the conformations of organic molecules (FATEMAH; RASSOL; HABIB, 2020).

SDs are a concatenated set of activities or teaching strategies that, when planned, applied together and in a specific chronology, can

lead to a more efficient learning process in relation to the content covered in classes. Thus, the proposition of an SD is presumed based on the results from the similarity research. These were based on specialized studies by Silva (2022).

3.4. Antioxidant activity by scavenging DPPH radicals

To compare the result obtained virtually with the Pass Online software, the antioxidant activity was performed in vitro using the method used to determine the antioxidant capacity of extracts and fractions, adapted from Brand-Williams, Cuvelier and Berset (1995). 10 μ L of extracts and fractions were mixed with 990 μ L of ethanol, 2 mL of DPPH radical solution, making 4 mL of ethanol, with subsequent homogenization. The mixture was allowed to react in the dark for 30 minutes. Sample absorption (A_s) was recorded at 540 nm in a UV-Vis spectrophotometer. The elimination of DPPH radicals was expressed in percentage and the Efficient Concentration 50% (EC_{50} / IC_{50}) and 90% (EC_{90} / IC_{90}) able to inhibit 50% and 90%, respectively, of the elimination was expressed in ppm.

4. RESULTS AND DISCUSSION

4.1. High Performance Liquid Chromatography Coupled to Mass Spectrometry.

Table 1 presents the chemical constituents through Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (GC-MS).

Table 1. Chemical characterization of the EO of *Pimenta dioica* (L.)

Peak	RT (min)	NIST 08 Components	% Content
1	8,772	octenol	1.177
2	9.164	myrcene	2,643
3	10,488	limonene	1,621
4	13,251	Linalool	0.864
5	16.122	terpineol	0.933
6	19.026	Chavicol	6,592
7	22.755	eugenol	85.68

Source: Own author(2023)

In this study, 7 compounds were identified, the majority being Eugenol (85.68%). Barros et al, (2020) present the chemical composition of this same species emphasizing the presence of Eugenol (76.98%), Phenol (5.88%), Sesquiterpenes (1.94%), α - Cubene (0.35%), Caryophyllene (0.09%), α - Caryophyllene (0.08%), α - Cadinene (0.19%), α - Murolene (0.22%).

4.2. Antioxidant activity prediction

Table 2 presents the results of the prediction of Antioxidant Activities of the EO of *Pimenta dioica* (L.) through the PASS Online software.

Table 2. Prediction of the Antioxidant Activity of the EO of *Pimenta dioica* (L.) through the PASS Online software.

Identified compounds	Pa	Pi	Percentage (%) GC-MS	Pa *%GC-MS
eugenol	0.489	0.007	0.8569	0.419
Chavicol	0.540	0.005	0.0695	0.038
terpineol	0.913	0.020	0.0930	0.085
Linalool	0.380	0.014	0.0087	0.003
limonene	0.157	0.094	0.0162	0.025
myrcene	0.470	0.008	0.0264	0.012
octenol	0.204	0.053	0.0117	0.0248

Source: Own author(2023)

In this study, a P_a for the EO of *Pimento dioica* (L.) was found, based on the value of the sum of the column P_a *% GC-MS of Table 2 of 0.585. If we select in the range $0.5 < P_a < 0.7$, the chances of detecting experimental activity will be moderate, but the compounds will be less similar to known pharmaceutical agents (FILIMONOV et al., 2014).

Consequently, through the program employed, it is possible to state that the essential oil examined has very high antioxidant properties. Thus, the empirical experiment was conducted to ensure the reliability of the result, providing an educational approach using computer programs.

4.3. Comparison with antioxidant actions

Table 3 presents experimental results for antioxidant actions.

Table 3. Experimental results for antioxidant activity.

	CI ₅₀ mg/L	Equation parameters	R ²
<i>dioecious pepper</i>	39.57	A= 1.0067 B= 10.189	0.9921

Source: Own author(2023)

The result found for IC₅₀ is classified as active for antioxidant activity, thus correlating with results obtained in the in silico test with PASS Online software.

4.4. Formulated didactic sequences

4.4.1. 1st Stage – Presentation of the theme

This stage will last for three classes lasting from 45 minutes to 1 hour each class.

4.4.2. Objectives:

- Expose the class program, introducing the subjects to be addressed in the following classes and, mentioning the planning of tasks.

- Examine students' prior understanding of the subject of antioxidants and the materials previously studied.

- Explain specific details about the advantages, relevance of use and progress of bioactive substances and establish connections with organic chemistry topics.

4.4.3. Methodology

In the first two meetings, the structure of the discipline and the proposed tasks will be discussed, using resources such as slides or physical material. In addition, the use of educational software to present bioactive molecules will be briefly mentioned.

After that, it is suggested to carry out an activity to assess the students' prior knowledge in relation to the subject. In addition, in the next two classes, a presentation is expected to be made, using slides and printed materials, on the definition of antioxidants, highlighting

the main compounds used and their impacts on the environment, as well as addressing their application, effectiveness and methods of obtaining and preparation.

For this purpose, it is possible to carry out the collection of images of molecular configurations, statistical information on the use of these substances and their dangers and, thus, relate to the analysis of chemistry.

4.4.4. Activities

In order to identify the students' prior knowledge, it is suggested that they be evaluated through a group discussion, addressing aspects relevant to the subject in order to create a relaxed and engaging environment. Alternatively, it is also possible to use a questionnaire with open questions to obtain subjective insights.

4.4.5. Teaching materials

- PubChem Database
- Printed materials (posters, flyers, etc.)

- Notebook
- Multimedia projector
- Sites and scientific articles
- Slides (Power Point)

4.4.6. 2nd Stage – Theoretical explanation of the contents of organic functions

This stage will last for eight classes of 45 minutes to 1 hour each class.

4.4.7. Objectives

- Revisit fundamental concepts of organic chemistry in order to simplify the understanding of subsequent topics.

- Explore subjects related to Hydrocarbons, organic compounds containing carbon and hydrogen, Organic Functions containing oxygen, nitrogen and halogens, as well as the study of the different spatial configurations of organic compounds.

4.4.8. Methodology

With this objective in mind, we suggest a conceptual exposition of the material, using a whiteboard or slide presentations. To achieve this purpose, the use of flat shapes (2D) of antioxidants (obtained from the PubChem platform) is assumed, highlighting the characteristics of the functional groups and the distinction between them.

4.4.9. Activities

After completing the explanation of each organic function, it is assumed that activities are carried out on the board, in printed documents or in slide presentations, which require the student to understand the topic addressed.

4.4.10. Teaching material

- eraser

PubChem database

- Textbook
- Notebook
- Paint brushes
- Multimedia projector
- White board
- Slides (Power Point)

4.4.11. 3rd Moment – use of the pass online software

This stage will last for three classes of 45 minutes to 1 hour each class.

4.4.12. Objectives

PASS Online educational program as a tool to display representations of molecules of natural compounds discovered

during research, to discern the different organic functions present in these substances.

- Relate the models identified in PASS Online with the 2D figures covered in the theoretical lectures.

- Determine the physical organization of the bonds and functional groups of molecules.

4.4.13. Methodology

From the concise explanation of the main identifying characteristics of organic functions, students will be given the option of drawing the structures of natural compounds on a whiteboard or receiving printed copies. After that, it is suggested that they be imported into the PASS Online software through PubChem, allowing the visualization of the modified structures.

In this way, it is possible to contrast the two-dimensional and three-dimensional molecular patterns, recognizing the location, the spatial conformation of the chain and the organic structures found in each substance, particularities that are challenging to observe in flat

representations. Faced with this situation, it is possible to notice the disparities in molecular visualization between the 2D and 3D formats, noting the present divergences and highlighting the relevance of the use of three-dimensional models.

4.4.14. Activities

During the activity, students will be encouraged to recognize the organic functions found in molecules, as well as their stereochemistry. In addition, it will be possible to promote a moment of relaxation, in which students will have the opportunity to discuss specific products whose composition arouses their curiosity.

In order to achieve this goal, the compounds of the active ingredients can be obtained and examined in PubChem, thus making it possible to nurture curiosity about the components of products and contribute to the understanding of chemistry in our daily lives.

4.4.15. Teaching material

- Eraser

PubChem database

- Printed materials
- Notebook
- Brush
- Multimedia project
- White board

PASS Online software

4.4.16. 4th MOMENT – EVALUATION

This stage will last for two classes of 45 minutes to 1 hour each class.

4.4.17. Objectives

- Check the students' proficiency in relation to the topics taught.
- Check the contribution of using the software for learning the content of Organic Functions.

- Evaluate the development of students in relation to knowledge about antioxidants and their association with the chemistry discipline.

4.4.18. Methodology

In order to achieve this, it is supposed to carry out a written test, consisting of 3 subjective questions, in which explicit representations are provided in two dimensions of natural products, so that students can identify the organic functions present. Then, we will use PASS Online, presenting the same configurations mentioned in the previous analysis, in order to establish connections between structures, identify and visualize the Stereochemistry of molecules in three-dimensional models.

Finally, it is assumed that meetings will be held for discussion, addressing the subject of antioxidants, with the aim of assessing the students' knowledge regarding the explanation of the dangers and the relevance of their development, respectively.

4.4.19. Teaching material

- Printed evaluation
- Puchem databases

5. CONCLUSION

Educational software can play an important role in the development of dynamic and innovative teaching proposals. In the specific context of activity prediction oil antioxidant _ essential extract of *Pimenta dioica* (L.), this software can be used to create models and simulations that allow students to explore and understand the principles behind this activity.

Lastly, it appears that through the use of educational programs one can create a lively and revolutionary teaching approach through activity prediction . oil antioxidant *Pimenta dioica* (L.) essential oil. Within this situation, through the elaboration of a structured and planned didactic sequence, the objective of integrating and adding was achieved, giving priority to the daily situations of the students related to the themes explored.

In short, the use of educational software can contribute to the development of dynamic and innovative teaching proposals on activity prediction oil antioxidant _ essential oil of *Pimenta dioica* (L.).

These software offer molecular modeling capabilities, simulations, virtual experiments and interactivity, reinforcing student learning and encouraging their participation. active in the learning process.

REFERENCES

•BARROS GOMES, PRC Chemical composition and antibacterial activity of the essential oil of *Pimenta dioica* fruits . **Colombian Magazine of Chemical- Pharmaceutical Sciences** , v. 49, no. 3, pg. 656-674, 2020.

•BRAND-WILLIAMS, W.; CUVELIER, ME; BERSET, CLWT Use of a free radical method I'm evaluate antioxidant activity . **LWT-Food science and Technology** , v. 28, no. 1, p. 25-30, 1995.

•CAMPOS, CR; JACOBINI, OR; WODEWOTZKI, MLL; FERREIRA, DHL Statistical education in the context of critical education. **Bolema Magazine** , vol. 24, nº 39, p. 473-494, Aug. 2011

•CARMO, ROS; FRANCO, AP From face-to-face teaching to online teaching: university professors' learning in distance education. **Education in Review** , v. 35, p. e210399, 2019.

•DO NASCIMENTO, GB et al. **The difficulties of students and teachers in teaching and learning chemistry in high school** . 2014.

•FATEMAH, A.; RASSOOL, S.; HABIB, U. Interactive 3D Visualization of Chemical Structure Diagrams Embedded in Text I'm aid Spatial Learning Process of Students . **J.Chem . _ Educ .** , v. 97, no. 4, p. 992–1000, 2020.

•FILIMONOV, DA et al. Prediction of the biological activity spectrum of organic compounds using the PASS online web resource . **Chemistry of heterocyclic Compounds** , v. 50, p. 444-457, 2014.

•FILIMONOV, DA, et al. Prediction of biological activity spectra of organic compounds using the PASS online resource. **Chemistry of heterocyclic Compounds** , v. 50, p. 444-457, 2014.

•GUERIN, CS; COUTINHO, C.; SGANZERLA, FL Teaching Biology in the Digital Age: An Integrative Review. **Valore Magazine** , [SI .], v. 8, p. e-8012, Mar. 2023.

•IRITI, M. et al. Histocytochemistry and scanning electron microscopy of lavender glandular trichomes after conventional and microwave-assisted hydrodistillation of essential oils: a comparative study. **Magazine of Flavors and Fragrances** , v. 21, no. 4, pg. 704-712, 2006.

•JIROVETZ , et al. Spices: chemical composition and antioxidant properties of Lindl Pepper . Essential Oils, Part 1: *Pepper Dioica* (L.) Merr ., Jamaica Leaf Oil, **ErNahrung / Nutrition** , Vol. 2, pp. 55-62, 2007.

•OLIVEIRA, ER; CUNHA, DS The use of technology in the teaching of Mathematics: contributions of the GeoGebra software in the teaching of Function in the 1st grade. **Public Education Magazine** , v. 21, nº 36, September 28, 2021.

•RAO, PS; NAVINCHANDRA, S.; JAYAVEERA, KN An important spice, *Pimento dioica* (Linn .) Merrill : A review. **international Current Pharmaceutical Journal** , v. 1, no. 8, pg. 221-225, 2012.

•SILVA, JNM **Three-dimensional models in the study of ligand- receptor interactions : strategies for teaching organic chemistry** . 2022. 54 p. Completion of course work (Chemistry Degree) – Instituto Federal do Piauí, Cocal, 2022

**UTILIZAÇÃO DO PROGRAMA PASS ONLINE PARA
IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS ATIVOS NO
ÓLEO ESSENCIAL DE *Pimenta dioica* L. COMO UMA
ABORDAGEM PEDAGÓGICA NA ÁREA DE QUÍMICA**

Rodrigo de Aquino Almeida

Victor Elias Mouchrek Filho

Gustavo Oliveira Everton

ABSTRACT

We sought to identify, through computational analysis, natural substances present in the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) in the laboratory that could have antioxidant properties, similar to experimental studies for teaching Organic Functions based on this relationship. To acquire the essential oil, the hydrodistillation method was using to a Clevenger extractor made of glass, which was connected to a round bottom flask and heated by an electric blanket. For this, the bark of the plant was ground and then distilled water was added in a proportion (1:8) in relation to the plant material inside the flask. For chemical characterization, gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) was used, using the AMDIS software (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System) to identify the components present in the sample. Then, for the *in silico* activity, the PASS Online and PubChem programs were used, in order to establish the antioxidant activity through molecular configurations. Regarding the didactic sequence, the topic of antioxidants related to the content of organic functions was

discussed, developing chained activities according to the research pattern based on the similarity of the identified compounds. For antioxidant activity, the DPPH radical decolorization method was used. According to the GC-MS methodology, 7 chemical constituents were identified, the majority being Eugenol, corresponding to 85.68%. Subsequently, through computational analysis, the activity *in silico* revealed that the essential oil of *Pimenta dioica* (L.) has an active potential (Pa) of 0.585, indicating a moderate and predominant antioxidant action. For comparison purposes, the consistency of the *in silico* study was validated through *in vitro* experimentation. The EO showed active antioxidant activity against the DPPH method, with a 50% Efficient Concentration (EC50) of 39.54 mg/L. Additionally, using the findings of the research by similarity, the Pedagogical Sequence (SP) was developed, dealing with the theme of bioactive compounds and antioxidants in conjunction with the PASS Online server and PubChem focused on the topic of Organic Functions. This educational approach is primarily focused on encouraging students' perception of the appropriate use of these substances, while

promoting an immersive experience in visualizing these structures in three dimensions. This offers facilities in the study of configurations, molecular compositions and stereochemistry.

Palavras-chave: Sequência Pedagógica; Antioxidante; Funções Orgânicas.

.

RESUMO

Buscou-se identificar, por meio de análise computacional, substâncias naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) em laboratório que poderiam ter propriedades antioxidantes, semelhantes a estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas com base nessa relação. Para adquirir o óleo essencial, foi utilizado o método de hidrodestilação utilizando um extrator de Clevenger feito de vidro, o qual estava conectado a um balão de fundo redondo e aquecido por uma manta elétrica. Para isso, as folhas da planta foram moídas e, em seguida, adicionou-se água destilada em uma proporção de (1:8) em relação ao material vegetal dentro do balão. Para caracterização química empregou-se a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), sendo utilizado o software AMDIS (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System) para identificar os componentes presentes na amostra. Em seguida, para a atividade *in silico* foram empregados os programas PASS Online e PubChem, com o intuito de estabelecer a atividade antioxidante por meio das

configurações moleculares. Sobre a sequência didática, discutiu-se o tema dos antioxidantes relacionado ao conteúdo das funções orgânicas, desenvolvendo atividades encadeadas de acordo com o padrão de pesquisa baseada na similaridade dos compostos identificados. Para atividade antioxidante utilizou-se o método de descoloração de radicais DPPH. De acordo com metodologia de CG-EM foram identificados 7 constituintes químicos, sendo majoritário o Eugenol, correspondendo a 85,68%. Posteriormente, por meio da análise computacional, a atividade *in silico* revelou que o óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) possui um potencial ativo (Pa) de 0,585, indicando uma ação antioxidante moderada e predominante. Para efeito de comparação, validou-se a consistência do estudo *in silico* por meio de experimentação *in vitro*. O OE apresentou atividade antioxidante ativa frente ao método DPPH, com uma Concentração Eficiente 50% (CE₅₀) de 39,54 mg/L. Adicionalmente, utilizando os achados da investigação por semelhança, desenvolveu-se a Sequência Pedagógica (SP), tratando da temática de compostos bioativos e antioxidantes em conjunto com o servidor do PASS Online e

PubChem voltados para o tópico de Funções Orgânicas. Essa abordagem educacional tem como foco principal incentivar a percepção dos estudantes em relação à utilização apropriada dessas substâncias, ao mesmo tempo em que promove uma experiência imersiva na visualização dessas estruturas em três dimensões. Isso oferece facilidades no estudo das configurações, composições moleculares e na Estereoquímica.

Palavras-chave: Sequência Pedagógica; Antioxidante; Funções Orgânicas.

1. INTRODUÇÃO

Constata-se hoje uma intensa tendência a empregar as tecnologias digitais como recurso no processo de ensino e aprendizagem, visto a inclusão e popularização destas tecnologias e a demanda de mídias digitais no cotidiano dos sujeitos. Dessa forma, refletir e organizar metodologias diferenciadas, que possam ser empregadas para a dissipação do conhecimento de maneira que propiciem aprendizagens significativas e colaborativas são táticas que, possivelmente proporcionarão saldos mais reais na procura de melhores desempenhos nos processos de aprendizagem. (GUERIN, 2023).

Entretanto, a tecnologia é essencial no processo de visualização, e ela, por sua vez, ocupa um papel pedagógico fundamental na compreensão de conteúdos científicos. Assim se percebe a importância do estudo das tecnologias no ensino do componente curricular, uma vez que, existem muitos obstáculos que impedem os professores a usarem os recursos tecnológicos, dentre eles é a não

formação específica e também pelo fato de a escola não disponibilizar laboratório de Informática. (CAMPOS et al, 2011)

O uso de um recurso didático nas aulas leva os alunos a aprenderem o conteúdo de uma forma dinâmica e pensativa e não de uma forma já pronta e acabada, pois o recurso dispõe da capacidade de pensar do aluno, ou seja, é o momento em que o estudante coloca a mente para funcionar. O uso da tecnologia na sala de aula faz com que o aluno se sinta motivado a aprender de maneira dinâmica e que traga resultados positivos. (OLIVEIRA & CUNHA, 2021)

Sendo assim, é necessário refletir sobre quais os caminhos possíveis para a aprendizagem diante da nova realidade de trabalho dos professores que se iniciaram posteriormente como tutores online em cursos superiores. Encontrar trilhas para a (re)construção da identidade profissional desse educador pode torná-lo mais flexível à mudança em uma modalidade de educação em que sua experiência e seu conhecimento constituídos no magistério presencial podem se revelar insuficientes ou inadequados para o desenvolvimento da docência online. Nesse sentido, os saberes docentes renovados devem

se mostrar úteis na organização de uma rotina de trabalho tutorial em licenciaturas cujos espaços de ensino e aprendizagem integram seus participantes em tempos e espaços diversos por meio das tecnologias digitais de interação e comunicação. (CARMO & FRANCO, 2019)

Nesse contexto, a Química é citada pelos alunos como uma das mais difíceis. São diversos os fatores que podem resultar em dificuldades de aprendizagem, entre elas a forma descontextualizada como a Química é apresentada no ensino fundamental gerando nos alunos um grande desinteresse pela matéria no ensino médio, bem como dificuldade de aprender e de relacionar o conteúdo estudado ao cotidiano, mesmo a Química estando presente na realidade. (NASCIMENTO,2014)

Diante desta realidade, o recurso da web de livre acesso PASS Online é apresentado. Este recurso é projetado para a previsão dos espectros de atividade biológica de compostos orgânicos com base em suas fórmulas estruturais para mais de 4000 tipos de atividade biológica com precisão média acima de 95%. A previsão é baseada em uma análise das relações estrutura-atividade no conjunto de

treinamento contendo informações sobre a estrutura e atividade biológica de mais de 300.000 compostos orgânicos. As possibilidades e limitações desta abordagem são descritas. Recomendações são dadas para interpretar os resultados da previsão. Exemplos são dados para o uso prático do recurso da web PASS Online, a fim de estabelecer prioridades para síntese química e testes biológicos de substâncias com base em resultados de previsão. (FILIMONOV, 2014)

Portanto, é utilizado o óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) como objeto de estudo, na qual é extraído das folhas e bagas e é utilizado na indústria alimentar, especialmente na indústria da carne, como ingrediente em produtos cosméticos e no tratamento de algumas doenças do aparelho digestivo como diabetes, hipertensão, neuralgia, estresse etc. (RAO NAVINCHANDRA, & JAYAVEERA, 2012).

Figura 1. *Pimenta dioica*



Fonte: <https://powo.science.kew.org/taxon/urn:lsid:ipni.org>

Os estudos revelaram que o óleo essencial de *P. dioica* (L.) tem uma boa atividade sequestradora de radicais livres no caso do radical hidroxila, radical DPPH, ânion superóxido, e que inibe a formação de dienos conjugados (JIROVETZ et al., 2007; RAO et al., 2012).

Dentre a imensidão de produtos vegetais, os óleos essenciais merecem atenção especial. São misturas complexas de hidrocarbonetos e hidrocarbonetos oxigenados provenientes das vias

isoprenóides, constituídas principalmente por monoterpenos e sesquiterpenos. Os óleos essenciais são produzidos e secretados por tricomas glandulares, tecidos secretores especializados difundidos na superfície dos órgãos das plantas, particularmente flores e folhas.

(IRITI, 2006)

Com base nessas suposições, o objetivo deste estudo foi identificar, por meio de um estudo *in silico*, as moléculas naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) extraído em laboratório que poderiam desempenhar uma ação antioxidante, semelhante a estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas baseado nessa interação.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

- Realizar uma análise computacional para identificar as moléculas naturais presentes no óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) que possuem potencial ação antioxidante, buscando estabelecer um paralelo com estudos experimentais para o ensino de Funções Orgânicas com base nessa interação.

2.2. Objetivos específicos

- Caracterizar quimicamente o óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.).
- Determinar a Concentração Eficiente a 50 % (CE₅₀) para atividade antioxidante do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) pelo método de descoloração do radical DPPH.
- Avaliar a atividade *in silico* dos constituintes químicos do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.) através de predições obtidas pelo PASS Online.

- Elaborar sequências didáticas em prol do assunto de Funções Orgânicas, moléculas bioativos e de uso dos softwares para o ensino de química.

3. METODOLOGIA

3.1. Extração e caracterização do Óleo essencial de *Pimenta*

dioica

Para extração do óleo essencial, foi aplicada a técnica de hidrodestilação utilizando um extrator de Clevenger acoplado a um balão de fundo redondo acondicionado em manta elétrica como fonte geradora de calor. Foram utilizadas 105 g das folhas do vegetal trituradas, adicionando-se água destilada a uma proporção (1:8) ao material vegetal contido no balão.

A hidrodestilação foi conduzida a 100°C por 3h e logo após recolheu-se o óleo essencial extraído. O óleo essencial foi seco por percolação com sulfato de sódio anidro (Na₂SO₄). As amostras foram armazenadas em vials de vidro âmbar sob refrigeração de 4°C. Posteriormente submetidos as análises.

Os constituintes dos óleos essenciais foram identificados por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS). Para a identificação dos compostos na amostra utilizou-se o programa AMDIS (Automated Mass spectral Deconvolution Mass & Identification System).

3.2. Predição de atividade *in silico*

Para a previsão da atividade biológica, utilizou-se o PASS Online (<http://www.way2drug.com/PASSOnline/index.php>), servidor que prevê a atividade biológica de compostos, levando em consideração características farmacológicas, mecanismos de ação, interações metabólicas e transportadores de enzimas, entre outras. O PASS Online se baseia na relação estrutura-atividade, tendo precisão média de previsão de 96% (FILIMONOV et al., 2014).

O conjunto de compostos bioativos obtidos no ensaio GC-MS foram selecionados para prever os espectros de atividade biológica. As estruturas canônicas funcionam como fórmula desses fármacos fitoquímicos e estas foram obtidas do PubMed (www.pubchem.ncbi).

nlm.nih.gov). As estruturas canônicas dos compostos individuais foram coladas no PASS Online software para a previsão da atividade antioxidante, obtendo valores de atividade (P_a) e provável inatividade (P_i) de cada composto, estes foram registrados e comparados com o padrão fármaco (Ácido ascórbico, BHT).

3.3. Sequência didática

A sequência didática (SD) terá enfoque na abordagem sobre atividade antioxidante e no estudo do conteúdo de Funções Orgânicas, a partir das estruturas moleculares. Para isso, será utilizado o software educacional para demonstração das previsões de atividades, uma vez que o uso de modelos virtuais proporciona maior disponibilidade, flexibilidade e variedade no estudo das conformações de moléculas orgânicas (FATEMAH; RASSOL; HABIB, 2020).

As SDs são um conjunto concatenado de atividades ou estratégias de ensino que, quando planejadas, aplicadas em conjunto e em cronologia específica podem levar a um processo de aprendizagem

mais eficiente em relação ao conteúdo abordado em aulas. Desse modo, presume-se a proposição de uma SD a partir dos resultados oriundos da pesquisa por similaridade. Estas foram baseadas em estudos especializados de Silva (2022).

3.4. Atividade antioxidante por eliminação de radicais DPPH

Para comparar o resultado obtido virtualmente com o software PASS Online, a atividade antioxidante foi feita *in vitro* pelo método utilizado para determinar a capacidade antioxidante dos extratos e frações foi adaptado de Brand-Williams, Cuvelier e Berset (1995). 10 μ L dos extratos e frações foram misturados com 990 μ L de etanol, 2 mL de solução de radical DPPH, completando 4 mL com etanol, com posterior homogeneização. A mistura foi armazenada em um local adequado para reagir no escuro durante 30 minutos. A absorção de amostras (As) foi registrada em 540 nm em um espectrofotômetro UV-Vis. A eliminação de radicais DPPH foi expressa em percentual e a Concentração Eficiente 50% (CE₅₀/IC₅₀) e 90% (CE₉₀/IC₉₀) capazes de

inibir 50% e 90%, respectivamente, da eliminação foi expressa em ppm.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. Cromatografia Líquida de Alta Eficiência Acoplada a Espectrometria de Massas.

A Tabela 1 apresenta os constituintes químicos através da Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (GC-MS).

Tabela 1. Caracterização química do OE de *Pimenta dioica* (L.)

Pico	RT (min)	Componentes NIST 08	% Teor
1	8,772	Octenol	1,177
2	9,164	Mirceno	2,643
3	10,488	Limoneno	1,621
4	13,251	Linalol	0,864
5	16,122	Terpineol	0,933
6	19,026	Chavicol	6,592
7	22,755	Eugenol	85,68

Fonte: Autor próprio(2023)

Neste estudo identificou-se de 7 compostos sendo majoritário Eugenol (85,68%). Barros *et al*, (2020) apresentam a composição química dessa mesma espécie enfatizado a presença de Eugenol (76,98%), Fenol (5,88%), Sesquiterpenos (1,94%), α -Cubebeno (0,35%), Cariofileno (0,09%), α -Cariofileno (0,08%), α -Cadineno (0,19%), α -Muroleno (0,22%).

4.2. Predição de atividade Antioxidantes

A Tabela 2 apresenta os resultados da predição de Atividades Antioxidantes do OE de *Pimenta dioica* (L.) através do software PASS Online.

Tabela 2. Predição da Atividade Antioxidante do OE de *Pimenta dioica* (L.) através por meio do software

PASS Online.

Compostos Identificados	Pa	Pi	Porcentagem (%) GC-MS	Pa*%GC-MS
Eugenol	0,489	0,007	0,8569	0,419
Chavicol	0,540	0,005	0,0695	0,038
Terpineol	0,913	0,020	0,0930	0,085
Linalol	0,380	0,014	0,0087	0,003
Limoneno	0,157	0,094	0,0162	0,025
Mirceno	0,470	0,008	0,0264	0,012
Octenol	0,204	0,053	0,0117	0,0248

Fonte: Autor próprio(2023)

Neste estudo encontrou-se um P_a para o OE de *Pimenta dioica* (L.), baseado no valor da soma da coluna P_a *% GC-MS da Tabela 2, resultou em seu potencial ativo de 0,585. Se selecionarmos no intervalo $0,5 < P_a < 0,7$, as chances de detectar atividade experimental serão moderadas, mas os compostos serão menos semelhantes aos agentes farmacêuticos conhecidos (FILIMONOV *et al.*, 2014).

Consequentemente, por meio do programa empregado, é possível afirmar que o óleo essencial examinado apresenta altíssimas propriedades antioxidantes. Dessa forma, foi conduzido o experimento empírico para assegurar a confiabilidade do resultado, proporcionando uma abordagem educacional com o uso de programas de computador.

4.3. Comparativo com ações antioxidantes

A Tabela 3 apresenta resultados experimentais para ações antioxidantes.

Tabela 3. Resultados experimentais para atividade antioxidante.

	IC ₅₀ mg/L	Parâmetros da equação	R ²
<i>Pimenta dioica</i>	39,57	A= 1,0067 B= 10,189	0,9921

Fonte: Autor próprio(2023)

O resultado encontrado pra IC₅₀ é classificado como ativo para a atividade antioxidante, correlacionando assim com resultados obtidos no ensaio *in silico* com software PASS Online.

4.4. Sequências didáticas formuladas

4.4.1. 1ª Etapa – Apresentação da temática

Esta etapa terá duração de três aulas com duração de 45 minutos a 1 hora cada aula.

4.4.2. Objetivos:

- Expor o programa das aulas, introduzindo os assuntos a serem abordados nas aulas seguintes e, mencionar sobre o planejamento de tarefas.

- Examinar o entendimento prévio dos estudantes em relação ao assunto de antioxidantes e aos materiais estudados anteriormente.

- Explicar detalhes específicos sobre as vantagens, a relevância da utilização e do progresso de substâncias bioativas e estabelecer conexões com os tópicos de química orgânica.

4.4.3. Metodologia

Nos dois primeiros encontros, serão discutidos sobre a estrutura da disciplina e as tarefas propostas, utilizando recursos como slides ou material físico. Além disso, será mencionado de forma sucinta a utilização do software educativo para apresentar moléculas bioativas.

Após isso, sugere-se a realização de uma atividade para avaliar o conhecimento prévio dos alunos em relação ao assunto. Além disso, nas duas próximas aulas, é esperado que seja feita uma apresentação, utilizando slides e materiais impressos, sobre a definição de

antioxidantes, destacando os principais compostos empregados e seus impactos no ambiente, bem como abordando sua aplicação, efetividade e métodos de obtenção e preparação.

Com esse propósito, é possível executar a coleta de imagens das configurações moleculares, informações estatísticas sobre a utilização dessas substâncias e seus perigos e, assim, relacionar com a análise da química.

4.4.4. Atividades

Para identificar o conhecimento prévio dos alunos, sugere-se a avaliação dos mesmos por meio de uma discussão em grupo, abordando aspectos relevantes ao assunto de forma a criar um ambiente relaxado e cativante. Alternativamente, também é possível utilizar um questionário com perguntas abertas para obter insights subjetivos.

4.4.5. Materiais didáticos

- Base de Dados PubChem

- Materiais impressos (cartazes, panfletos, etc)
- Notebook
- Projetor multimídia
- Sites e artigos científicos
- Slides (Power Point)

4.4.6. 2ª Etapa – Explicação teórica dos conteúdos de funções

orgânicas

Esta etapa terá duração de Oito aulas de 45 minutos a 1 hora cada aula.

4.4.7. Objetivos

- Revisitar conceitos fundamentais de química orgânica, a fim de simplificar a compreensão dos tópicos subsequentes.

- Explorar os assuntos relacionados aos Hidrocarbonetos, compostos orgânicos contendo carbono e hidrogênio, Funções Orgânicas contendo oxigênio, nitrogênio e halogênios, bem como o

estudo das diferentes configurações espaciais dos compostos orgânicos.

4.4.8. Metodologia

Com esse objetivo, sugere-se a exposição conceitual do material, empregando quadro branco ou apresentações de slides. Para alcançar esse propósito, presume-se a utilização das formas planas (2D) dos antioxidantes (obtidos na plataforma PubChem), destacando as características dos grupos funcionais e a distinção entre eles.

4.4.9. Atividades

Após a conclusão da explicação de cada função orgânica, supõe-se que sejam realizadas atividades no quadro, em documentos impressos ou em apresentações de slides, que demandem do aluno a compreensão do tópico abordado.

4.4.10. Material didático

- Apagador

- Base de dados PubChem
- Livro didático
- Notebook
- Pinceis para quadro
- Projetor multimídia
- Quadro branco
- Slides (Power Point)

4.4.11. 3º Momento – Utilização do software PASS Online.

Esta etapa terá duração de três aulas de 45 minutos a 1 hora cada aula.

4.4.12. Objetivos

- Adotar o programa educativo PASS Online como ferramenta para exibir representações das moléculas dos compostos naturais descobertos durante a pesquisa, discernir as diferentes funções orgânicas presentes nessas substâncias.

- Relacionar os modelos identificados no PASS Online com as figuras em 2D abordadas nas palestras teóricas.

- Determinar sobre a organização física das uniões e dos grupos funcionais das moléculas.

4.4.13. Metodologia

A partir da explicação concisa sobre as principais características de identificação das funções orgânicas, será fornecido aos alunos a opção de desenhar as estruturas dos compostos naturais em um quadro branco ou receber cópias impressas. Após isso, sugere-se que as mesmas sejam importadas para o software PASS Online por meio do PubChem, permitindo a visualização das estruturas modificadas.

Dessa maneira, é possível contrastar os padrões moleculares bidimensionais e tridimensionais, reconhecendo a localização, a conformação espacial da cadeia e das estruturas orgânicas encontradas em cada substância, particularidades que são desafiadoras de observar em representações planas. Frente a essa situação, é possível notar as disparidades na visualização molecular

entre os formatos 2D e 3D, constatando as divergências presentes e destacando a relevância do uso dos modelos tridimensionais.

4.4.14. Atividades

Durante a atividade, os alunos serão estimulados a reconhecerem as funções orgânicas encontradas nas moléculas, bem como a estereoquímica das mesmas. Além disso, será possível promover um momento de relaxamento, no qual os alunos terão a oportunidade de discutir sobre produtos específicos cuja composição desperte sua curiosidade.

Com o intuito de alcançar esse objetivo, os compostos dos ingredientes ativos podem ser obtidos e examinados no PubChem, possibilitando, desse modo, nutrir a curiosidade em relação aos componentes de produtos e contribuir para a compreensão da química em nosso dia a dia.

4.4.15. Material didático

- Apagador

- Base de dados PubChem
- Materiais impressos
- Notebook
- Pincel
- Projeto multimídia
- Quadro branco
- Software PASS Online

4.4.16. 4º MOMENTO – AVALIAÇÃO

Esta etapa terá duração de duas aulas de 45 minutos a 1 hora cada aula.

4.4.17. Objetivos

- Verificar a proficiência dos alunos em relação aos tópicos ensinados.
- Verificar a contribuição da utilização do software para a aprendizagem do conteúdo de Funções Orgânicas.

- Avaliar o desenvolvimento dos alunos em relação ao conhecimento sobre antioxidantes e a sua associação com a disciplina de química.

4.4.18. Metodologia

Com o objetivo de alcançar isso, supõe-se a realização de uma prova escrita, composta por 3 perguntas subjetivas, nas quais são fornecidas representações explícitas em duas dimensões dos produtos naturais, para que os estudantes possam identificar as funções orgânicas presentes. Em seguida, iremos empregar o PASS Online, apresentando as mesmas configurações mencionadas na análise anterior, com o intuito de estabelecer conexões entre as estruturas, identificar e visualizar a Estereoquímica das moléculas em modelos tridimensionais.

Por último, presume-se a realização de encontros para discussão, abordando o assunto dos antioxidantes, com o intuito de avaliar o conhecimento dos estudantes diante da explanação sobre os perigos e a relevância de seu desenvolvimento, respectivamente.

4.4.19. Material didático

- Avaliação impressa
- Bases de dados PubChem

5. CONCLUSÃO

Os softwares educacionais podem desempenhar um papel importante no desenvolvimento de propostas de ensino dinâmicas e inovadoras. No contexto específico da predição da atividade antioxidante do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.), esses softwares podem ser usados para criar modelos e simulações que permitem aos alunos explorarem e compreenderem os princípios por trás dessa atividade.

Logo, através da utilização de programas educacionais pode-se criar uma abordagem de ensino animada e revolucionária através da previsão da atividade antioxidante do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.). Dentro dessa situação, por meio da elaboração de uma sequência didática estruturada e planejada, alcançou-se o objetivo de integrar e somar, dando prioridade às situações diárias dos estudantes relacionadas aos temas explorados.

Em suma, o uso de softwares educacionais pode contribuir para o desenvolvimento de propostas de ensino dinâmicas e inovadoras

sobre a predição da atividade antioxidante do óleo essencial de *Pimenta dioica* (L.). Esses softwares oferecem recursos de modelagem molecular, simulações, experimentos virtuais e interatividade, reforçando o aprendizado dos alunos e incentivando sua participação ativa no processo de aprendizagem.

REFERÊNCIAS

- BARROS GOMES, P. R. C. Composição química e atividade antibacteriana do óleo essencial dos frutos da *Pimenta dioica*. **Revista Colombiana de Ciências Químico-Farmacêuticas** , v. 49, n. 3, pág. 656-674, 2020.
- BRAND-WILLIAMS, W.; CUVELIER, M. E.; BERSET, C. L. W. T. Use of a free radical method to evaluate antioxidant activity. **LWT-Food science and Technology**, v. 28, n. 1, p. 25-30, 1995.

- CAMPOS, C. R.; JACOBINI, O. R.; WODEWOTZKI, M. L. L.; FERREIRA, D. H. L. Educação estatística no contexto da Educação crítica. **Revista Bolema**, v. 24, nº 39, p. 473- 494, ago. 2011
- CARMO, R. O. S.; FRANCO, A. P. Da docência presencial à docência online: aprendizagens de professores universitários na educação a distância. **Educação em Revista**, v. 35, p. e210399, 2019.
- DO NASCIMENTO, G. B. et al. **As dificuldades dos alunos e professores no ensino-aprendizagem de química no ensino médio**. 2014.
- FATEMAH, A.; RASSOOL, S.; HABIB, U. Interactive 3D Visualization of Chemical Structure Diagrams Embedded in Text to Aid Spatial Learning Process of Students. **J. Chem. Educ.**, v. 97, n. 4, p. 992–1000, 2020.

- FILIMONOV, D. A. et al. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource. **Chemistry of Heterocyclic Compounds**, v. 50, p. 444-457, 2014.
- FILIMONOV, D.A., et al. Previsão dos espectros de atividade biológica de compostos orgânicos usando o recurso online PASS. **Chemistry of Heterocyclic Compounds** , v. 50, p. 444-457, 2014.
- GUERIN, C. S.; COUTINHO, C.; SGANZERLA, F. L. Ensino de Biologia na Era Digital: uma revisão integrativa. **Revista Valore**, [S.l.], v. 8, p. e-8012, mar. 2023.
- IRITI, M. et al. Histocitoquímica e microscopia eletrônica de varredura de tricomas glandulares de lavanda após hidrodestilação convencional e assistida por micro-ondas de óleos essenciais: um

estudo comparativo. **Revista de Sabores e Fragrâncias** , v. 21, n. 4, pág. 704-712, 2006.

- JIROVETZ, et al. Especiarias: composição química e propriedades antioxidantes da Pimenta Lindl. Óleos essenciais, Parte 1: *Pimenta dioica* (L.) Merr., óleo de folha da Jamaica, **ErNahrung/Nutrition** , vol. 2 , pp. 55-62, 2007.
- OLIVEIRA, E. R.; CUNHA, D. S. O uso da tecnologia no ensino da Matemática: contribuições do software GeoGebra no ensino da Função do 1º grau. **Revista Educação Pública**, v. 21, nº 36, 28 de setembro de 2021.
- RAO, P. S.; NAVINCHANDRA, S.; JAYAVEERA, K.N. Um tempero importante, *Pimenta dioica* (Linn.) Merrill: Uma revisão. **International Current Pharmaceutical Journal** , v. 1, n. 8, pág. 221-225, 2012.

- **SILVA, J. N. M. Modelos tridimensionais no estudo de interações ligante-recptor: estratégias para o ensino de química orgânica.** 2022. 54 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Química Licenciatura) – Instituto Federal do Piauí, Cocal, 2022.