DISCIPLINARUM SCIENTIA *Disciplinarum Scientia.* **Série: Naturais e Tecnológicas**
Santa Maria, v. 27, n. 3, p. 75-84, 2026
Recebido em: 25.03.2026. Aprovado em: 12.06.2026.
ISSN 2176-462X | DOI: doi.org/10.37779/nt.v27i3.5765

DO QUALITATIVO AO QUANTITATIVO: O USO DO PLANEJAMENTO FATORIAL NO ESTUDO DA CINÉTICA DE OXIDAÇÃO DA DIPIRONA EM AULAS DE QUÍMICA

FROM QUALITATIVE TO QUANTITATIVE: THE USE OF FACTORIAL DESIGN IN THE STUDY OF DIPYRONE OXIDATION KINETICS IN CHEMISTRY CLASSES

Lucas Repecka Alves[1] e Marco Antonio Guarizo[2]

RESUMO

O ensino tradicional de química no nível médio carece, muitas vezes, de contextualização, o que dificulta a compreensão dos alunos sobre como variáveis como concentração e temperatura interagem na cinética química. Para mitigar essa lacuna, este trabalho relata uma intervenção pedagógica que converteu um experimento tradicionalmente qualitativo, a oxidação da dipirona pelo hipoclorito de sódio (NaOCl), em um estudo quantitativo e modelável. Foi aplicado um planejamento fatorial para avaliar simultaneamente os efeitos da concentração de dipirona, da concentração de água sanitária e da temperatura no tempo de reação. Diferente do método tradicional de uma variável por vez, o planejamento experimental permitiu identificar interações complexas entre os fatores, as quais foram processadas no software livre GNU Octave para a geração de superfícies de resposta e gráficos de contorno. Os resultados demonstraram que o aumento da temperatura e da concentração de dipirona acelerou a reação em até 40 segundos, enquanto um efeito anômalo de retardamento foi observado para altas concentrações de água sanitária, provavelmente devido a variações de pH e rotas reacionais paralelas. O uso de ferramentas estatísticas e modelagem matemática permitiu que os alunos transcendessem a observação passiva, promovendo a alfabetização científica através de uma abordagem investigativa. Esta metodologia provou ser uma estratégia acessível, de baixo custo e robusta para integrar a ciência de dados e o rigor experimental ao ensino básico de química.

Palavras-chave: Cinética Química; Alfabetização científica; Química experimental.

ABSTRACT

Traditional chemistry teaching at the high school level often lacks contextualization, which hinders students understanding of how variables such as concentration and temperature interact in chemical kinetics. To mitigate this gap, this work reports a pedagogical intervention that converted a traditionally qualitative experimente, the oxidation of dipyrone by sodium hypochlorite (NaOCl), into a quantitative and modelable study. A factorial design was applied to simultaneously evaluate the effects of dipyrone concentration, bleach concentration, and temperature on reaction time. Unlike the traditional one-variable-at-a-time method, the experimental design identified complex interactions between factors, which were processed using the free software GNU Octave to generate response surfaces and contour plots. The results demonstrated that increasing temperature and dipyrone concentration accelerated the reaction by up to 40 seconds, while an anomalous retarding effect was observed for high bleach concentrations, likely due to pH variations and parallel reaction pathways. The use

1 Doutorando em Ciência dos Materiais. E-mail: lucasrepecka@estudante.ufscar.br. ORCID: https://orcid.org/0000-0001-5458-2403

2 Químico Industrial, Engenheiro Químico, Licenciado em Química e especialista em Ensino de Química E-mail: mguarizo@prof.educacao.sp.gov.br. ORCID: https://orcid.org/0009-0008-1978-5860

of statistical tools and mathematical modeling allowed students to transcend passive observation, promoting scientific literacy through an investigative approach. This methodology proved to be an accessible, low-cost, and robust strategy to integrate data science and experimental rigor into basic chemistry education

Keywords: *Chemical kinetics; Scientific literacy; Experimental chemistry.*

1 INTRODUÇÃO

Tradicionalmente, o ensino de cinética química no nível médio é pautado por abordagens puramente teóricas e abstratas, o que frequentemente resulta em um distanciamento entre o conteúdo programático e a realidade cotidiana do estudante. Sem a devida contextualização, os alunos apresentam dificuldades em analisar como variáveis fundamentais, como concentração e temperatura, interagem sistemicamente para determinar a velocidade das transformações químicas. Essa lacuna pedagógica limita o desenvolvimento da alfabetização científica, impedindo que o discente compreenda a ciência como um processo investigativo e não apenas como um acúmulo de fórmulas (Batista; Gomes, 2020; Pires; Sá, 2021; Souza *et al.*, 2024).

Para mitigar esse cenário, a experimentação surge como uma ferramenta essencial de engajamento. Entre as práticas passíveis de aplicação, a oxidação da dipirona pelo hipoclorito de sódio (NaOCl) destaca-se pela viabilidade econômica, segurança e pelo forte apelo visual proporcionado pela formação temporária de cátions radicais de coloração azul. Contudo, na maioria das propostas didáticas, esse experimento é explorado de forma estritamente qualitativa, servindo apenas como uma demonstração visual de que "a reação ocorreu", sem aprofundar a explicação dos mecanismos cinéticos subjacentes (Alves *et al.*, 2025; Pereira *et al.*, 2023; Suart; Marcondes, 2009).

Buscando transcender a observação passiva, este trabalho relata uma intervenção pedagógica realizada com alunos do 3° ano do ensino médio, na qual um experimento tradicionalmente qualitativo foi convertido em um estudo quantitativo e modelável. Através da aplicação de um planejamento fatorial 2^3 foram realizados oito experimentos variando-se simultaneamente a concentração de dipirona, a concentração de agente oxidante e a temperatura do meio (Liguori, 2017; Mutlu; Acar-Şeşen, 2018; Toledo; Ferreira, 2016).

Diferente do método tradicional de uma variável por vez, que é moroso e incapaz de detectar sinergias, o uso do planejamento fatorial permitiu identificar interações complexas entre os fatores. Complementarmente, o uso do software livre GNU Octave possibilitou a geração de superfícies de resposta, facilitando a visualização prática de conceitos complexos. Assim, este artigo apresenta uma metodologia acessível e reprodutível, desenhada para instigar o pensamento crítico e demonstrar que o rigor da análise estatística pode, e deve, ser integrado ao ensino básico de Química (Madeswara Guptha; Surendran; Gunda, 2025; Wall *et al.*, 2025).

2 MATERIAS E MÉTODOS

Os materiais utilizados foram a dipirona monoidratada da marca Difebril com concentração de 500 mg/mL e água sanitária da marca Candura com concentração de NaOCl de 2,5 %. Primeiramente, foram separados 8 erlenmeyers de 100 mL, onde foram adicionados 50 mL de água como substrato para a reação. Logo em seguida os erlenmeyers para as reações a 50 °C foram mantidos em banho maria para alcançar a estabilização de temperatura. Após a estabilização térmica, adicionou-se a quantidade de gotas de dipirona determinadas para cada ensaio, conforme os níveis (-1) e (+1) descritos na tabela 1, em cada erlenmeyer, agitando-os durante 5 segundos.

Tabela 1 - Planejamento fatorial 2^3 com as variáveis dipirona, água sanitária e temperatura o tempo de mudança de coloração aferido para a análise estatística.

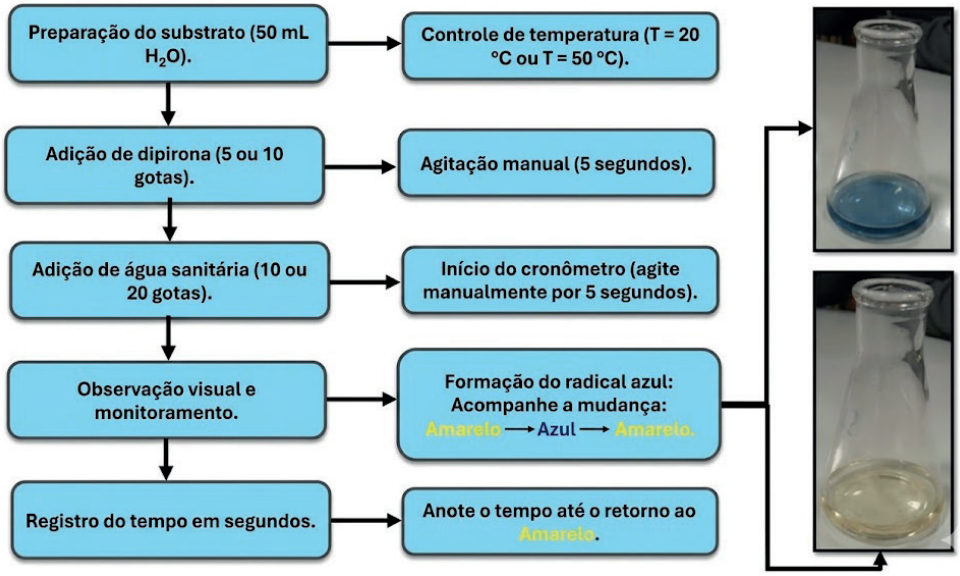
Experimento	Dipirona (gotas) v1	Água sanitária (gotas) v2	Temperatura (°C) v3	Mudança de coloração (s)
1	-1	-1	-1	82
2	-1	-1	1	15
3	-1	1	-1	101
4	-1	1	1	48
5	1	-1	-1	17
6	1	-1	1	4
7	1	1	-1	48
8	1	1	1	30

Dipirona (gotas): -1 = 5 (0,00037 mols) e 1 = 10 (0,00074 mols)
Água sanitária (gotas): -1 = 10 (0,00016 mols) e 1 = 20 (0,00033 mols)
Temperatura (°C): -1 = 20 °C e 1 = 50 °C

Fonte: Construção do Autor.

Posteriormente, com o auxílio de pipetas de Pasteur, foram adicionadas as respectivas quantidades de gotas de água sanitária apresentadas na tabela 1 nos erlenmeyers contendo a solução de dipirona. Após a adição da última gota de água sanitária, foi iniciado o cronômetro e agitada manualmente a solução durante 5 segundos, de coloração amarela. Em seguida, acompanhou-se a mudança de coloração da formação do radical azul até a coloração amarela novamente, anotando-se o tempo de reação em segundos. Na Figura 1 é apresentado um fluxograma do processo de reação para melhor visualização do experimento.

Figura 1 - Fluxograma do desenvolvimento experimental.



Fonte: Construção do Autor.

Com o seguinte planejamento fatorial de 2^3 foram analisados os efeitos, as interações entre cada variável e o gráfico de probabilidade onde foram calculados através do software gratuito Octave com a seguinte entrada: [efeito, porc]=fabi_efeito(X,y,erro_efeito,t). Nesse caso, o X refere-se à matriz do planejamento fatorial, as três variáveis e as suas interações com 7 efeitos possíveis, enquanto o y é relacionado à matriz da resposta a ser analisada. O erro de um efeito e o valor de t foram 0, pois nesse momento não havia sido realizadas réplicas para o cálculo do erro do efeito de modo a investigar quais variáveis tinham maior contribuição na variável dependente, nesse caso a mudança de coloração em segundos. A porcentagem dos efeitos foi determinada através da equação 1. Para efeito dos cálculos estatísticos, foi considerado um grau de confiança de 95% (Pereira; Pereira-Filho, 2018a; Serpa *et al.*, 2025).

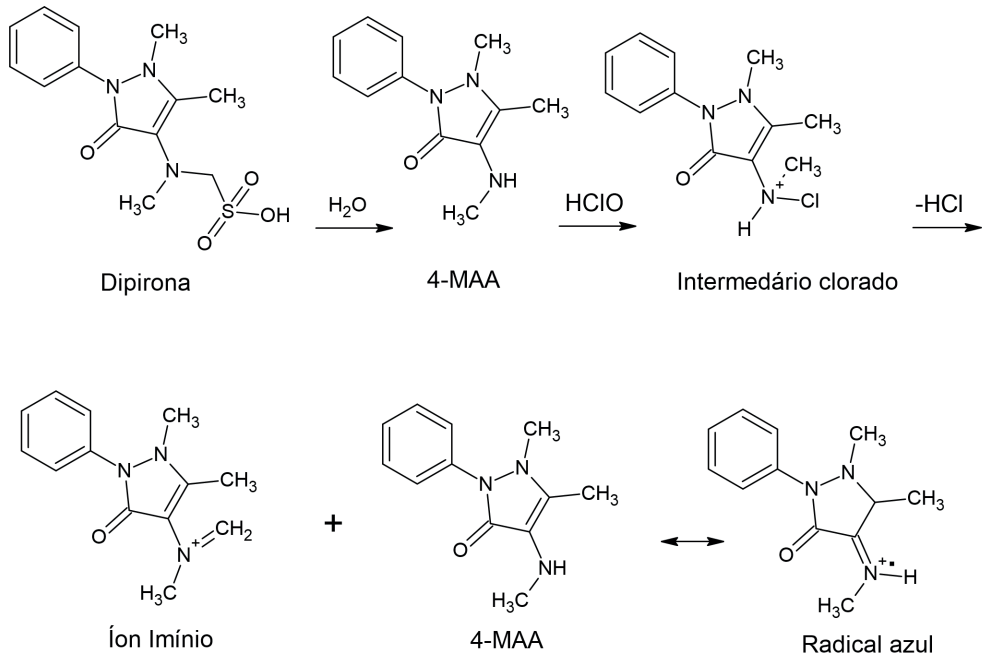
$$Porcentagem\ do\ efeito = \frac{Efeito}{\Sigma(Efeito^2)} \times 100 \quad (1)$$

A construção dos modelos matemáticos e a geração das superfícies de resposta e de contorno basearam-se nos coeficientes da equação do modelo. Tais coeficientes foram calculados como a metade do valor de cada efeito principal e de interação observado, enquanto o coeficiente linear (b0) foi definido pela média aritmética dos resultados dos oito experimentos realizados. Para a geração dos gráficos no software livre Octave, utilizou-se a função [superficie]=super_fabi2(X,passo), na qual o parâmetro X representa a matriz de planejamento fatorial e o passo determina a resolução da malha da superfície gerada.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ao analisar a reação química entre a dipirona e a água sanitária (Figura 2), é preciso compreender que o processo envolve etapas consecutivas. Inicialmente, em meio aquoso, a molécula de dipirona sofre hidrólise espontânea, resultando na perda do grupo metanossulfonato e na formação da 4-metilaminoantipirina (4-MAA) (Pérez-Estrada *et al.*, 2007). partir desse ponto, tem início a oxidação promovida pelo NaOCl e pelo ácido hipocloroso (HClO) presentes no meio. A 4-MAA reage com o HClO formando um intermediário clorado que, ao perder uma molécula de HCl, gera um íon imínio incolor. A etapa que determina a mudança visual do experimento é o desproporcionamento entre o íon imínio formado e a molécula de 4-MAA ainda presente no meio. Essa interação tem como resultado a formação de cátions radicais, conhecidos como radicais azuis, que apresentam uma estabilidade superior a outros radicais por conta da deslocalização eletrônica do anel pirazolônico (Bacil *et al.*, 2018). Dessa forma, tal radical permanece em equilíbrio com o íon imínio, que continua a ser consumido por outras reações oxidativas paralelas, o que causa a diminuição gradativa do cromóforo, até a sua descoloração (Uetrecht *et al.*, 1995)

Figura 2 - Esquema da reação química entre a dipirona e água sanitária com a formação do radical azul.

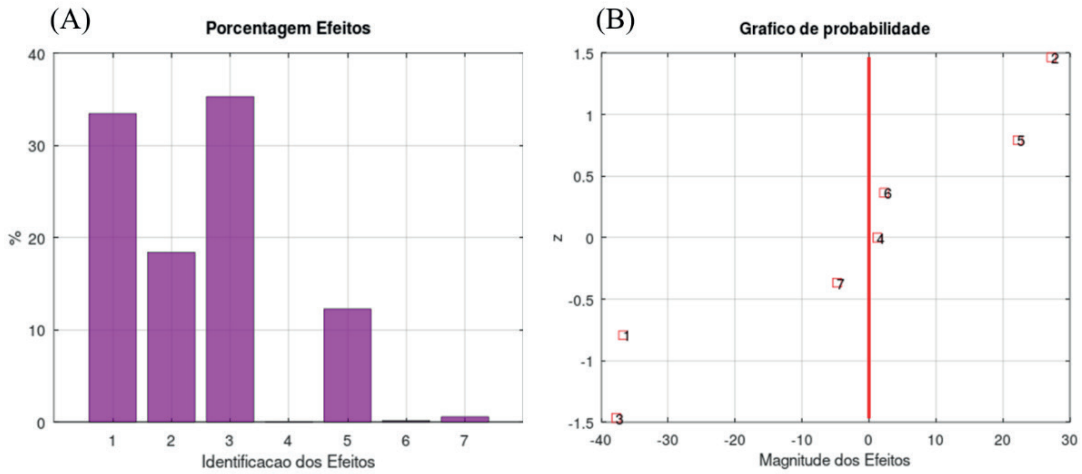


Fonte: Construção do autor.

Conforme a Figura 3 (A), que apresenta o gráfico da porcentagem dos efeitos, o efeito 3 associado à temperatura apresenta uma contribuição de aproximadamente 35%, enquanto o efeito 1 relacionado com a concentração de dipirona demonstra uma participação por volta de 32%, já o efeito 2 associado à concentração de água sanitária, exibe a menor participação entre os efeitos primários, por volta de 18%. Dessa forma, percebe-se que o efeito 3 e 1 referentes à temperatura e concentração

de dipirona, respectivamente explicam em conjunto 67% dos dados observados nos experimentos. Ademais, o efeito secundário 5 também apresenta modesta contribuição, por volta de 12% que se trata da interação entre a concentração de dipirona e a temperatura.

Figura 3 - Gráfico de porcentagem dos efeitos (A) e gráfico de probabilidade (B).



Fonte: Construção do autor.

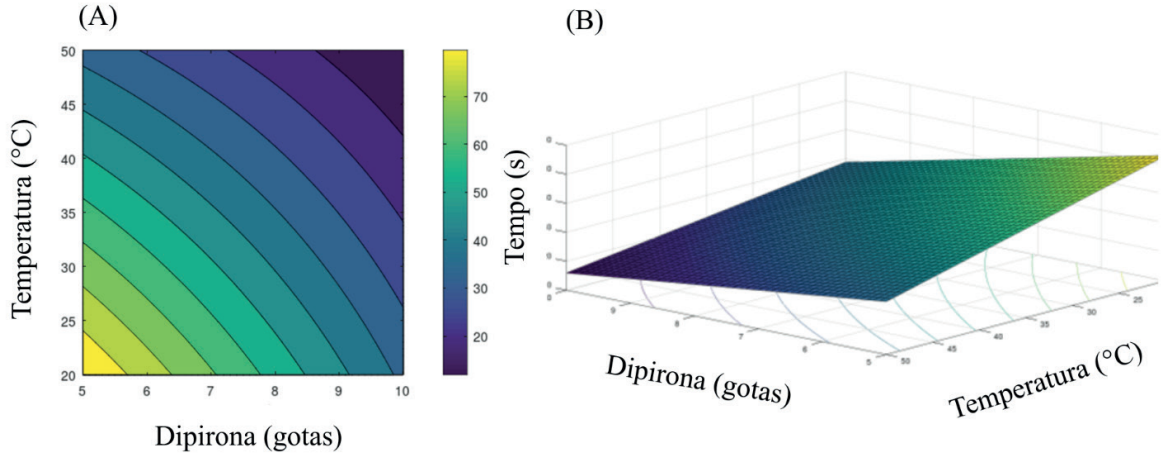
A Figura 3 (B) exibe o gráfico de probabilidade dos efeitos presentes no estudo. Ao analisar os efeitos 1 e 3, associados à concentração de dipirona e temperatura, respectivamente, nota-se que ambos os efeitos têm magnitude negativa, de aproximadamente -38, isso indica que ao empregar tais efeitos em níveis altos de concentração de dipirona e temperatura, a reação química pode ocorrer em menos de 40 segundos. Tal comportamento é esperado, dado que elevadas quantidades de substrato significam mais reagentes para reagir, o que consequentemente acelera a reação química (Brown *et al.*, 2004). Ademais, ao aumentar a temperatura do meio reacional ocorrem mais choques entre as moléculas dos reagentes, o que favorece maiores quantidades de colisões efetivas, dessa forma acelerando também a reação química (Atkins; Jones; Laverman, 2018)

Já o efeito 2 referente à concentração de água sanitária tem um comportamento oposto, com um efeito positivo por volta de 28, o que indica que ao empregar altas concentrações de água sanitária, a reação pode ser retardada em até 28 segundos, o que demonstra um comportamento anômalo na reação para a água sanitária, provavelmente devido à elevação do pH no meio reacional por conta da alta quantidade de água sanitária, que pode consequentemente diminuir a concentração do HClO, que se trata da espécie oxidante mais ativa (Deborde; Von Gunten, 2008). Além disso, nesse sistema um excesso de reagente como a água sanitária pode favorecer a formação de reações paralelas ou caminhos reacionais mais lentos, o que explica o fenômeno observado para a água sanitária (Uetrecht *et al.*, 1995). Quanto aos efeitos secundários, o efeito número 5 também se apresenta como positivo, cerca de 22 segundos. Dessa forma, ao empregar elevadas quantidades de dipirona com temperatura de 50 °C é possível retardar a reação em até 22 segundos, prolongando-a. Por fim, os efeitos 4, 6 e 7 encon-

tram-se próximos a linha vertical vermelha, o que indica que possivelmente não estão estatisticamente significativos para tal reação (Montgomery, 2017; Pereira; Pereira-Filho, 2018b; Serpa *et al*., 2025).

A seguir, na Figura 4 são apresentados o gráfico de contorno (A) e o gráfico de superfície de resposta (B) para as duas variáveis com maior contribuição no estudo, nesse caso a concentração de dipirona e a temperatura. Ao analisar o gráfico de contorno, percebe-se ao empregar elevadas quantidades de dipirona como 10 gotas e temperatura de 50 °C a reação pode ocorrer em menos de 20 segundos. Já o extremo oposto, quando é empregada baixas quantidade de dipirona, como 5 gotas e temperatura de 20 °C a reação pode ocorrer em mais de 70 segundos. Dessa forma, o presente estudo demonstra de forma didática que ao controlar tais variáveis dessa reação é possível demonstrar aos alunos durante aulas práticas de cinética química com reagentes acessíveis e baratos como a quantidade dos reagentes e a temperatura afetam a velocidade de uma reação química (Santos; Cicuto, 2025).

Figura 4 - Gráfico de contorno (A) e Gráfico de superfície de resposta (B) para a mudança de coloração em segundos.



Fonte: Construção do autor.

A aplicação desta prática no ambiente escolar permitiu observar um engajamento diferenciado dos alunos, que transcendeu a mera observação passiva de um fenômeno colorido. Ao introduzir o conceito de variáveis controladas e níveis de planejamento (níveis -1 e 1), os estudantes foram instigados a atuar como investigadores, compreendendo que a velocidade de uma reação não é um dado aleatório, mas um parâmetro que pode ser modelado e previsto (Toledo; Ferreira, 2016). Alinhado com o conteúdo teórico visto em aula, os alunos foram capazes de observar a teoria das colisões na prática, ao perceberem que a reação ocorre mais rápido ao aumentar a temperatura do meio reacional. Embora não tenha sido aplicada uma avaliação formal escrita imediatamente após a prática, a interação em sala demonstrou uma quebra na percepção tradicional da química como “receita de bolo” (Santos; Lima; Silva, 2021). O uso do software Octave para a geração das superfícies de resposta serviu como uma poderosa ferramenta visual, permitindo que os alunos conectassem o tempo medido no cronômetro com a inclinação dos gráficos, facilitando a compreensão da influência da temperatura e

da concentração de forma integrada e não isolada com reagentes de baixo custo e seguros para serem aplicados em qualquer escola (Liguori, 2017).

4 CONCLUSÃO

O presente trabalho demonstrou, de forma inovadora, a conversão de um experimento tradicionalmente qualitativo em um modelo quantitativo robusto, aplicado ao contexto do Ensino Médio. A investigação da cinética de oxidação da dipirona permitiu que os estudantes conectassem o fenômeno visual, a formação do radical azul, aos preceitos teóricos da cinética química e da teoria das colisões. Através do planejamento fatorial 2^3 foi possível isolar e quantificar a influência da temperatura e da concentração dos reagentes, evidenciando que o aumento dessas variáveis acelera a reação em até 40 segundos. Além disso, a análise estatística permitiu identificar comportamentos anômalos, como o efeito retardador do excesso de água sanitária, provavelmente devido à variação de pH e rotas paralelas, algo que dificilmente seria percebido sem o rigor do método quimiométrico. O uso do software Octave mostrou-se uma ferramenta pedagógica poderosa, transformando o tempo medido no cronômetro em superfícies de resposta visuais e interpretáveis. Conclui-se que a metodologia proposta é uma estratégia viável e segura para promover a alfabetização científica em qualquer ambiente escolar, utilizando materiais de baixo custo para elevar o nível da experimentação investigativa.

REFERÊNCIAS

ALVES, J. O. *et al.* Reações Químicas por Meio da Experimentação Investigativa: Relato de Uma Ação do PIBID Química UFGD. **Revista Processos Químicos**, v. 20, n. 37, 31 maio 2025.

ATKINS, P.; JONES, L.; LAVERMAN, L. **Princípios de Química - 7.ed.: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente**. [s.l.] Bookman Editora, 2018.

BACIL, R. P. *et al.* Electrochemical behaviour of dipyrone (metamizole) and others pyrazolones. **Electrochimica Acta**, v. 273, p. 358-366, 20 maio 2018.

BATISTA, J. DE S.; GOMES, M. G. Contextualização, experimentação e aprendizagem significativa na melhoria do ensino de Cinética Química. **Revista de Ensino de Ciências e Matemática**, v. 11, n. 4, p. 79-94, 22 jul. 2020.

BROWN, T. L. *et al.* **Quimica: la Ciencia Central**. [s.l.] Pearson Educación, 2004.

DEBORDE, M.; VON GUNTEN, U. Reactions of chlorine with inorganic and organic compounds during water treatment—Kinetics and mechanisms: A critical review. **Water Research**, v. 42, n. 1, p. 13-51, 1 jan. 2008.

LIGUORI, L. A Tasty Approach to Statistical Experimental Design in High School Chemistry: The Best Lemon Cake. **Journal of Chemical Education**, v. 94, n. 4, p. 465-470, 11 abr. 2017.

MADESWARA GUPTHA, P.; SURENDRAN, V.; GUNDA, R. Casting a Spotlight on Factorial Design: Exploring the Power of DoE for Experiment Screening and Optimization: A Mini Review. **Indian Journal of Pharmaceutical Education and Research**, v. 59, p. s406-s416, 24 abr. 2025.

MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments**. [s.l.] John Wiley & Sons, 2017.

MUTLU, A.; ACAR-ŞEŞEN, B. Pre-service Science Teachers' Understanding of Chemistry: A Factorial Design Study. **Eurasia Journal of Mathematics, Science and Technology Education**, v. 14, n. 7, p. 2817-2837, 4 maio 2018.

PEREIRA, F. M. V.; PEREIRA-FILHO, E. R. APLICAÇÃO DE PROGRAMA COMPUTACIONAL LIVRE EM PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS: UM TUTORIAL. **Química Nova**, v. 41, p. 1061-1071, 2018a.

PEREIRA, F. M. V.; PEREIRA-FILHO, E. R. APPLICATION OF FREE COMPUTATIONAL PROGRAM IN EXPERIMENTAL DESIGN: A TUTORIAL. **Química Nova**, v. 41, p. 1061-1071, set. 2018b.

PEREIRA, M. M. *et al.* EXPERIÊNCIAS CIENTÍFICAS COMO FORMA DE DESPERTAR O INTERESSE NO APRENDIZADO. **REVISTA FOCO**, v. 16, n. 9, p. e2991-e2991, 26 set. 2023.

PÉREZ-ESTRADA, L. A. *et al.* Degradation of dipyrone and its main intermediates by solar AOPs: Identification of intermediate products and toxicity assessment. **Catalysis Today**, Selected Contributions of the 4th European Meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA 4). v. 129, n. 1, p. 207-214, 15 nov. 2007.

PIRES, D. R. G.; SÁ, L. P. A experimentação no ensino de cinética química: buscando indícios da aprendizagem significativa. **Scientia Naturalis**, v. 3, n. 2, 25 set. 2021.

SANTOS, J. S. DOS; CICUTO, C. A. T. Materiais alternativos no Ensino de Química: um estudo exploratório. **Ensino & Pesquisa**, v. 23, n. 1, p. 198-209, 25 abr. 2025.

SANTOS, M. S.; LIMA, D. L. G. DE; SILVA, A. P. F. DA. CONCEPÇÕES DE PROFESSORES DE QUÍMICA EM FORMAÇÃO ACERCA DE ROTEIROS EXPERIMENTAIS E SUA IMPORTÂNCIA PARA O PROCESSO DE ENSINO-APRENDIZAGEM DURANTE O ENSINO REMOTO. **Encontro Internacional de Formação de Professores e Fórum Permanente de Inovação Educacional**, n. 12, 25 nov. 2021.

SERPA, E. T. B. *et al.* Eficiência da síntese e pureza da celulose bacteriana: efeitos sinérgicos entre cultivo e purificação. **Disciplinarum Scientia | Naturais e Tecnológicas**, v. 26, n. 3, p. 123-136, 17 out. 2025.

SOUZA, L. *et al.* Cinética química - um olhar sobre a literatura entre 1983 e 2021. **Química Nova na Escola**, v. 46, 1 jan. 2024.

SUART, R. DE C.; MARCONDES, M. E. R. A manifestação de habilidades cognitivas em atividades experimentais investigativas no ensino médio de química. **Ciências & Cognição**, v. 14, n. 1, p. 50-74, mar. 2009.

TOLEDO, E. J. DE L.; FERREIRA, L. H. Planejamento fatorial sob uma perspectiva investigativa com base na teoria de falseamento de Karl R. Popper. **Revista Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia**, v. 9, n. 3, 31 dez. 2016.

UETRECHT, J. P. *et al.* Oxidation of aminopyrine by hypochlorite to a reactive dication: possible implications for aminopyrine-induced agranulocytosis. **Chemical Research in Toxicology**, v. 8, n. 2, p. 226-233, mar. 1995.

WALL, B. J. *et al.* A Practical Start-Up Guide for Synthetic Chemists to Implement Design of Experiments (DoE). **ACS Catalysis**, v. 15, n. 11, p. 8885-8893, 6 jun. 2025.