



ACESSO ABERTO

Data de Recebimento:
11/08/2025

Data de Aceite:
27/08/2024

Data de Publicação:
29/08/2025

***Autor correspondente:**

Renato Massaharu Hassunuma,
Doutorado em Odontologia (área
de concentração Biologia Oral),
Rua Luís Levorato, 140 - Chá-
caras Bauruenses, Bauru - SP,
17048-290. Telefone de contato:
(14) 3312-7000. E-mail: rhassu-
numa@gmail.com.

Citação:

OLIVEIRA, K.V *et al.*
Pubchem: desenvolvimento
de um guia rápido de consulta
e de quadros sintéticos sobre
compostos químicos. **Revista
Multidisciplinar em Educação
e Meio Ambiente**, v. 6, n. 3,
2025. [https://doi.org/10.51161/
integrar/rema/4652](https://doi.org/10.51161/integrar/rema/4652)

DOI: 10.51161/integrar/
rema/4652

Editora Integrar© 2024.
Todos os direitos reservados.

PUBCHEM: DESENVOLVIMENTO DE UM GUIA RÁPIDO DE CONSULTA E DE QUADROS SINTÉTICOS SOBRE COMPOSTOS QUÍMICOS

Kamilly Victoria de Oliveira^a, Alana Vitória Abrucci^a, Renato Massaharu Hassunuma^a, Patrícia Carvalho Garcia^a, Sandra Heloisa Nunes Messias^b.

^a Universidade Paulista, Câmpus Bauru. Rua Luís Levorato, 140 - Chácaras Bauruenses, Bauru - SP, 17048-290.

^b Universidade Paulista – UNIP, Câmpus Paraíso. Rua Vergueiro, 1211, 8º andar – Paraíso, São Paulo – SP, CEP: 01504-001.

RESUMO

Introdução: O *PubChem* é uma plataforma de dados online, gratuita e de acesso público que reúne, em um só lugar, informações sobre milhões de substâncias químicas. Criado em 2004, ele oferece dados sobre estrutura, propriedades e usos de diferentes compostos, organizados de maneira prática e acessível. Suas informações são usadas tanto por cientistas e profissionais da saúde, quanto por professores e estudantes. Este banco de dados permite encontrar desde descrições químicas simples até resultados de testes biológicos. **Objetivos:** Analisar a base de dados *PubChem*, no intuito de verificar a sua aplicabilidade do conteúdo disponibilizado no ensino e pesquisa na área de Farmacologia. **Materiais e Métodos:** Este estudo foi realizado em três etapas. Inicialmente, foi feito um levantamento dos conteúdos disponíveis no banco de dados *PubChem*, utilizando o ácido acetilsalicílico (aspirina) como modelo. Em seguida, os conteúdos foram organizados em ordem alfabética para criar um guia rápido de consulta sobre compostos químicos. Por fim, foi elaborado um quadro resumido sobre a aspirina, mostrando como o *PubChem* pode ajudar na pesquisa de Farmacologia. **Resultados:** Foi desenvolvido um guia rápido de consulta com a proposta de facilitar futuras pesquisas na área de Farmacologia. O quadro sintético desenvolvido demonstrou como a pesquisa no *PubChem* pode gerar resumos sobre dados importantes na área de Farmacologia. **Conclusões:** O *PubChem* corresponde a uma ferramenta de pesquisa com dados estruturados e de fácil acesso. A organização em seções específicas permite encontrar rapidamente desde características básicas até detalhes técnicos avançados, tornando seu conteúdo útil tanto para o ensino quanto para pesquisa. Espera-se que, no futuro, sejam desenvolvidos recursos educacionais direcionados para o ensino, o que ampliaria seu alcance e beneficiaria ainda mais a comunidade científica e acadêmica.

Palavras-chave: Banco de dados. Fonte de informação. Ensino. Aspirina.

ABSTRACT

Introduction: PubChem is a free, publicly accessible online data platform that brings together information on millions of chemical substances in one place. Created in 2004, it offers data on the structure, properties, and uses of

different compounds, organized in a practical and accessible manner. Its information is used by scientists and healthcare professionals, as well as teachers and students. This database allows users to find everything from simple chemical descriptions to biological test results. Objectives: To survey the content available in each PubChem section; to develop a quick guide to topics related to chemical compounds to facilitate future research; and to develop a summary table, illustrating how it can be used as a research resource. Materials and Methods: This study was conducted in three stages. Initially, a survey of the content available in the PubChem database was conducted, using acetylsalicylic acid (aspirin) as a model. The content was then organized alphabetically to create a quick reference guide to chemical compounds. Finally, a summary table on aspirin was created, demonstrating how PubChem can aid pharmacology research. Results: A quick reference guide was developed to facilitate future research in the field of pharmacology. The summary table demonstrated how searching PubChem can generate summaries of important data in the field of pharmacology. Conclusions: PubChem is a research tool with structured, easily accessible data. Organized into specific sections, it allows for quick access to everything from basic characteristics to advanced technical details, making its content useful for both teaching and research. It is expected that future educational resources aimed at teaching will be developed, which would broaden its reach and further benefit the scientific and academic community.

Keywords: Database. Information sources. Teaching. Aspirin.

1 INTRODUÇÃO

O *PubChem* (Link: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) corresponde a um banco de dados online público e gratuito que apresenta informações diversas sobre várias substâncias químicas. O *PubChem* foi disponibilizado pela primeira vez em 2004 como parte do componente Molecular Libraries and Imaging (MLI) do NIH Roadmap for Medical Research Initiative (Hähnke; Kim; Bolton, 2018).

Atualmente, pertence ao Centro Nacional de Informações sobre Biotecnologia (NCBI) da Biblioteca Nacional de Medicina (NLM). Milhões de usuários utilizam o *PubChem* todos os meses, incluindo pesquisadores, profissionais de saúde e segurança química, agentes de patentes, educadores e estudantes (Kim *et al.*, 2023).

Os dados do *PubChem* referem-se principalmente a moléculas pequenas, mas também incluem outras entidades moleculares, como pequenos interferentes e micro-RNAs (RNAs interferentes pequenos e micro-RNAs), peptídeos, lipídios, carboidratos, macromoléculas quimicamente modificadas e muitas outras (Kim, 2016).

Para cada uma destas substâncias químicas, o *PubChem* coleta e agrega em uma única página um resumo de uma série de dados como descrições de substâncias química e suas atividades biológicas, provindas de centenas de fontes de dados e as fornece gratuitamente ao público (Cornell *et al.*, 2024).

As informações químicas apresentadas no *PubChem* são utilizadas por comunidades de pesquisa biomédica em muitas áreas, incluindo bioinformática, quimioinformática, biologia química, química medicinal, farmacologia e toxicologia computacional, projetos de aprendizado de máquina, ciências de dados para triagem virtual, reaproveitamento de medicamentos, entre outros (Kim, 2021).

O processo de organização de dados do *PubChem* é baseado na formação de três bancos de dados interligados: *Substance*, *Compound* e *BioAssay*. O banco de dados *Substance* arquiva descrições de substâncias químicas fornecidas pelos usuários depositantes. O segundo banco de dados, intitulado *Compound*, armazena estruturas químicas exclusivas extraídas do banco de dados *Substance* por meio de padronização de estrutura. Por último, o banco de dados *BioAssay* armazena a descrição e os resultados dos

testes de experimentos de ensaios biológicos (Kim *et al.*, 2019).

Desta forma, o presente estudo tem como objetivo principal analisar a base de dados *PubChem*, no intuito de verificar a sua aplicabilidade do conteúdo disponibilizado no ensino e pesquisa na área de Farmacologia.

2 MATERIAL E MÉTODOS

A atual pesquisa refere-se a uma pesquisa de natureza aplicada cujo objetivo foi explicativo, e com procedimentos técnicos que caracterizam uma pesquisa narrativa, que visa analisar e apresentar propostas para o desenvolvimento de um guia rápido de assuntos e de um quadro sintético de conteúdos apresentados no *PubChem*.

O presente estudo foi realizado entre março de 2024 a julho de 2025, sendo desenvolvido em três etapas. Na primeira etapa foi realizado um levantamento dos conteúdos disponibilizados no *PubChem*, o qual está disponível no link: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. Para análise das informações apresentadas nas diferentes seções do *PubChem*, foi utilizado como modelo o ácido acetilsalicílico (AAS), identificado como *Aspirin* (Aspirina), sob o código identificador 2244 e disponível no link: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2244>. A aspirina foi escolhida por ser o primeiro exemplo sugerido pelo próprio *PubChem*.

Na segunda etapa, os conteúdos observados nas diferentes seções foram organizados em ordem alfabética de forma a criar um guia rápido de consulta de assuntos sobre compostos químicos, no intuito de facilitar futuras consultas ao *PubChem*.

Na terceira etapa foi desenvolvido um quadro sintético sobre o AAS, exemplificando como *PubChem* pode ser empregado como fonte de pesquisa para síntese de conteúdos de Farmacologia.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 PARTE I: Levantamento dos conteúdos apresentados nas seções do *PubChem*

Na primeira parte da pesquisa, foram realizado um levantamento de informações sobre os conteúdos abordados em cada uma das seções do *PubChem*.

As principais informações encontradas estão apresentadas a seguir por seção do *PubChem*.

3.1.1 Seção *Title e Summary* (Título e sumário)

As informações apresentadas na seção *Title and Summary* estão apresentadas no Quadro 1.

Quadro 1 – Seção Title e Summary

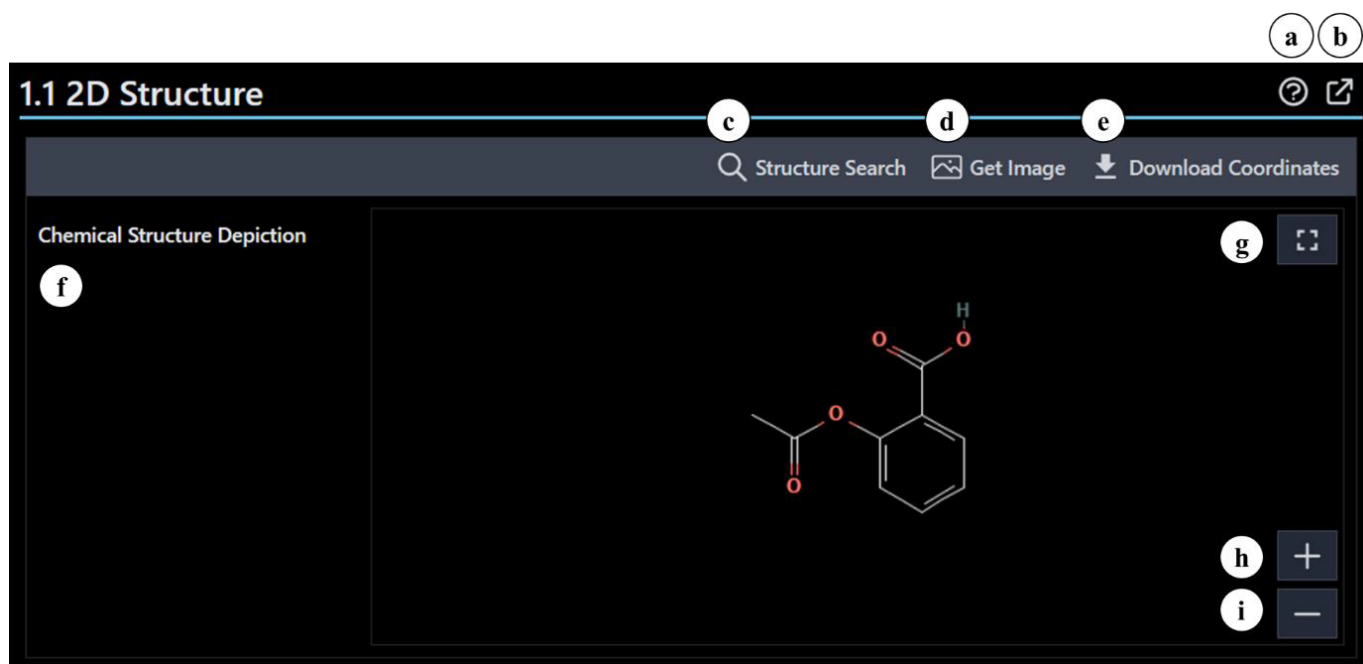
Informação	Tradução	Conteúdo
<i>PubChem</i> CID	Identificador do composto no <i>PubChem</i>	Indica código numérico que identifica um composto químico
Structure	Estrutura	Apresenta ícones que redireciona o usuário para as estruturas bidimensionais, tridimensionais ou cristalinas da molécula.
Chemical Safety	Segurança química	Apresenta o nível de periculosidade que alguns compostos químicos possuem, representado por pictogramas, segundo o Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet
Molecular formula	Formula molecular	Indica a fórmula molecular da molécula
Synonyms	Sinônimos	Apresenta a outros nomes dados à molécula.
Molecular weight	Peso molecular	Indica o peso molecular, geralmente em g/mol.
Dates	Datas	Apresenta a data em que a molécula foi depositada no <i>PubChem</i> e quando os dados foram modificados.
Description	Descrição	Apresenta informações gerais sobre a molécula.

Fonte: Autores, 2025.

3.1.2 Seção Structures (Estruturas)









A seção Structures apresenta as estruturas bidimensional, tridimensional e cristalina da molécula onde são encontradas exibições da molécula que podem ser personalizadas pelo usuário. A seção 2D Structure apresenta recursos associados à exibição da estrutura bidimensional da molécula, os quais estão apresentados na Figura 1 e Quadro 2.

Figura 1 – Seção 2D Structure



Fonte: PubChem, 2025.

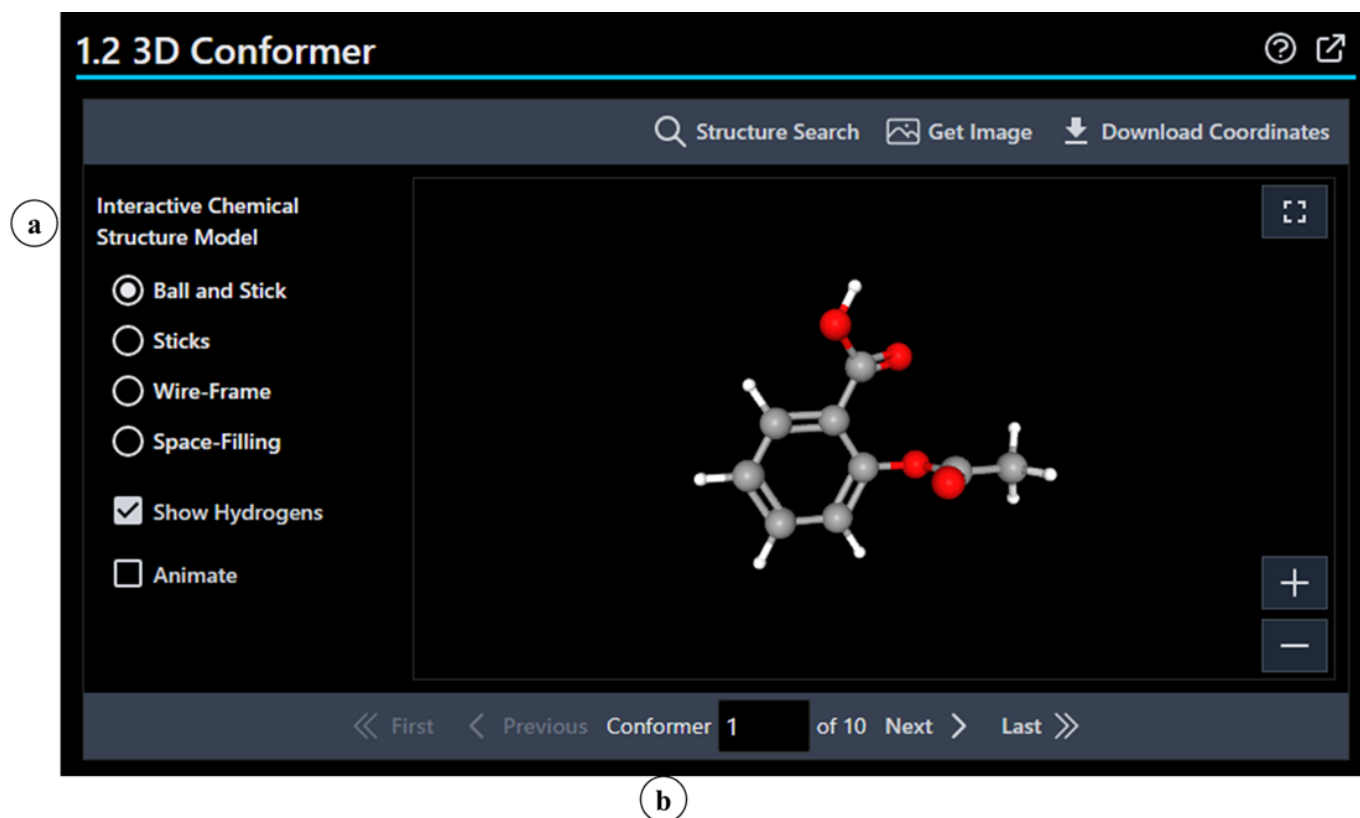
Quadro 2 – Textos originais e traduzidos da seção 2D Structure

Letra	Ícone	Informação	Tradução	Conteúdo
a		What is this information?	O que é esta informação?	Apresenta informações sobre a representação bidimensional da molécula.
b		<i>Open this section in a new browser window</i>	Abra esta seção em uma nova janela no navegador	Abre apenas esta seção em uma nova janela no navegador.
c		<i>Structure search: use this structure as input to structure search</i>	Pesquisa de estrutura: use esta estrutura como entrada para estruturar a pesquisa	Permite que o usuário encontre outras moléculas que apresentem similaridade estrutural, subestrutura ou superestrutura semelhante e similaridade tridimensional.
d		<i>Get image: download an image of this structure</i>	Obter imagem: baixe uma imagem desta estrutura	Permite que a imagem seja capturada em resoluções pré-definidas ou de acordo com o nível de zoom estabelecido pelo usuário.
e		<i>Download coordinates: download the coordinates of this structure</i>	Baixar coordenadas: baixe as coordenadas desta estrutura	Possibilita que o usuário salve ou exiba as coordenadas da molécula em arquivos com extensão SDF, JSON, XML e ASNT.
f	-	<i>Chemical Structure Depiction</i>	Representação da Estrutura Química	Corresponde à área onde a molécula é representada.
g		<i>View structure in full screen</i>	Ver estrutura em tela cheia	Exibe a molécula em tela cheia.
h		<i>Zoom in</i>	Mais zoom	Amplia o tamanho da molécula.
i		<i>Zoom out</i>	Menos zoom	Reduz o tamanho da molécula

Fonte: Autores, 2025.

A seção 3D Conformer apresenta recursos idênticos aos apresentados na seção anterior, exceto o do Menu Interactive Chemical Structure Model (Modelo interativo da estrutura química) (a) e a Barra Conformer (Conformação) (b) apresentados na Figura 2.

Figura 2 – Seção 3D Conformer



Fonte: PubChem, 2025.

O Menu *Interactive Chemical Structure Model* (Modelo interativo da estrutura química) permite que o usuário escolha o tipo de representação da molécula, podendo escolher os modelos *Ball and stick* (bolas e varetas), *Sticks* (varetas), *Wire-frame* (linha) e *Space-filling* (preenchimento de espaço); além de poder optar por exibir os átomos de hidrogênio (*Show hydrogens*) e movimentar a molécula automaticamente (*Animate*).

A Barra Conformer (Conformação) permite que o usuário escolha uma dentre as várias conformações da molécula.

A seção *Crystal Structures* (Estruturas cristalinas) (Figura 3) são apresentadas estruturas tridimensionais cristalinas da molécula, geralmente determinadas experimentalmente usando técnicas de difração de raios X. Os modelos apresentados nesta seção geralmente utilizam dados provindos do *Cambridge Structural Database*. No caso da aspirina, utilizada como modelo, a mesma apresenta 32 estruturas cristalinas disponíveis (a). A seção ainda apresenta:

- *CCDC Number* (*Cambridge Crystallographic Data Centre*) (b): código identificador numérico de 6 ou 7 dígitos atribuído à estrutura cristalina no CCDC;
- *Associated article* (c): apresenta o DOI do artigo cuja pesquisa determinou a estrutura cristalina apresentada;
- *Crystal structure data* (d): apresenta o DOI da estrutura cristalina apresentada;
- *Crystal structure depiction* (e): exibe a estrutura cristalina da molécula.

Figura 3 – Seção *Crystal Structures*

1.3 Crystal Structures

1 of 32 View All

a **b** **c** **d** **e**

CCDC Number 185472

Associated Article DOI:10.1039/b203379h

Crystal Structure Data DOI:10.5517/cc66zsb

Crystal Structure Depiction

(The image shows a 3D ball-and-stick model of a complex organic molecule with a central ring system and various substituents.)

Fonte: *PubChem*, 2025.

3.1.3 Demais seções

As demais seções do *PubChem* e os conteúdos disponibilizados em cada uma delas estão apresentados de forma sumarizada no Quadro 3.

Quadro 3 – Demais seções do *PubChem*

Seção	Título da seção traduzido	Conteúdo
<i>Names and Identifiers</i>	Nomes e identificadores	Lista de descritores, identificadores e sinônimos, e fórmula molecular.
<i>Chemical and Physical Properties</i>	Propriedades químicas e físicas	Resumo das principais propriedades químicas e físicas determinadas experimentalmente.
<i>Spectral Information</i>	Dados espectrais	Dados espectrais de ressonância magnética nuclear (RMN) 1-D e 2-D, espectroscopia de infravermelho (IR), Raman e ultravioleta (UV), espectrometria de massa (MS), cromatografia, entre outros.
<i>Related Records</i>	Registros relacionados	Registros de outros compostos relacionados ao pesquisado, de acordo com bases de dados como o próprio <i>PubChem</i> , bem como registros em recursos do NCBI (por exemplo, <i>PubMed</i> , <i>Gene</i> , <i>Protein Structure</i> , and <i>Taxonomy</i>) e outros bancos de dados externos ao NCBI.
<i>Chemical Vendors</i>	Fornecedores de produtos químicos	Lista de fornecedores que vendem o composto.

Seção	Título da seção traduzido	Conteúdo
<i>Drug and Medication Information</i>	Informações sobre medicamentos e drogas	Indicações, usos terapêuticos, toxicidade hepática, classificação, rotulagem, advertências, idiossincrasias, dose fatal relatada e dose máxima do medicamento. A seção também informa se o fármaco faz parte dos medicamentos essenciais da Organização Mundial de Saúde (<i>WHO Essential Medicines</i>), suas aprovações e classificações na FDA (<i>Food and Drug Administration</i>) e indica diversos ensaios clínicos realizados com o medicamento.
<i>Pharmacology and Biochemistry</i>	Farmacologia e Bioquímica	Informações farmacológicas e bioquímicas, incluindo farmacodinâmica, classificações farmacológicas (MeSH, FDA, ATC), absorção, distribuição e excreção, metabolismo e metabólitos, meia-vida biológica, mecanismo de ação, reações bioquímicas e transformações
<i>Use and Manufacturing</i>	Uso e Fabricação	Informações sobre outros usos do medicamento, classificação de uso, métodos de fabricação, impurezas, formulações e preparações, padrões de consumo, produções, importações, exportações e informações gerais de fabricação
<i>Identification</i>	Identificação	Dados de métodos analíticos de laboratório que podem ser utilizados para analisar o medicamento, como técnicas de cromatografia, espectrofotometria, fluorometria, entre outros
<i>Safety and Hazards</i>	Segurança e Perigos	Informações sobre identificação de perigos (classificação GHS, classes e categorias de perigo, riscos à saúde, riscos de incêndio, resumo de perigos, potencial de incêndio, irritações da pele, olhos e vias respiratórias), propriedades de segurança e risco (limite de inflamabilidade, perigos físicos, normas e recomendações), medidas de primeiros socorros, de combate a incêndio, de liberação acidental, entre outras.
<i>Toxicity</i>	Toxicidade	Informações toxicológicas (hepatotoxicidade, carcinogênese, efeitos durante a gravidez e lactação, rotas de exposição (sintomas, órgãos-alvo, efeitos agudos), interações, antídoto, tratamento de emergência, entre outras.
<i>Associated Disorders and Diseases</i>	Doenças e transtornos associados	Distúrbios e doenças associadas ao composto.
<i>Literature</i>	Literatura	Referências de periódicos associados a este composto apresentados em diferentes bases de dados.
<i>Patents</i>	Patentes	Pedidos e documentos de patentes que mencionam este composto.
<i>Interactions and Pathways</i>	Interações e Caminhos	Informações sobre as interações biomoleculares deste composto com outros compostos, genes, proteínas, alimentos, entre outros. Esta seção indica arquivos <i>PDB (Protein Data Bank)</i> que mostram a interação do composto com diferentes proteínas.
<i>Biological Test Results</i>	Resultados de testes biológicos	Resultados de testes biológicos realizados.

Seção	Título da seção traduzido	Conteúdo
<i>Taxonomy</i>	Taxonomia	Informações do organismo a partir do qual o composto foi produzido.
<i>Classification</i>	Classificação	Classificações do composto nas diferentes bases de dados.
<i>Information Sources</i>	Fontes de informação	Lista de organizações que forneceram os dados apresentados na página.

Fonte: Autores, 2025.

3.2 PARTE II: Desenvolvimento de um guia rápido de consulta de assuntos disponíveis no *PubChem*

Conforme observado anteriormente, o *PubChem* corresponde a uma base de dados com uma vasta coleção de informações sobre diferentes tipos de compostos químicos, o que pode dificultar a localização de determinados assuntos relacionados a um composto químico.

Assim, na segunda parte da presente pesquisa, os assuntos discutidos no *PubChem* foram organizados em ordem alfabética de forma a apresentar um guia rápido de consulta de assuntos na forma de quadro. Este guia rápido foi desenvolvido no intuito de facilitar futuras pesquisas em busca de informações sobre um determinado composto químico no *PubChem*. Neste quadro, estão apresentadas as seções em que diferentes assuntos podem ser localizados no *PubChem*.

Quadro 4 – Guia rápido de consulta de assuntos disponíveis no *PubChem*

Assunto	Seção	Subseção
Absorção	<i>8. Pharmacology and Biochemistry</i>	<i>8.5 Absorption, distribution and excretion</i>
	<i>12. Toxicity</i>	<i>12.1.8 Exposure routes</i>
Advertências	<i>7. Drug and medication information</i>	<i>7.12 Drug warnings</i>
Armazenamento	<i>11 Safety and hazards</i>	<i>11.6 Handling and storage</i>
Bulas	<i>7. Drug and medication information</i>	<i>7.9 Drug labels</i>
Carcinogenicidade	<i>12. Toxicity</i>	<i>12.1.5 Carcinogen classification</i>
Classificação da droga	<i>7. Drug and medication information</i>	<i>7.3 Drug classes</i>
Classificação de perigo	<i>11 Safety and hazards</i>	<i>11.1 Hazards identification</i>
Classificações farmacológicas	<i>8. Pharmacology and Biochemistry</i>	<i>8.2 MeSH pharmacological classification</i>
		<i>8.3 FDA pharmacological classification</i>
Classificação no sistema harmonizado de classificação e rotulagem de produtos químicos (GHS)	<i>Title and summary</i>	<i>Chemical safety</i>
	<i>11. Safety and hazards</i>	<i>11.1.1 GHS classification</i>
Código identificador no DrugBank (DrugBank ID)	<i>2. Names and identifiers</i>	<i>2.3.8 DrugBank ID</i>
Cor	<i>3. Chemical and physical properties</i>	<i>3.2.2 Color/Form</i>

Assunto	Seção	Subseção
Decomposição	3. <i>Chemical and physical properties</i>	3.2.12 <i>Decomposition</i>
Densidade	3. <i>Chemical and physical properties</i>	3.2.8 <i>Density</i>
Descrição geral	<i>Title and summary</i>	<i>Description</i>
Descrição física	3. <i>Chemical and physical properties</i>	3.2.1 <i>Physical description</i>
Distribuição	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.5 <i>Absorption, distribution and excretion</i>
Doenças associadas ao seu uso	7. <i>Drug and medication information</i>	7.12 <i>Drug warnings</i>
	12. <i>Toxicity</i>	12.1.6 <i>Health effects</i>
	13. <i>Associated disorders and diseases</i>	* <i>todos os subitens</i>
Dose fatal	7. <i>Drug and medication information</i>	7.14 <i>Reported fatal dose</i>
Dose máxima	7. <i>Drug and medication information</i>	7.15 <i>Maximum drug dose</i>
Efeitos durante a gravidez e lactação	12. <i>Toxicity</i>	12.1.7 <i>Effects during pregnancy and lactation</i>
		12.1.13 <i>Milk concentrations</i>
Estabilidade	3. <i>Chemical and physical properties</i>	3.2.11 <i>Stability / Shelf life</i>
	11 <i>Safety and hazards</i>	11.8 <i>Stability and reactivity</i>
Estrutura bidimensional	1. <i>Structures</i>	1.1 <i>2D structure</i>
Estrutura cristalina	1. <i>Structures</i>	1.3 <i>Cristal structures</i>
Estrutura tridimensional	1. <i>Structures</i>	1.2 <i>3D conformer</i>
Excreção	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.5 <i>Absorption, distribution and excretion</i>
Farmacodinâmica	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.1 <i>Pharmacodynamics</i>
Forma	3. <i>Chemical and physical properties</i>	3.2.2 <i>Color/Form</i>
Fórmula molecular	<i>Title and summary</i>	<i>Molecular formula</i>
	2. <i>Names and identifiers</i>	2.2 <i>Molecular formula</i>
Formulações	9. <i>Use and manufacturing</i>	9.4 <i>Formulations / preparations</i>
Idiosincrasias	7. <i>Drug and medication information</i>	7.13 <i>Drug idiosyncrasies</i>
Indicações	7. <i>Drug and medication information</i>	7.1 <i>Drug indication</i>
Interações	12. <i>Toxicity</i>	12.1.13 <i>Interactions</i>
Interações com proteínas	12. <i>Toxicity</i>	12.1.20 <i>Protein binding</i>
		16. <i>Interactions and pathways</i>
Limite de exposição recomendada	11. <i>Safety and hazards</i>	11.7.1 <i>Recommended exposure limit</i>
Mecanismo de ação	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.8 <i>Mechanism of action</i>
Meia-vida	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.7 <i>Biological half-life</i>
Metabolismo	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.6 <i>Metabolism/Metabolites</i>
Metabólitos	8. <i>Pharmacology and Biochemistry</i>	8.6 <i>Metabolism/Metabolites</i>
Modo de produção	9. <i>Use and manufacturing</i>	9.2 <i>Methods of manufacturing</i>
Nome na União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC)	2. <i>Names and identifiers</i>	2.1.1 <i>IUPAC Name</i>

Assunto	Seção	Subseção
Odor	3. Chemical and physical properties	3.2.3 Odor
Peso molecular	Title and summary	Molecular weight
	3. Chemical and physical properties	3.1 Computed properties
Pictograma da classificação GHS	Title and summary	Chemical safety
	11. Safety and hazards	11.1.1 GHS classification
pKa	3. Chemical and physical properties	3.2.13 Dissociation constants
Primeiros socorros	11. Safety and hazards	11.3 First aid measures
		11.4 Fire fighting
	12. Toxicity	12.1.14 Antidote and emergency treatment
Ponto de ebulição	3. Chemical and physical properties	3.2.4 Boiling point
Ponto de fusão	3. Chemical and physical properties	3.2.5 Melting point
Ponto de inflamação	3. Chemical and physical properties	3.2.6 Flash point
Prazo de validade	3. Chemical and physical properties	3.2.11 Stability / Shelf life
Pressão de vapor	3. Chemical and physical properties	3.2.9 Vapor pressure
Reatividade	11 Safety and hazards	11.8 Stability and reactivity
Sinônimos	Title and summary	Synonyms
	2. Names and identifiers	2.4.1 MeSH entry terms
Solubilidade	3. Chemical and physical properties	3.2.7 Solubility
Sugestões de leitura e referências	7. Drug and medication information	* todos subitens
	14. Literature	* todos subitens
	17. Biological test results	17.1 BioAssay results
	20. Information sources	* todos subitens
Toxicidade	12. Toxicity	12.1 Toxicological information
Toxicidade hepática	7. Drug and medication information	7.2 LiverTox summary
	12 Toxicity	12.1 Toxicological information
Transformações	8. Pharmacology and Biochemistry	8.11 Transformations
Usos terapêuticos	7. Drug and medication information	7.3 Drug classes
		7.11 Therapeutic uses
	9. Use and manufacturing	9.1 Uses

Fonte: Autores, 2025.

3.3 PARTE III: Exemplificando o desenvolvimento de um quadro sintético baseado em conteúdos pesquisados no PubChem

Na terceira parte da pesquisa, o objetivo foi produzir um quadro resumido com os principais dados referentes a um determinado composto químico disponibilizados no *PubChem*. Para exemplificação, foi utilizado como modelo o ácido acetilsalicílico (AAS), identificado como Aspirin (Aspirina), sob o código identificador 2244 e disponível no link: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2244>.

No desenvolvimento do Quadro 5, foram selecionados e organizados conteúdos disponíveis no *PubChem* sobre o AAS que estivessem relacionados às informações gerais, farmacocinética e farmacodinâmica.

Quadro 5 – Exemplo de criação de um quadro sintético sobre a aspirina (CID 2244) baseado em conteúdos disponíveis no *PubChem*

Assunto	Conteúdo
I. Descrição Geral	
Sinônimos	Aspirina, ácido acetilsalicílico (AAS) ou ácido 2-acetoxibenzóico.
Usos terapêuticos	O AAS é um analgésico, antipirético, anti-inflamatório não esteroide e anti-trombótico.
Fórmula molecular	Sua fórmula molecular é C ₉ H ₈ O ₄ (CH ₃ COOC ₆ H ₄ COOH).
Peso molecular	Seu peso molecular é de 180,16 g/mol.
Descrição física	Pode ser produzido na forma de cristais brancos inodoros ou pó cristalino, com um sabor ligeiramente amargo.
Odor	É inodoro.
Indicações	É indicado para aliviar a dor, febre e inflamação associadas a diversas condições. Também é usado para alívio sintomático da dor após procedimentos cirúrgicos e odontológicos. Também é indicado para vários outros propósitos, devido à sua capacidade de inibir a agregação plaquetária, incluindo reduzir o risco de morte cardiovascular em casos suspeitos de infarto do miocárdio.
Doenças associadas ao seu uso	O uso continuado pode causar dores abdominais, sangramento gastrointestinal, acidose metabólica, síndrome de Reye (doença grave caracterizada por encefalopatia aguda e fígado gorduroso, que ocorre em crianças ou adolescentes que recebem aspirina para febre ou infecções).
Dose máxima	A dose usual do AAS como analgésico e antipirético é de 0,3 a 1 g, podendo ser repetida a cada 4 horas conforme necessidade clínica, até o máximo de 4 g ao dia.
II. Farmadinaâmica	
Farmacodinâmica	O AAS interrompe a produção de prostaglandinas, pela inibição das ciclo-oxigenase-1 (COX-1) e -2 (COX-2). As prostaglandinas causam dores de cabeça e dor, aumentam a sensibilidade dos receptores de dor e substâncias como histamina e bradicinina. É considerado um agente antipirético devido à sua capacidade de interferir na produção de prostaglandina E1 cerebral, que é um agente indutor de febre. A inibição da agregação plaquetária pelo AAS ocorre devido à sua interferência com o tromboxano A2 nas plaquetas, causada pela inibição da COX-1. O tromboxano A2 é um lipídio importante responsável pela agregação plaquetária, o que pode levar à formação de coágulos e risco futuro de ataque cardíaco ou derrame. Tem sido usado na prevenção de várias malignidades, pois interfere em várias vias de sinalização de diferentes tipos de câncer, incluindo câncer de estômago, colorretal, pancreático e hepático.
III. Farmacocinética	
Absorção	Após ingestão oral, é rapidamente absorvido no estômago e no intestino delgado proximal, apresentando concentrações plasmáticas máximas de salicilato entre 1-2 horas após a administração. A absorção pode variar de acordo com vários fatores como: taxa de dissolução do comprimido, pH gástrico ou intraluminal, conteúdo gástrico, tempo de esvaziamento gástrico, entre outros.

Assunto	Conteúdo
Distribuição	Após absorvido, é distribuído aos tecidos, sendo capaz de atravessar a placenta. Após a dosagem, altos níveis de salicilato podem ser encontrados no plasma, fluidos espinhal, peritoneal e sinovial, saliva, leite, rim, fígado, coração e pulmões. Baixas concentrações de salicilato são geralmente baixas nas fezes, bile e suor.
Metabolismo	O ácido acetilsalicílico é hidrolisado no plasma para ácido salicílico. O salicilato, metabólito principal do ácido acetilsalicílico, é metabolizado principalmente no fígado. Os principais metabólitos do ácido acetilsalicílico são o ácido salicílico, o ácido salicilúrico, o éter ou glicuronídeo fenólico e o éster ou glicuronídeo acil. Uma pequena porção é convertida em ácido gentísico e outros ácidos hidroxibenzoicos.
Interações com proteínas	50% a 90% da concentração terapêutica normal de salicilato se liga a proteínas plasmáticas, principalmente à albumina. O AAS se liga de forma insignificante com a albumina, embora seja capaz de se ligar e acetilar muitas outras proteínas, hormônios, DNA, plaquetas e hemoglobina.
Meia-vida	A meia-vida do AAS na circulação sanguínea varia de 13 a 19 minutos. As concentrações sanguíneas caem rapidamente após a absorção completa. A meia-vida do salicilato varia entre 3,5 e 4,5 horas.
Excreção	A excreção de salicilatos ocorre principalmente por filtração glomerular e excreção tubular renal, na forma de ácido salicílico livre, ácido salicilúrico e glicuronídeos fenólicos e acil. O salicilato pode ser encontrado na urina logo após a administração. Entretanto, a dose inteira é eliminada totalmente em 48 horas.
Efeitos durante a gravidez e lactação	É excretado no leite materno em doses mais altas, resultando em níveis desproporcionalmente mais altos. A ingestão materna de AAS em altas doses e a longo prazo pode causar acidose metabólica em um bebê amamentado. Bebês amamentados por mães que fazem uso de AAS devem ser monitorados em relação a hematomas e sangramento.

Fonte: Autores, 2025.

Um fato importante a ser mencionado é que o conteúdo disponibilizado pelo *PubChem* é personalizado de acordo com as necessidades observadas durante a descrição de cada tipo de composto químico. Assim, ao analisar, por exemplo o ácido clorídrico (*Hydrochloric Acid (compound)*), disponível no link: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/313>), é possível observar que na página desta substância química, podem ser observados outros conteúdos que não estão disponíveis para a aspirina como, por exemplo, a seção 8 - *Food additives and ingredients* (aditivos e ingredientes alimentares), que descreve alimentos em que o ácido clorídrico é usado como aditivo e/ou ingrediente.

Um outro exemplo, está na molécula de monóxido de carbono (Carbon Monoxide, disponível no link: <https://ncbi.nlm.nih.gov/compound/281>). Neste composto, é encontrado além da seção 8 - *Food additives and ingredients*, a seção 9 - *Agrochemical Information* (Informações agroquímicas), que descreve a aplicação da substância, por exemplo, em pesticidas.

Desta forma, é importante mencionar que o apresenta um formato flexível, sendo suas seções

ajustadas de acordo com o tipo de composto, permitindo apresentar outras informações além dos conteúdos apresentados na presente pesquisa para o AAS. Isto permite ampliar ainda mais as aplicações didáticas deste banco de dados como ferramenta no Ensino de Química.

3.4 PARTE IV: Discutindo a aplicação didática do *PubChem* no Ensino de Química

O *PubChem* corresponde a um banco de dados sobre substâncias químicas que possui um grande potencial como recurso didático para o Ensino de Química. A maioria de seus usuários é formada por professores, estudantes de ensino superior e pós-graduandos (Kim et al., 2021).

É importante mencionar que a *National Library of Medicine* (NIH) fornece o *PubChem Training Course* (Curso de Treinamento para o *PubChem*) (link: www.nlm.nih.gov/oet/ed/pubchem/tutorial/index.html), um recurso online gratuito para aqueles que desejam conhecer o funcionamento desta base de dados.

O desenvolvimento do quadro sintético com informações buscadas no *PubChem* (Quadro 5), mostrou que a base de dados está bastante organizada, sendo que as informações estão bem categorizadas e resumidas, facilitando a busca de informações sobre compostos e substâncias químicas. O Quadro 6 apresenta pontos positivos e negativos observados durante a consulta do *PubChem*.

Quadro 6 – Pontos positivos e negativos observados na busca de informações no *PubChem*.

Pontos positivos
1. O <i>PubChem</i> é uma base de dados gratuita, que pode ser acessado em qualquer computador ou dispositivo móvel que possua acesso à internet.
2. Requer o uso de equipamentos de baixa configuração.
3. As informações estão bem organizadas e são apresentadas em quadros resumidos.
4. Se aplicado em aulas práticas, pode oportunizar a sociabilização entre os alunos.
5. Apresenta informações bastante completas sobre a maior parte dos compostos e substâncias de interesse biológico.
6. O uso da base de dados não requer muito treinamento.
7. Existe um tutorial disponível para treinamento on-line e gratuito.
8. O <i>PubChem</i> pode oportunizar o estudo do idioma inglês.
Pontos negativos
1. Tanto o <i>PubChem</i> , quanto o seu tutorial, estão disponíveis apenas na língua inglesa, porém podem ser utilizados programas para tradução do texto.
2. É necessário um laboratório de informática com computadores ou dispositivos móveis com conexão à internet para que as atividades possam ser desenvolvidas.
3. É necessário que o professor ou supervisor tenha um conhecimento mínimo sobre a utilização de computadores e dispositivos móveis para resolver eventuais problemas em sua utilização.
4. Não existem recursos de acessibilidade para usuários com deficiências visuais, auditivas ou motoras.
5. Para a utilização da base, é necessário que o professor disponha de tempo em sua disciplina, pois os textos estão em inglês e pode ser necessário orientar os alunos a como traduzir os textos.

Fonte: Autores, 2025.

Frequentemente professores e pesquisadores relatam que o ensino e a aprendizagem de química têm enfrentado desafios frequentes nos últimos anos. Especialmente, devido ao menor engajamento e à

participação limitada dos alunos em sala de aula. Conseqüentemente, houve uma busca ascendente por métodos de ensino inovadores, no intuito de facilitar o processo de ensino-aprendizagem. Nesse contexto, o ensino baseado em recursos disponíveis na internet, conhecido como ensino pela web, surgiu como uma abordagem promissora para aumentar o engajamento e desenvolver habilidades de pensamento crítico pelos alunos (Iyamuremye; Twagilimana; Niyonzima, 2024).

Os desafios no ensino de Química não se restringem ao nível médio. Na maioria das Instituições de Ensino Superior, o ensino de química ainda é um desafio para os professores. Se por um lado, as aulas expositivas podem nivelar o conhecimento dos alunos; por outro, certos conceitos são discutidos com muito mais profundidade do que o conteúdo abordado no Ensino Médio. Além disso, o professor universitário frequentemente enfrenta grandes turmas, às vezes com alunos que falam outros idiomas e um público variável e heterogêneo, composto por alunos de diferentes origens e interesses (Fromm, 2021).

Neste contexto, o *PubChem* representa a uma fonte on-line inovadora, gratuita, atualizada e confiável de informações químicas. Esta confiabilidade é baseada nas significativas atualizações realizadas com frequência nos últimos dois anos. Segundo o último levantamento realizado em 2025, o *PubChem* contém mais de 1.000 fontes de dados, apresentando informações sobre 119 milhões de compostos e 322 milhões de substâncias. O painel de literatura permite que os usuários encontrem os artigos mais relevantes sobre um determinado composto ou substância (Kim *et al.*, 2025).

Embora os recursos tecnológicos aplicados ao ensino tenham sofrido um grande avanço durante a pandemia da covid-19, é importante lembrar que existem algumas desvantagens nesta metodologia baseada em tecnologia. É importante mencionar que aprender no computador e manter a concentração o tempo todo pode ser uma tarefa difícil para a maioria dos alunos. Além disso, experimentos online idealmente não deveriam substituir os laboratórios e experimentos dos alunos realizados de forma presencial. Além disso é importante mencionar que os alunos também podem desenvolver novas habilidades manuais durante os experimentos em laboratório (Babinčáková; Bernard, 2024).

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O *PubChem* corresponde a uma base de dados pública e gratuita de informações químicas para diversos compostos químicos, sendo uma excelente fonte de pesquisa para alunos, professores e pesquisadores. O site é constantemente atualizado por meio de compilação de informações obtidas de diferentes fontes.

Desta forma, o *PubChem* pode ser utilizado como uma ferramenta de ensino e de pesquisa para alunos, tanto do ensino médio quando o ensino superior. A riqueza de dados, permite que o aluno utilize a base de dados para estudo bioquímico estrutural e, especialmente no caso de medicamentos, para estudo da farmacocinética e farmacodinâmica de medicamentos.

Espera-se que futuramente, o *PubChem* desenvolva uma página voltada para a educação e ensino, como já ocorre em outras bases de dados como a *Protein Data Bank*, que possui o PDB-101, que corresponde a um portal de treinamento e extensão do site que apresenta atividades didáticas, resumos de moléculas de interesse biológico, entre outros. Uma página educacional vinculada ao *PubChem* poderia impulsionar o número de acessos ao site e criar um novo perfil de usuários.

CONFLITO DE INTERESSE

Não há conflito de interesse na presente pesquisa.

REFERÊNCIAS

- BABINČÁKOVÁ, M.; BERNARD, P. Evolution after the revolution: how classical and online school chemistry teaching has changed during the covid-19 pandemic? **J. Chem. Educ.**, v. 101, n. 3, p. 963-72, 2024 Feb. 27. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10939126/>. Acesso em: 20 ago. 2025.
- CORNELL, A. P., KIM, S., CUADROS, J., BUCHOLTZ, E. C., PENCE, H. E., POTENZONE, R.; BELFORD, R. E. IUPAC International Chemical Identifier (InChI)-related education and training materials through InChI Open Education Resource (OER). **Chemistry Teacher International**, v. 6, n. 1, p. 77-91, 2024. Disponível em: <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/cti-2023-0009/html#MLA>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- FROMM, K. M. General Chemistry: large classes, mixed public, three languages (a personal experience). **Chimia (Aarau)**, v. 75, n. 1-2, p. 39-44, 2021 Feb. 28. Disponível em: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33637145/>. Acesso em: 20 ago. 2025.
- HÄHNKE, V. D.; KIM, S.; BOLTON, E. E. PubChem chemical structure standardization. **J. Cheminform.**, v. 10, n. 1, p. 36, 2018 Aug. 10. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6086778/>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- IYAMUREMYE, A.; TWAGILIMANA, I.; NIYONZIMA, F. N. Examining the utilization of web-based discussion tools in teaching and learning organic chemistry in selected Rwandan secondary schools. **Heliyon**, v. 10, n. 20, p. e39356, 2024 Oct. 16. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11532257/>. Acesso em: 20 ago. 2025.
- KIM, S. Getting the most out of PubChem for virtual screening. **Expert. Opin. Drug Discov.**, v. 11, n. 9, p. 843-55, 2016 Sep. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5045798/>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- KIM, S. Exploring chemical information in PubChem. **Curr. Protoc.**, v. 1, n. 8, p. e217, 2021 Aug. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC8363119/>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- KIM, S.; CHEN, J.; CHENG, T.; GINDULYTE, A.; HE, J.; HE, S.; LI, Q.; SHOEMAKER, B. A.; THIESSEN, P. A.; YU, B.; ZASLAVSKY, L.; ZHANG, J.; BOLTON, E. E. PubChem 2019 update: improved access to chemical data. **Nucleic Acids Res.**, v. 47, n. D1, p. D1102-9, 2019 Jan. 8. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6324075/>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- KIM, S.; CHEN, J.; CHENG, T.; GINDULYTE, A.; HE, J.; HE, S.; LI, Q.; SHOEMAKER, B. A.; THIESSEN, P. A.; YU, B.; ZASLAVSKY, L.; ZHANG, J.; BOLTON, E. E. PubChem 2023 update. **Nucleic Acids Res.**, v. 51, n. D1, p. D1373-80, 2023 Jan. 6. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC9825602/>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- KIM, S.; CHEN, J.; CHENG, T.; GINDULYTE, A.; HE, J.; HE, S.; LI, Q.; SHOEMAKER, B. A.; THIESSEN, P. A.; YU, B.; ZASLAVSKY, L.; ZHANG, J.; BOLTON, E. E. PubChem 2025 update. **Nucleic Acids Res.**, v. 53, n. D1, p. D1516-25, 2025 Jan. 6. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11701573/>. Acesso em: 29 jul. 2025.
- KIM, S.; GINDULYTE, A.; ZHANG, J.; THIESSEN, P. A.; BOLTON, E. E. PubChem periodic table and element pages: improving access to information on chemical elements from authoritative sources. **Chem.**

Teach. Int., v. 3, n. 1, p. 57-65, 2021 Mar. Disponível em: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/34268481/>. Acesso em: 30 mai. 2025.

NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. PubChem Compound Summary for CID 2244, Aspirin. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Aspirin>. Acesso em: 26 ago. 2024.

PUBCHEM. PubChem: Explore chemistry, quickly find chemical information from authoritative sources. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. Acesso em: 15 mai. 2024.