



Metodologias Alternativas no Ensino de Química: O Uso do Software Avogadro para Compreensão de Propriedades Químicas no Ensino Superior

Alternative Methodologies in Chemistry Teaching: The Use of Avogadro Software for Understanding Chemical Properties in Higher Education

Júlio de Paula Campbell Oliveira,^a  Caroline Reis Santiago Paschoal,^{b,c}  Diego Fernando da Silva Paschoal^{a,*} 

^a Universidade Federal do Rio de Janeiro, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, Instituto Multidisciplinar de Química, Núcleo de Química Teórica Computacional de Macaé (NQTCM), CEP 27971-525, Macaé-RJ, Brasil

^b Universidade Federal do Rio de Janeiro, Centro de Ciências da Saúde, Faculdade de Farmácia, Laboratório de Hemostasia Experimental (LabHEX), CEP 21941-902, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^c Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Biodiversidade e Sustentabilidade (NUPEM/UFRJ), CEP 27965-045, Macaé-RJ, Brasil

*E-mail: diegopaschoal01@gmail.com
diegofspaschoal@macae.ufrj.br

Submissão: 22 de Setembro de 2024

Aceite: 6 de Fevereiro de 2025

Publicado online: 24 de Fevereiro de 2025

Computational chemistry for educational purposes combined with meaningful learning can contribute to students during the teaching and learning process, helping them with spatial visualization and the development of abstract and critical thinking. This study developed and applied a set of educational activities with the Avogadro program, addressing the contents of molecular structure, molecular geometry, stoichiometry, dipole moment, and polarity, in addition to evaluating the effectiveness of using this tool during the activities. Two classes were held for undergraduate chemistry students, with five activities that addressed various contents that are discussed in the topics worked on. Forms were applied before and after the practices. The students participating in the research, after carrying out the activities, reported that they would like to use computational tools in teaching activities. In addition, through the questionnaires, it was possible to perceive that the use of the Avogadro program allowed many students to overcome their difficulties in the topics covered. Thus, it can be concluded that meaningful learning combined with computational chemistry, aided using the Avogadro program, can generate a deeper knowledge of chemical concepts, facilitating the construction of relationships between theory and practice and promoting more active student engagement during classes.

Keywords: Computational chemistry; chemistry teaching; Avogadro; digital technologies; meaningful learning.

1. Introdução

A construção do conhecimento em química pode se tornar algo desestimulante e sem sentido para o estudante quando passa a ser trabalhado a partir de uma metodologia de ensino que envolve a memorização dos conteúdos (modelo transmissão-recepção), sem estabelecer relações com o seu contexto sociocultural.¹ Além disso, muitos conceitos são abstratos e de difícil compreensão, mesmo estando presente no cotidiano dos estudantes, sendo importante que o professor possa utilizar de metodologias que colaborem para promover um ensino de Química contextualizado.

As Tecnologias da Informação e Comunicação (TIC) têm se consolidado como ferramentas essenciais para o avanço da educação no século XXI, contribuindo para o desenvolvimento de habilidades e também de competências necessárias na sociedade atual.² Elas abrangem dispositivos, plataformas digitais e metodologias que facilitam a criação, o compartilhamento e a interação com o conhecimento. No Brasil as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDIC) ganharam maior relevância com a sua inclusão na Base Nacional Comum Curricular (BNCC) em 2018. Esse processo de integração avançou de forma abrupta quando houve a suspensão das aulas por causa da pandemia de COVID-19, forçando a adoção emergencial dessas tecnologias para garantir a continuidade do ensino.^{2,3} Nair e Karan⁴ enfatizaram que as TIC são importantes para engajar os alunos e promover experiências de aprendizado mais interativas, tornando o ambiente de sala de aula mais dinâmico. Esse impacto positivo está diretamente relacionado à atitude dos professores que devem desenvolver habilidades práticas no uso de recursos digitais e integrar as tecnologias de forma inovadora e reflexiva para atender às demandas do mundo cada vez mais tecnológico. Além disso, a educação tecnológica deve ir além somente do uso técnico, promovendo uma análise crítica sobre o impacto social, cultural e econômico.⁵ O uso das TIC no ensino de química já foi explorado através de modos específicos de integração, como visualizações digitais, laboratórios virtuais e bancos de

dados abertos. Esses recursos permitem aos professores abordarem conceitos complexos, como estruturas químicas submicroscópicas, de forma mais clara e interativa, por exemplo.³ Em contrapartida, a sua implementação eficaz exige formação docente, estratégias pedagógicas inovadoras e reflexões críticas sobre o seu uso. Esse trabalho se alinha a essa proposta, pois envolve a atuação de alunos do ensino superior, que poderão futuramente atuar como docentes em química.

Novas metodologias de ensino associadas ao uso de ferramentas educacionais computacionais, como as que apresentam visualização em três dimensões (3D), são alternativas que podem auxiliar professores no processo de ensino-aprendizagem.⁶ Assim, tecnologias digitais usadas adequadamente no processo de formação podem auxiliar na aprendizagem significativa dos conteúdos abordados em sala de aula.⁷

A aprendizagem significativa, para Ausubel *et al.*,⁸ descreve uma metodologia de ensino que faz uso do conhecimento prévio dos discentes, sendo assim, a construção do conhecimento parte de uma perspectiva contextualizada e relevante através de informações já obtidas pelos alunos. O processo de aprendizagem ocorre inicialmente com um novo conhecimento que seja potencialmente significativo e interessante para o aluno e, a partir dele, o discente avalia conhecimentos prévios presentes na estrutura cognitiva (subsunçor), facilitando a assimilação do conhecimento.⁸ Após a assimilação, o novo conhecimento fica retido pelo estudante, sendo descrito como um novo conhecimento modificado por meio do subsunçor (subsunçor modificado), que permanece na estrutura cognitiva do estudante após o processo de esquecimento. A partir disso, o subsunçor modificado passa a ser um novo facilitador para assimilação do novo conhecimento.⁸

Segundo Bacich e Moran,⁹ novos métodos e propostas de ensino são desenvolvidos e implementados buscando motivar o aluno, a partir do uso de tecnologias digitais e metodologias ativas de ensino.

A inserção de tecnologias digitais nos processos de ensino-aprendizagem auxilia no desenvolvimento do ensino por parte do docente, da aprendizagem por parte do aluno e na produção do conhecimento, trabalhando com diversidade e rapidez na obtenção das informações.¹⁰ Em adição, métodos baseados na resolução de problemas podem colaborar no desenvolvimento de uma aprendizagem ativa, onde se explora a elaboração e explicação dos alunos para a resolução dos problemas partindo dos conhecimentos prévios.¹¹ Dessa forma, o uso de metodologias ativas nos quais o discente vai ser parte presente, pode contribuir para o processo de aprendizagem sendo capaz de estimular o desenvolvimento de estratégias para a resolução dos problemas ou novas situações problemáticas.¹²

Considerando os processos cognitivos que ocorrem durante a aprendizagem em química, os programas que permitem a visualização do sistema químico também auxiliam no desenvolvimento da capacidade de imaginação

do aluno e na ampliação da visão espacial,^{13,14} além de desenvolver o pensamento abstrato.¹⁴ As ferramentas de Química Computacional englobam programas de mecânica molecular e mecânica quântica, e de edição e visualização molecular. Essas ferramentas podem ser empregadas para inúmeras finalidades de acordo com as suas funções, de tal forma a contribuir no processo de construção do conhecimento químico, proporcionando maior desempenho dos alunos nas capacidades de percepção, atenção, dentre outras.⁷ Ferramentas de edição e visualização molecular podem auxiliar os estudantes na compreensão de conceitos, tendo em vista que a química é uma ciência abstrata, o que aumenta a dificuldade dos estudantes no processo de aprendizagem advinda, principalmente, da dificuldade de compreensão dos fenômenos abordados sem o auxílio de ferramentas de visualização.^{13,15}

A compreensão dos fenômenos químicos está relacionada com a combinação de diferentes formas de representação do conhecimento em química.¹⁶ Tudo aquilo que é visível, que se pode tocar e que permite ser editável faz parte do conhecimento no nível macroscópico, enquanto aquilo que não pode ser visualizado (química atomística e molecular, dentre outros) faz parte do conhecimento microscópico. Além disso, o conhecimento em química associado a descrição por meio de representações usando símbolos e equações representa o conhecimento no nível representacional.^{15,16} Segundo Russell e colaboradores,¹⁷ essa tríade do conhecimento em química está contida no uso de diferentes ferramentas computacionais, onde o uso dos programas de química computacional permitirá relacionar todos os níveis do conhecimento em química, com ênfase para a visualização dos sistemas estudados, a qual tem se mostrado efetiva na melhoria do desempenho dos estudantes, como consequência de uma melhor compreensão dos conceitos químicos abordados.^{18,19} Além disso, tem despertado um aumento do interesse dos alunos durante o processo de aprendizagem,¹⁹ possibilitando maior engajamento dos estudantes para as atividades realizadas em sala de aula, principalmente, baseando-se na resolução de problemas.²⁰ Nesse contexto, programas computacionais podem ser usados como ferramentas capazes de auxiliar os alunos no processo de resolução de problemas, sendo uma ferramenta educacional capaz de corroborar com a aprendizagem significativa dos discentes.

Existem diversos programas de uso livre e comerciais disponíveis para edição e visualização molecular, com destaque para o programa Avogadro.²¹ O programa Avogadro é usado em química computacional para a visualização das representações de átomos e moléculas em 3D, disponível de forma gratuita, com suporte para as plataformas Windows, Linux e MacOS. É um programa de código aberto com interface gráfica, sendo utilizado nas áreas de bioinformática, modelagem molecular, ciência dos materiais, química computacional, dentre outras.²¹

Dentre as principais características do Avogadro estão suas ferramentas. O programa possui diferentes opções

para visualização das representações de átomos e moléculas incluindo ferramentas para a visualização das representações de orbitais atômicos e moleculares, superfícies de potencial eletrostático e espectros de infravermelho dos compostos. Possui um número grande de ferramentas para auxiliar e facilitar a construção de moléculas. Sistemas complexos podem ser construídos com o auxílio da inserção de fragmentos de moléculas e proteínas, o programa também disponibiliza ferramentas específicas para a construção de nanotubos de carbono e células unitárias.²¹

Assim, o presente estudo apresenta a elaboração e aplicação de práticas de química computacional, empregando o programa Avogadro, para auxiliar no processo de ensino-aprendizagem de conteúdos abordados na disciplina de Química Geral em cursos de graduação.

2. Metodologia

O presente trabalho possui natureza quali-quantitativa, de cunho descritivo. Essa metodologia possibilita uma compreensão mais aprofundada de eventos, fatos e processos, combinando dados quantitativos e qualitativos, conforme destacado por Schneider *et al.*²² Essa integração vai permitir correlacionar experiências observadas à teoria, analisando e apresentando os dados de maneira abrangente.²² A pesquisa dessa forma ocupa um lugar intermediário entre qualitativo e quantitativo, porque tende a incorporar elementos de ambas as abordagens para oferecer uma compreensão mais completa, conferindo maior credibilidade aos resultados, ao unir o embasamento teórico de dados estatísticos que validam as observações. No contexto da educação, a combinação de métodos quali-quantitativos possibilita descrever fenômenos observados e fundamentar essas descrições com evidências robustas. Além disso, Gatti,²³ ressalta que a convergência dessas abordagens confere maior credibilidade aos resultados, ao unir vasto embasamento teórico a dados estatísticos que validam as observações. Portanto, na pesquisa de educação em química, o uso de métodos quali-quantitativos, como o emprego de questionários de pré e pós-teste, podem promover uma visão ampliada e integrada do estudo.

Inicialmente, foram preparadas cinco atividades, realizadas em duas aulas com duração de três horas cada. Foram abordados tópicos selecionados do conteúdo programático da disciplina de Química Geral dos cursos de bacharelado e licenciatura em química, sendo estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação), estequiometria, geometria molecular, alotropia, momento de dipolo e polaridade. Esses tópicos foram escolhidos por serem comumente estudados na disciplina de Química Geral de diferentes instituições, de forma que as atividades possam ser replicadas ou adaptadas por outros docentes. O software Avogadro foi escolhido como ferramenta para o curso por ser de uso livre e disponível para as plataformas Windows, Linux e MacOS, beneficiando

os mais diversos alunos e professores. Para aplicação das atividades, tais conteúdos foram subdivididos para serem trabalhados em duas aulas: na primeira aula foram abordados os tópicos de estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação), estequiometria, geometria molecular e alotropia (Quadro S1), enquanto na segunda aula foram trabalhados os tópicos de momento de dipolo e polaridade (Quadro S1). Além disso, antes da realização das atividades, as ferramentas básicas do programa Avogadro foram apresentadas.

Para análise dos resultados durante a pesquisa, foram empregados formulários pré-aula e pós-aula, buscando analisar a potencialidade do uso do programa Avogadro como ferramenta no processo de ensino-aprendizagem dos conteúdos de química abordados. Na primeira aula os questionários pré-aula e pós-aula (Formulários S1 e S2, respectivamente) abordaram conhecimentos gerais sobre química computacional, as dificuldades no processo de aprendizagem em química e conceitos específicos dos tópicos abordados, com oito questões sendo abordadas. Os questionários pré-aula e pós-aula (Formulários S3 e S4, respectivamente) aplicados no segundo dia de aula abordaram as dificuldades apresentadas pelos alunos nos tópicos discutidos no dia, conceitos e conhecimentos específicos dos conteúdos, com três questões sendo abordadas.

Os alunos participantes da pesquisa haviam, anteriormente, realizado suas aulas regulares sobre os tópicos abordados na disciplina de Química Geral. A pesquisa foi conduzida em conformidade com a Lei nº 13.709/2018, Lei Geral de Proteção de Dados (LGPD), garantindo a omissão de quaisquer informações que pudessem identificar os candidatos. Antes dos questionários pré e pós-teste, foi apresentado e preenchido o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE), no qual foram explicados os possíveis danos e riscos envolvidos, enfatizando riscos emocionais como estresse, ansiedade e desconforto. Os participantes assinaram o documento, concordando em participar da pesquisa de forma voluntária, sem nenhum bônus associado. Os dados coletados serão armazenados por um período de cinco anos, preservando o sigilo e assegurando que sua utilização não cause qualquer tipo de prejuízo ou danos aos participantes. No primeiro dia participaram das atividades 11 discentes e no segundo dia houve a participação de cinco discentes.

3. Resultados e Discussão

Cinco atividades envolvendo a disciplina de Química Geral foram elaboradas e aplicadas durante dois dias. Somado a isso, visando avaliar o impacto da utilização do programa Avogadro no processo de ensino-aprendizagem, foram aplicados questionários pré-aula e pós-aula contendo questões relacionadas com os conteúdos trabalhados.

No primeiro dia de atividades os questionários aplicados possuíam duas partes principais, a primeira delas buscava

conhecer quais eram os conhecimentos que os alunos possuíam sobre a área da química computacional, enquanto a segunda parte dos questionários abordavam os temas de estrutura molecular (comprimento de ligação e ângulo), estequiometria, geometria molecular e alotropia.

Para compreender o padrão das próximas respostas, no questionário pré-aula os alunos participantes das atividades foram perguntados se possuíam conhecimentos prévios sobre a área de química computacional, sendo separados em alunos que possuíam conhecimento prévio e os que não possuíam. Dentre os participantes, 82% (9 participantes) assinalaram que possuíam conhecimento sobre a área e os demais 18% (2 participantes) disseram não possuir conhecimento. Os discentes também deveriam assinalar como eles classificariam a química computacional, as respostas dos participantes foram organizadas em grupos e são apresentadas na Tabela 1.

Em geral, as respostas dos estudantes apontam aspectos específicos da definição do termo química computacional, a União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC, do inglês *International Union of Pure and Applied Chemistry*) define a química computacional como “[...] uma disciplina que utiliza métodos matemáticos para o cálculo de propriedades moleculares ou para a simulação do comportamento molecular. Também inclui, por exemplo, planejamento de síntese, pesquisa de bancos de dados e manipulação de biblioteca combinatória”²⁴. Além disso, foi possível observar que os participantes, após a aula, conseguiram especular que a química computacional é capaz de descrever processos do cotidiano e que pode ser usada em atividades de ensino de química.

De acordo com Sousa e Ibiapina²⁵ é importante relacionar os conteúdos trabalhados em sala de aula com o cotidiano, sendo destaque em sua pesquisa que 51% dos alunos

estudam química no seu dia a dia por colaborarem em sua formação enquanto cidadãos e não apenas para aprovação em vestibulares. Isso demonstra que tão importante quanto ensinar o conteúdo, é fornecer informações que colaborem para sua formação pessoal e que isso faça sentido em seu cotidiano.

Os discentes que participaram das atividades no primeiro dia relataram, em sua totalidade, que possuem algum tipo de dificuldade durante o processo de aprendizagem dos conteúdos abordados em química, dentre elas incluem-se: compreensão dos conceitos químicos, visualização espacial etc. Após a realização das atividades todos os alunos relataram que superaram alguma dificuldade apresentada anteriormente (Tabela 2). Esse resultado vai de encontro com as percepções de Almeida, Borges e de Sá,²⁶ no qual os alunos encontraram como obstáculo para a compreensão da disciplina a interpretação de desenhos bidimensionais, imaginando como seriam se estivessem tridimensionais. Utilizando os programas de visualização de moléculas tridimensionais, os alunos vivenciam experiências mais satisfatórias relacionadas ao conteúdo, gerando ambientes motivadores, interativos e mais condizentes com a realidade. Porém, vale destacar que para ocorrer uma aprendizagem de forma efetiva, a atuação do professor como mediador dessa ferramenta se torna essencial.

A dificuldade com matemática foi a única não superada por todos os discentes que relataram possuí-la. No contexto das atividades propostas, principalmente geometria molecular, são trabalhadas competências que necessitam conhecimentos prévios de geometria. Martins, Freitas e Vasconcelos²⁰ relacionam a dificuldade dos alunos em compreender geometria molecular à não compreensão de matemática, onde não se aprende noções de profundidade, espaço, geometria espacial e plana.

Tabela 1. Descrição da química computacional na visão dos alunos participantes da atividade.

Respostas (alunos que possuíam conhecimento prévio em química computacional)	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
A química realizada em computadores que possui ferramentas capazes de auxiliar o desenvolvimento de projetos por meio da visualização espacial, da resolução de problemas, prevendo resultados, poupando tempo e recursos.	8	6
É o ramo da química que realiza simulações computacionais.	1	1
É o ramo da química que utiliza as ferramentas de programação do cotidiano.	1	-
É a química que descreve processos complexos do cotidiano.	-	2
É o ramo da química que usa ferramentas computacionais no ensino de química.	-	2
Não responderam	-	1
Respostas (alunos que não possuíam conhecimento prévio em química computacional)	Número de alunos	
A química que usa ferramentas computacionais para visualização e simulação de experimentos.	1	-
Não responderam.	1	-

Fonte: Elaborada pelos autores.

Tabela 2. Dificuldades apresentadas pré-aula e dificuldades superadas pós-aula na visão dos alunos participantes da atividade.

Dificuldades	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
Entendimento dos conceitos	7	7
Visualização espacial	9	10
Alto grau de abstração	3	4
Dificuldades com matemática	3	2

Fonte: Elaborada pelos autores.

Além disso, não foram relatadas dificuldades relacionadas à utilização de computadores ou outros dispositivos tecnológicos pelos participantes. Assim, conclui-se que a maior dificuldade relacionada ao uso de tecnologias no ensino é, na verdade, a não utilização dela, gerando o medo do desconhecido. Almeida, Borges e de Sá²⁶ enfatizam como é necessário investir, incentivar, aperfeiçoar e melhorar as práticas educativas com ferramentas tecnológicas, visto que grande parte dos estudantes considera o recurso tecnológico importante, mas não tiveram contato anteriormente.

Na terceira questão, os discentes foram abordados antes da aula sobre o uso de programas de química computacional nas atividades de ensino, obtendo 91% de respostas positivas, os demais participantes não gostariam de seu uso, justificando possuir pouca familiaridade com informática, ainda mais com programas complexos, com muitas funcionalidades e pouco intuitivos. Posteriormente à realização das atividades, todos os alunos assinalaram que gostariam de usar esses programas nas atividades de ensino, demonstrando interesse pelo programa utilizado. O software usado foi escolhido por diversos motivos funcionais, como ser gratuito, de fácil instalação e estar disponível para os sistemas operacionais mais utilizados, porém sua interface gráfica também foi levada em consideração, assim como o fato de ser bem intuitivo, com ícones que remetem facilmente a sua função e isso pode ter sido o motivo para a grande aceitação por parte dos estudantes após a prática.

Ainda na terceira questão, previamente a realização das atividades, os participantes elencaram quais seriam as vantagens necessárias que deveriam estar contidas nesses programas para usá-los (Tabela 3). A efetividade e o aumento da velocidade no processo de aprendizagem

Tabela 3. Aspectos necessários para o uso de softwares de química computacional na educação e aspectos observados após o uso do software Avogadro nas atividades realizadas.

Aspectos necessários para uso de softwares na educação	Número de alunos
Visualização espacial	7
Maior efetividade e velocidade na aprendizagem	3
Efetividade em pesquisa na área de química computacional	3
Aspectos observados após o uso do software Avogadro	Número de alunos
Visualização espacial	7
Velocidade e facilidade na construção do sistema e obtenção de dados	5
Não responderam	2

Fonte: Elaborada pelos autores.

foram descritos por 27% dos participantes. Além disso, após a realização das atividades os alunos citaram as vantagens que puderam observar durante a realização das atividades usando programas de química computacional, sendo a visualização espacial apontada pelas discentes como a maior vantagem observada durante a realização das atividades (64%), enquanto a velocidade e a facilidade na construção de um sistema químico e na obtenção de dados fora descrita por 46% dos participantes, outros 18% dos alunos não responderam quando questionados sobre as vantagens observadas.

O conteúdo de estrutura molecular (comprimento e ângulos de ligação) foi trabalhado usando os gases hidrogênio, nitrogênio e oxigênio e a molécula de água como modelos. Os alunos desenharam os compostos, realizaram uma otimização de geometria e mediram o comprimento e o ângulo de ligação (Figura 1). Posteriormente, compararam os dados obtidos no Avogadro com os dados experimentais das moléculas, observando que possuem um bom acordo entre os dados (Tabela 4). Além de ser realizada uma discussão visando a explicação da diferença entre os dados teóricos e experimentais.

Os alunos foram questionados sobre o conceito de comprimento de ligação na quarta questão dos formulários S1 e S2, suas respostas foram elencadas em

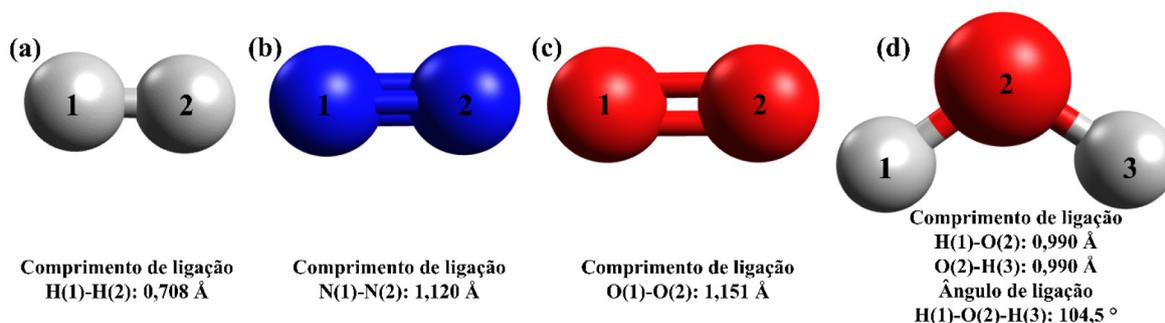
**Figura 1.** Comprimento e ângulo de ligação medidos no Avogadro para as moléculas de (a) H₂, (b) N₂, (c) O₂ e (d) H₂O. Fonte: Elaborada pelos autores. Imagem obtidas no programa Avogadro.¹⁷

Tabela 4. Dados experimentais para os comprimentos e ângulos de ligação das moléculas estudadas.^a

Moléculas	H ₂	N ₂	O ₂	H ₂ O
Comprimento de ligação (Å)	0,74	1,45	1,48	0,96
Ângulo de ligação (°)	180,0	180,0	180,0	104,5

^aDados experimentais obtidos de Haynes *et al.*²⁷. Fonte: Elaborada pelos autores.

diferentes grupos apresentados na Tabela 5. Os alunos em sua maioria descreveram o conceito de ligação química como “a distância entre o núcleo de dois átomos que formam uma ligação”, correspondendo a 73% dos participantes nos formulários aplicados antes e após a realização das atividades.

A descrição do conceito que define o comprimento de ligação não teve mudanças significativas na quantidade de alunos que apresentaram concepções alternativas, porém a partir das respostas obtidas na quinta questão observa-se uma mudança expressiva no número de alunos que compreenderam que para a identificação de uma molécula é necessário analisar os comprimentos de ligação, o ângulo formado entre os átomos e a conformação da molécula (Tabela 6). Em adição, houve uma diminuição no número de alunos que apontaram a geometria molecular como uma característica capaz de identificar uma molécula, uma vez que a geometria molecular organiza as moléculas em

determinados grupos de acordo com a posição espacial dos átomos. Também foi abordada a definição de geometria molecular para os alunos. Nesse caso não ocorreram mudanças significativas na descrição do conceito assinalado pelos discentes. Entretanto, ocorreu um aumento no número de alunos, de 73% para 82%, que descreveram a geometria molecular como a forma que os átomos de uma molécula se organizam no espaço.

O tópico de estequiometria foi trabalhado por meio do balanceamento da equação que descreve o processo de combustão da gasolina. Os alunos desenharam as estruturas dos compostos presentes na reação e, a partir do desenho (Figura 2), realizaram seu balanceamento. A reação de combustão da gasolina ocorre quando o n-octano (C₈H₁₈) é queimado pelo comburente (gás oxigênio – O₂), gerando gás carbônico (CO₂) e água (H₂O). Com a representação das moléculas desenhadas, os alunos balancearam a reação que descreve o processo de combustão da gasolina e encontraram

Tabela 5. Definições de comprimento de ligação descrita pelos participantes.

Definição de comprimento de ligação	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
É a distância entre os núcleos de dois átomos que formam uma ligação	8	8
É a distância dos elétrons de moléculas diferentes que estão realizando uma ligação	1	-
É a distância dos elétrons de átomos diferentes que estão realizando uma ligação	-	1
É a força de interação entre átomos formando uma ligação	2	1
Não responderam	-	1

Fonte: Elaborada pelos autores.

Tabela 6. Características necessárias para identificação de compostos.

Característica estrutural	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
Comprimento de ligação	6	7
Ângulo de ligação	10	11
Conformação	2	4
Geometria molecular	2	1

Fonte: Elaborada pelos autores.



Figura 2. Desenhos das moléculas usadas para balancear a reação de combustão do octano. Fonte: Elaborada pelos autores. Imagem obtidas no programa Avogadro.¹⁷

os coeficientes estequiométricos descritos na equação 1 usando o Avogadro como um programa de auxílio.



Foram elencadas (sexta questão) para os alunos afirmações que possuem correlação com os conteúdos estudados em estequiometria, onde eles podiam assinalar as opções que descreviam tópicos/conceitos do conteúdo de estequiometria. As respostas dos participantes são apresentadas na Tabela 7. Dessa forma, observa-se que ocorreu um aumento no número de discentes após a realização das atividades que marcaram a opção que descreve que a estequiometria se baseia na “Lei de conservação da massa” e na “Lei das proporções constantes”, 73% para 91% dos participantes. Outras respostas descritas pelos estudantes foram a correlação das unidades dos parâmetros calculados em estequiometria é fundamental para obtenção de dados, o número de alunos que assinalaram relação com o conteúdo de estequiometria aumentou de 55% para 82%. A resposta “tipos de ligação” elencada por 9% dos discentes antes de realizarem as atividades foi reduzida para nenhum aluno após a realização delas. Esse tópico descrito não faz parte dos conteúdos abordados em estequiometria, demonstrando que os alunos compreenderam a explicação durante a prática. E, por último, balanceamento de equações, no qual todos os participantes conseguiram correlacionar esse ponto com o tópico de estequiometria. Apesar de uma melhor compreensão do tópico, os discentes apresentaram dificuldades para conceber um método para resolução do balanceamento da equação usando o software, sendo necessário a intervenção do mediador. Esses resultados

corroboram com a pesquisa desenvolvida por Almeida, Borges e de Sá,²⁶ os quais enfatizam que apenas o uso de software pode não surtir muito impacto na aprendizagem quando não há um mediador no uso dessas ferramentas. Isso porque não apenas o professor apresentará a melhor maneira de usar a ferramenta computacional educacional, como ele terá a oportunidade de explicar a teoria enquanto aprendem a prática, tornando a aprendizagem mais significativa.

A geometria molecular foi abordada usando representações das moléculas de amônia (NH_3), tetrafluoreto de enxofre (SF_4), difluoreto de enxofre (SF_2) e trifluoreto de boro (BF_3). Foi realizada a construção dos compostos e a otimização da geometria usando o campo de força clássico UFF, onde a partir da estrutura otimizada foi identificada a geometria molecular das moléculas. Nessa atividade, o processo de otimização das geometrias é fundamental para obtenção de estruturas que representam adequadamente os compostos estudados. As geometrias visualizadas no Avogadro (Figura 3) para as moléculas de NH_3 , SF_2 e BF_3 são piramidal, angular e trigonal plana, respectivamente, de acordo com dados apresentados na literatura. Entretanto, o composto SF_4 não apresentou a geometria gangorra, isso ocorre devido aos campos de força implementados no Avogadro não descreverem adequadamente a influência dos pares de elétrons livres no cálculo de otimização de geometria.

Os questionários aplicados perguntavam aos alunos qual era a definição de geometria molecular (sétima questão). As respostas dadas pelos estudantes foram ordenadas em três grupos: (a) distribuição na qual os átomos se organizam no espaço, (b) distribuição na qual os átomos e pares de elétrons se organizam no espaço e (c) organização

Tabela 7. Números de alunos que assinalaram afirmações relacionadas com a estequiometria e que elencaram outros tópicos sobre estequiometria.

Afirmações relacionadas com o conteúdo de estequiometria	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
O balanceamento de equações é um tópico de estudo da estequiometria.	11	11
A estequiometria é baseada na “Lei de conservação das massas” e na “Lei das proporções constantes”.	8	10
Cálculos estequiométricos estão diretamente relacionados com as unidades dos parâmetros.	6	9
Outros tópicos sobre estequiometria elencados pelos alunos	Pré-aula	Pós-aula
Obtenção de parâmetros para reações químicas: reagente limitante, pureza, excesso e rendimento dos compostos.	3	2
Tipos de ligação.	1	-

Fonte: Elaborada pelos autores.

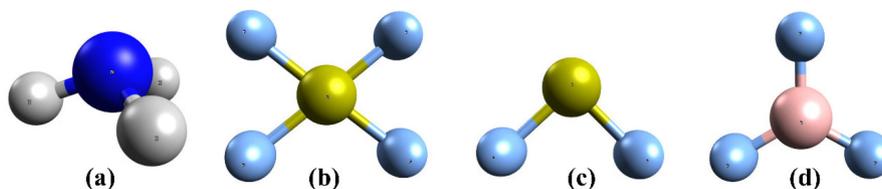


Figura 3. Estruturas otimizadas para as moléculas (a) NH_3 , (b) SF_4 , (c) SF_2 e (d) BF_3 .

Fonte: Elaborado pelo próprio autor. Imagens obtidas no programa Avogadro.

dos átomos que representa o estado de maior energia. O grupo (a) apresenta uma definição adequada para descrição da geometria molecular, porém, o grupo (b), é a definição de arranjo molecular, o grupo (c) é uma concepção alternativa apresentada por um único aluno. Ao comparar as respostas pré-aula e pós-aula observou-se um aumento no número de estudantes que definiram corretamente o conceito, sendo apontada por 73% dos discentes antes da atividade e, por 82% dos participantes após a atividade, além de ter sido observada uma diminuição no número de alunos que apontaram conceitos equivocados.

Martins *et al.*²⁸ concluem que a utilização de modelos que objetivam a visualização tridimensional das moléculas pode auxiliar em uma aprendizagem mais efetiva, visto que modelos tridimensionais facilitam também o entendimento de assuntos como ligações químicas, polaridade e estequiometria. Sendo assim, a aprendizagem do conhecimento químico usando ferramentas computacionais, não apenas permite a visualização 3D da molécula, mas também poderá auxiliar em outras teorias e conceitos abstratos, visto que a Química é repleta moléculas, símbolos e estruturas moleculares.

A visualização espacial foi um aspecto fundamental para a classificação das moléculas de acordo com sua geometria molecular (sétima questão), pois o auxílio das ferramentas computacionais ocasionou no aumento de 64% para 73% dos discentes que assinalaram a geometria piramidal para a

amônia, além de ocasionar uma redução de 36% para 18% dos discentes que relataram a geometria triângulo planar para a molécula. Houve uma melhora expressiva quando se trata da geometria molecular para o tetraflureto de enxofre, de 18% para 64% dos discentes que assinalaram a geometria gangorra, mesmo com os campos de força usados para otimização de geometria no Avogadro não representarem corretamente a geometria do composto. Para o difluoreto de enxofre, 55% dos discentes assinalavam que o composto apresenta geometria molecular linear, após a realização das atividades todos os discentes descreveram a geometria molecular como sendo angular (Tabela 9).

Com relação a alotropia, foram elencadas diversas afirmações para os alunos que assinalaram quais estão relacionadas com o tópico (oitava questão). A alotropia é definida como as diferentes modificações estruturais de um elemento. Os átomos que possuem esse comportamento mais comuns são o carbono (grafite, diamante, nanotubos, dentre outros), fósforo (vermelho e branco) e enxofre (monoclínico, rômboico, dentre outros).^{29,30} Foi abordado o tópico de alotropia com o auxílio do Avogadro para a visualização de fulerenos e nanotubos de carbonos, sendo discutidas diversas características e propriedades de compostos que apresentam alotropia. Após aplicação dos questionários (Tabela 10), observa-se que a quantidade de alunos que indicaram a definição de alotropia “diferentes modificações estruturais de um elemento” permaneceu inalterada após a realização das

Tabela 8. Definição de geometria molecular segundo os participantes.

Definição de geometria molecular	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
A forma que os átomos de uma molécula se localizam no espaço	8	9
A forma que os átomos e pares de elétrons de uma molécula se localizam no espaço	2	1
Organização dos átomos na forma mais energética	0	1
Não responderam	1	0

Fonte: Elaborada pelos autores.

Tabela 9. Classificação das moléculas de NH₃, SF₄ e SF₂ quanto a sua geometria molecular pelos alunos.

Moléculas	Geometrias	Número de alunos	
		Pré-aula	Pós-aula
NH ₃	Piramidal	7	8
	Triângulo planar	4	2
	Não sabiam/não responderam	-	1
SF ₄	Bipirâmide de base triangular	4	2
	Quadrado planar	3	-
	Tetraédrica	1	1
	Gangorra	2	7
	Não sabiam/não responderam	1	1
SF ₂	Angular	4	11
	Linear	6	-
	Triângulo planar	1	-

Fonte: Elaborada pelos autores.

atividades, correspondendo a 36% dos discentes. Também se manteve inalterado o número de alunos que marcaram a opção que a alotropia é a “propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas”, sendo indicada por 82% dos alunos. Ocorreu o aumento do número de alunos que assinalaram que átomos como o carbono, fósforo e enxofre apresentam formas alotrópicas, sendo 64% pré-aula e 73% pós-aula. Também houve aumento no número de alunos que marcaram a opção que o grafite e o diamante são formas alotrópicas do carbono (64% para 91% dos alunos). A representação dos alótropos de carbonos construídos no Avogadro (Figura 4) auxiliou na compreensão do tópico abordado, visto que houve um número maior de acertos após o uso do software. Segundo Schmidt *et al.*³¹ o uso de ferramentas que oferecem a representação em 3D de sistemas e conceitos complexos, como estruturas de alótropos, fornece no processo de aprendizagem uma compreensão mais aprofundada do tópico. Além disso, durante a sua execução foi possível perceber que os alunos permaneceram bem concentrados e animados, o que pode ser correlacionado ao fato de que essa atividade específica pode atrair a atenção dos alunos com as diferentes estruturas que podem ser construídas.

No segundo dia de atividades, os conceitos de momento de dipolo e polaridade foram abordados usando o etanal (C_2H_4O), clorometano (CH_3Cl), trifluoreto de boro (BF_3), amônia (NH_3) e tricloreto de boro (BCl_3). Foram usadas as ferramentas de construção de superfícies de potencial eletrostático e de exibição do vetor de momento de dipolo.

Além disso, foi abordada a identificação de moléculas quanto a sua polaridade e a relação da geometria molecular de uma molécula com o momento de dipolo.

As regiões da superfície que apresentam a cor azul possuem menor densidade eletrônica, enquanto regiões de coloração avermelhada possuem maior densidade eletrônica. Em moléculas polares será visível a diferença de cargas em determinados polos das moléculas, esses polos são gerados devido a não uniformidade na distribuição da densidade eletrônica nos compostos. Por outro lado, moléculas apolares apresentam a distribuição de cargas uniforme e possuem uma coloração esbranquiçada. Moléculas com muitos átomos que possuem partes polares e partes apolares também poderão ser identificadas (Figura 5).

Usando as superfícies de potencial eletrostático e o vetor de momento de dipolo (Figura 6), foi evidenciado que as moléculas C_2H_4O , CH_3Cl e NH_3 são classificadas como polares, como pode ser observado pela presença do vetor de momento de dipolo e a diferente distribuição de cargas na superfície de potencial eletrostático. Os compostos BF_3 e BCl_3 são classificados como apolares, pois essas moléculas não apresentaram o vetor de momento de dipolo e a distribuição de cargas ocorreu proporcionalmente. As moléculas de NH_3 , BF_3 e BCl_3 possuem três átomos iguais ligados a um átomo central e a diferente classificação das moléculas quanto a polaridade ocorre devido às diferentes geometrias moleculares, para a amônia (geometria molecular piramidal) o momento de dipolo não se anula, enquanto para BF_3 e BCl_3 (geometria molecular trigonal plana) essa propriedade se anula.

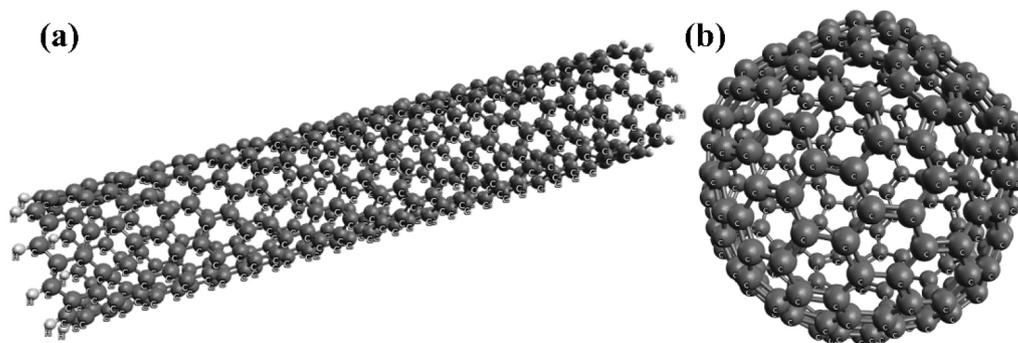


Figura 4. Alótropos do carbono construídos no programa Avogadro. (a) Nanotubo de carbono, (b) fullereno C240.
Fonte: Elaborada pelos autores. Imagem obtidas no programa Avogadro.¹⁷

Tabela 10. Número de alunos que assinalaram os conceitos com os tópicos de alotropia.

Conceitos	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
Diferentes modificações estruturais de um elemento	4	4
Propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas	9	9
Dentre os átomos que apresentam formas alotrópicas pode-se citar o carbono, fósforo e enxofre	7	8
Os alótropos do carbono são o grafite e o diamante	7	10

Fonte: Elaborada pelos autores.

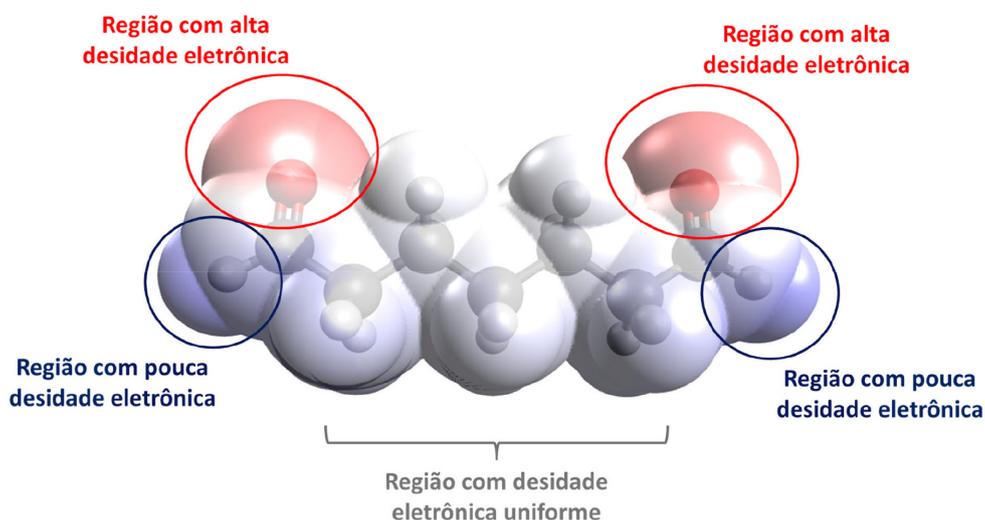


Figura 5. Superfície de potencial eletrostático. Fonte: Elaborada pelos autores. Imagem obtida no programa Avogadro.¹⁷

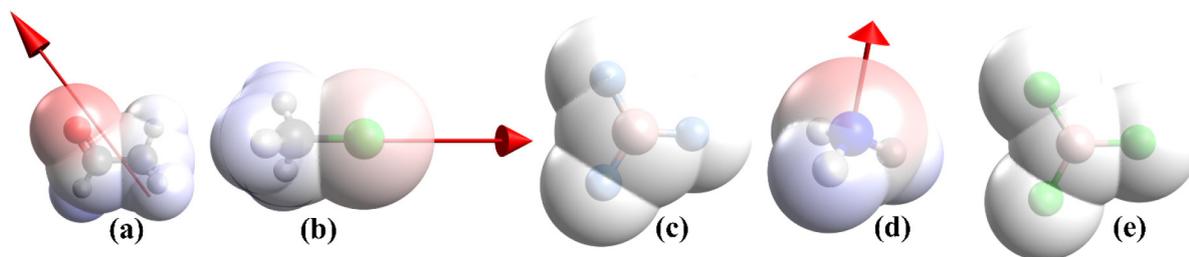


Figura 6. Vetor momento de dipolo e superfícies de potencial eletrostático para as moléculas de (a) C_2H_4O , (b) CH_3Cl , (c) BF_3 , (d) NH_3 e (e) BCl_3 . Fonte: Elaborada pelos autores. Imagens obtidas no programa Avogadro.¹⁷

Os formulários pré-aula (S3) e pós-aula (S4) para o segundo dia de atividades abordaram os temas de momento de dipolo e polaridade. Todos os discentes participantes da pesquisa relataram que possuem conhecimento sobre os conteúdos abordados.

Os principais conceitos que o uso do Avogadro auxiliou a superar as dificuldades dos alunos foi a compreensão da geração de momentos de dipolo parciais e a orientação do vetor resultante do momento de dipolo, pois nos dois tópicos houve uma redução de 80% para 20% dos discentes que relataram dificuldades. Os alunos relataram que não possuem dificuldade na identificação da eletronegatividade dos átomos presentes nas moléculas, porém 20% dos alunos apresentavam dificuldades para classificar as moléculas quanto a sua polaridade antes de participar das atividades. Realizada as atividades, nenhum aluno relatou apresentar dificuldade relacionada à identificação das moléculas quanto a sua polaridade.

Na segunda questão dos formulários S3 e S4 foram apresentados aos alunos conceitos abordando os principais tópicos discutidos sobre momento de dipolo e polaridade. Diversos alunos possuem dificuldade em compreender a relação entre propriedades físicas e ligações intermoleculares,³²⁻³⁴ além de diversas concepções alternativas sobre o tema. Porém, embora existam evidências de que a temática seja frequentemente considerada abstrata e de difícil compreensão, quando ensinada de forma correta

utilizando estratégias e recursos tecnológicos, como o software Avogadro, que facilitem sua compreensão e auxiliem os alunos a pensarem de forma crítica e criativa, o conhecimento pode ser efetivo.³⁵

Em relação aos conceitos abordados sobre momento de dipolo e polaridade (Tabela 11), ocorreu uma melhora significativa na percepção dos alunos quando abordados sobre a orientação do momento de dipolo e sua magnitude em moléculas poliátômicas, onde ele é dado pela soma de vetores. Enquanto antes da aula apenas 20% identificaram o conceito abordado, após a aula 60% conseguiram responder corretamente. A relação da distribuição de cargas nas moléculas devido a existência da eletronegatividade dos átomos gera polos sobre os átomos e, estão relacionadas com a orientação do momento de dipolo, onde 60% dos alunos marcaram a opção desse comportamento antes da aplicação, e após o uso da ferramenta computacional ocorreu um aumento para 80% dos participantes.

Os dados coletados na terceira questão dos formulários S3 e S4 (Tabela 12) mostram que os alunos não possuem dificuldades para a classificação de moléculas quando elas apresentam um átomo mais eletronegativo quando comparado aos demais. Para esses casos, 100% dos participantes acertaram a classificação das moléculas de C_2H_4O e CH_3Cl , sendo essas polares. Contudo, a existência de pares de elétrons livres causa dificuldades para os alunos classificarem os compostos. De forma geral, as moléculas

Tabela 11. Número de alunos que marcaram a opção relacionando os conceitos abordados com o conteúdo de momento de dipolo e polaridade.

Conceitos abordados sobre momento de dipolo e polaridade	Número de alunos	
	Pré-aula	Pós-aula
A capacidade de um átomo atrair mais densidade eletrônica para si gera dipolos parciais.	3	4
A orientação do momento de dipolo está relacionada com os conceitos de eletronegatividade de Pauling.	3	4
Para uma molécula poliatômica o momento de dipolo é a soma dos vetores dos momentos de dipolo gerados entre pares de átomos que realizam uma ligação química.	1	3
Moléculas que possuem momento de dipolo nulo são apolares. Todavia, aquelas que o momento de dipolo é não nulo são polares.	4	4
Nenhuma das afirmações acima correspondem aos conceitos de momento de dipolo e polaridade.	-	-

Fonte: Elaborada pelos autores.

de BF_3 , BCl_3 e NH_3 têm sua fórmula molecular expressa por XY_3 , no espaço a existência de um par de elétrons livre no átomo X ocasiona a alteração do comportamento planar das moléculas, assim sendo caracterizadas por meio de uma geometria molecular piramidal onde a soma dos vetores do momento de dipolo entre os átomos não se anulam.

Tabela 12. Classificação das moléculas quanto a sua polaridade.

Molécula	Pré-aula		Pós-aula	
	Apolar	Polar	Apolar	Polar
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$	-	5	-	8
BF_3	4	1	5	-
BCl_3	2	3	4	1
CH_3Cl	-	5	-	5
NH_3	3	2	2	3

Fonte: Elaborada pelos autores.

Furió e Calatayud²⁷ afirmam que os equívocos cometidos pelos alunos em áreas conceituais como ligações covalentes e estruturas de moléculas podem estar atrelados ao modelo tradicional de aprendizagem, tendo a causa de sua persistência relacionada ao fato de o ensino tradicional não levar em conta as formas de raciocínio que podem ser aplicadas para sua construção. Assim, a aprendizagem significativa que visa conectar o conhecimento prévio com o novo conhecimento e suas formas, demonstrou contribuir para a compreensão dos conceitos, aplicando um pensamento crítico capaz de modificar e/ou correlacionar concepções prévias após a prática. Todavia, para as moléculas de BF_3 e BCl_3 , que possuem geometria trigonal plana e caráter apolar, houve um aumento no número de alunos que conseguiram identificar corretamente esse comportamento. Para a molécula de BF_3 , 80% dos alunos identificaram corretamente no formulário pré-aula e 100% deles no questionário pós-aula, enquanto para a molécula de BCl_3 o aumento foi de 40% para 80% dos participantes. A amônia possui caráter polar e geometria molecular piramidal, o número de alunos que identificaram

corretamente a polaridade da molécula antes da aula foi de 40% e após foi de 60%. Dessa forma, o programa Avogadro foi uma ferramenta útil para o ensino desse conteúdo. Apesar da amostragem no segundo dia de atividades ter sido de apenas cinco alunos, os resultados mostram a potencialidade do software Avogadro, indicando que as práticas propostas podem ser exploradas para um número maior de alunos.

Na literatura, o uso do programa Avogadro²¹ é relatado no ensino de disciplinas de todas as áreas da química: físico-química,³⁷⁻⁴⁰ química analítica,⁴¹ química geral e inorgânica,^{28,39,42,43} e química orgânica.^{44,45} Conceitos como forças intermoleculares,⁴² polaridade,^{41,43} isomeria,^{38,45} geometria molecular e hibridização,^{26,39,40,42,44} e orbitais moleculares,^{37,43,44} além de conceitos no campo da óptica,³⁸ têm sido abordados na literatura.

O uso do Avogadro como ferramenta para auxiliar o ensino de química foi recebido positivamente pelos alunos que participaram das atividades propostas,^{26,39-42,45} e sua aplicação para o ensino de química mostrou-se eficiente, sendo possível atrair a atenção dos estudantes para os tópicos abordados,⁴⁵ oferecendo uma alternativa para métodos tradicionais de ensino,⁴³ potencializando a capacidade de entendimento dos tópicos abordados por meio da visualização espacial dos sistemas abordados.^{26,39,42,45} Existem diversas propriedades químicas que podem ser exploradas com o programa Avogadro para o ensino de Química, tais como geometria molecular, ligação química, polaridade, estequiometria, termoquímica etc.

De forma geral, para todos os tópicos abordados houve um aumento no número de alunos que assinalaram a correlação dos conceitos abordados com os tópicos trabalhados, além de um aumento no número de alunos que identificaram corretamente as características para identificação de moléculas e a classificação de moléculas quanto a sua polaridade. Além disso, a realização das atividades com o Avogadro apresentou vantagens no uso de ferramentas computacionais no ensino, no qual os participantes elencaram a visualização espacial, a

velocidade e facilidade na construção de sistemas e na obtenção de dados. Nesse contexto, mostrou-se que a metodologia de ensino empregada, com auxílio do programa Avogadro, durante as aulas foi capaz de auxiliar os alunos durante o processo de ensino-aprendizagem.

4. Conclusões

No presente trabalho foi desenvolvido um conjunto de cinco atividades, que foram aplicadas em dois dias de atividades com duração de três horas cada, para alunos da disciplina de Química Geral dos cursos de bacharelado e licenciatura em química visando avaliar a efetividade do uso do programa Avogadro como ferramenta auxiliar no processo de ensino-aprendizagem de química.

As cinco atividades foram desenvolvidas para serem aplicadas com o programa Avogadro, abordando os conteúdos de estrutura molecular (comprimento e ângulo de ligação), geometria molecular, estequiometria, alotropia, momento de dipolo e polaridade, apresentando um elevado número de conceitos para serem discutidos durante sua aplicação. Além disso, foram apresentadas as ferramentas do programa usadas e a resolução das atividades usando o Avogadro.

Na aplicação das atividades os discentes participantes responderam formulários pré-aula e pós-aula, que abordaram tópicos gerais de química computacional, as dificuldades apresentadas pelos discentes no processo de ensino-aprendizagem, a compreensão e identificação de conceitos e aplicação deles para a resolução das atividades realizadas.

Após a realização das atividades todos os alunos participantes relataram que desejariam usar ferramentas computacionais na aprendizagem, a possibilidade da visualização espacial e a maior efetividade e velocidade durante esse processo como as principais vantagens no uso dessas ferramentas. Os dados apresentados mostram que o Avogadro é uma ferramenta útil para auxiliar no processo de ensino-aprendizagem. Em todos os tópicos abordados houve um aumento no número de alunos que apresentaram maior entendimento dos conceitos, com ênfase para aqueles que envolviam visualização espacial, seja do composto, seus orbitais ou distribuições de carga. No entanto, cabe ressaltar que os formulários foram aplicados visando, principalmente, avaliar a possível efetividade do uso do software Avogadro como uma ferramenta para um aprendizado mais efetivo. Assim, estudos de maior duração e com um número maior de participantes devem ser considerados futuramente.

De forma geral, o Avogadro apresentou-se como uma ferramenta útil na compreensão de conceitos durante o processo de ensino-aprendizagem. As atividades realizadas com auxílio do programa colaboraram para a percepção dos discentes em vários conceitos abordados nos tópicos trabalhados.

Informações Suplementares

Quadro S1: Planejamento das atividades realizadas contendo o título da atividade, tutorial e informações teóricas. Formulário S1: Formulário pré-aula aplicado no primeiro dia com os tópicos de estrutura molecular, estequiometria, geometria molecular e alotropia. Formulário S2: Formulário pós-aula aplicado no primeiro dia com os tópicos de estrutura molecular, estequiometria, geometria molecular e alotropia. Formulário S3: Formulário pré-aula aplicado no segundo dia com os tópicos de momento de dipolo e polaridade. Formulário S4: Formulário pós-aula aplicado no segundo dia com os tópicos de momento de dipolo e polaridade.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à FAPERJ (E-26/201.336/2022 – BOLSA e SEI-260003/003401/2022; E-26/210.215/2022 e SEI-260003/000707/2022; E-26/200.325/2022 – BOLSA) e à CAPES (Código de Financiamento 001) pelo suporte financeiro.

Referências Bibliográficas

1. Mortimer, E. F.; Mol, G.; Duarte, L. P.; Regra do octeto e teoria da ligação química no Ensino Médio: Dogma ou Ciência? *Química Nova* **1994**, *17*, 243. [[Link](#)]
2. Santos, A. de A.; Giraffa, L.; Práticas avaliativas e tecnologias digitais da informação e comunicação: um estado do conhecimento a partir das bases de dados Redalyc e Scopus. *Revista Signos* **2024**, *45*, 116. [[Crossref](#)]
3. Aroch, I.; Katchevich, D.; Blonder, R.; Modes of technology integration in chemistry teaching: theory and practice. *Chemistry Education Research and Practice* **2024**, *25*, 843. [[Crossref](#)]
4. Nair, H.; S. P., K.; Knowledge, Attitude and usage of Information and Communication Technology (ICT) and Digital Resources in Pre-Service Teachers. *The New Educational Review* **2024**, *75*, 228. [[Crossref](#)]
5. Lobato Miranda, G.; Limites e possibilidades das TIC na educação. *Revista de Ciências da Educação* **2007**, *3*, 41. [[Link](#)]
6. da Trindade, J. O.; Hartwig, D. R.; Uso combinado de mapas conceituais e estratégias diversificadas de ensino: uma análise inicial das ligações químicas. *Química Nova na Escola* **2012**, *34*, 83. [[Link](#)]
7. Machado, A. S.; Uso de softwares educacionais, objetos de aprendizagem e simulações no ensino de Química. *Química Nova na Escola* **2016**, *38*, 104. [[Crossref](#)]
8. Ausubel, D. P.; Novak, J. D.; Hanesian, H.; *Psicologia Educacional*, 1a ed., Interamericana: Rio de Janeiro, 1980.
9. Bacich, L.; Moran, J.; *Metodologias ativas para uma educação inovadora: uma abordagem teórico-prática*, 1a ed., Penso Editora: Porto Alegre, 2018.

10. Bernardi, S. T.; Utilização de softwares educacionais nos processos de alfabetização, de ensino e aprendizagem com uma visão psicopedagógica. *Revista de Educação do IDEAU* **2010**, 5, 1. [[Link](#)]
11. Berbel, N. A. N.; A problematização e a aprendizagem baseada em problemas: diferentes termos ou diferentes caminhos? *Interface – Comunic, Saúde, Educ* **2** **1998**, 139. [[Crossref](#)]
12. Pozo, J. Ignácio.; *A Solução de Problemas: Aprender a Resolver, Resolver para Aprender*, 1ª ed., Penso Editora: Porto Alegre, 1998.
13. Jones, L. L.; Jordan, K. D.; Stillings, N. A.; Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. *Chemistry Education Research and Practice* **2005**, 6, 136. [[Crossref](#)]
14. Weintrop, D.; Beheshti, E.; Horn, M.; Orton, K.; Jona, K.; Trouille, L.; Wilensky, U.; Defining Computational Thinking for Mathematics and Science Classrooms. *Journal of Science Education and Technology* **2016**, 25, 127. [[Crossref](#)]
15. Gilbert, J. K.; *Em Visualization in Science Education* Springer Netherlands: Dordrecht, 2005.
16. Johnstone, A. H.; The development of chemistry teaching: A changing response to changing demand. *Journal of Chemical Education* **1993**, 70, 701. [[Crossref](#)]
17. Russell, J. W.; Kozma, R. B.; Jones, T.; Wykoff, J.; Marx, N.; Davis, J.; Use of Simultaneous-Synchronized Macroscopic, Microscopic, and Symbolic Representations To Enhance the Teaching and Learning of Chemical Concepts. *Journal of Chemical Education* **1997**, 74, 330. [[Crossref](#)]
18. Burke, K. A.; Greenbowe, T. J.; Windschitl, M. A.; Developing and Using Conceptual Computer Animations for Chemistry Instruction. *Journal of Chemical Education* **1998**, 75, 1658. [[Crossref](#)]
19. Ealy, J. B.; Students' Understanding Is Enhanced Through Molecular Modeling. *Journal of Science Education and Technology* **2004**, 13, 461. [[Crossref](#)]
20. Feller, S. E.; Dallinger, R. F.; McKinney, P. C.; A Program of Computational Chemistry Exercises for the First-Semester General Chemistry Course. *Journal of Chemical Education* **2004**, 81, 283. [[Crossref](#)]
21. Hanwell, M. D.; Curtis, D. E.; Lonie, D. C.; Vandermeersch, T.; Zurek, E.; Hutchison, G. R.; Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics* **2012**, 4, 17. [[Crossref](#)]
22. Schneider, E. M.; Araujo, R.; Fujii, X.; Corazza, M. J.; Pesquisas quali-quantitativa: contribuições para a pesquisa em ensino de ciências. *Revista Pesquisa Qualitativa* **2017**, 5, 569. [[Link](#)]
23. Gatti, B. A.; Estudos quantitativos em educação. *Educação e Pesquisa* **2004**, 30, 11. [[Crossref](#)]
24. Lok, M.; *The IUPAC Compendium of Chemical Terminology*, International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC): Research Triangle Park, NC, 2019.
25. de Souza, J. A.; Ibiapina, B. R. S.; A química e o cotidiano: concepções sobre o ensino de química nas salas de aula. *Revista EDUCAmazônia - Educação Sociedade e Meio Ambiente* **2021**, XIII, 209. [[Link](#)]
26. de Almeida, G. B.; Borges, R. S.; de Sá, É. R. A.; Simulações Computacionais: Uma Proposta de Transposição Didática no Ensino de Química. *RCT - Revista de Ciência e Tecnologia* **2021**, 7. [[Crossref](#)]
27. Haynes, W. N.; Lide, D. R.; Bruno, T. J.; *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 95a. ed, CRC Press, 2014.
28. Martins, M. G.; Freitas, G. F. G. de; Vasconcelos, P. H. M. de; A dificuldade dos alunos na visualização de moléculas em três dimensões no ensino de geometria molecular. *Conexões - ciência e tecnologia* **2020**, 14, 45. [[Crossref](#)]
29. Hartshorn, R. M.; Hellwich, K.-H.; Yerin, A.; Damhus, T.; Hutton, A. T.; Brief guide to the nomenclature of inorganic chemistry. *Pure and Applied Chemistry* **2015**, 87, 1039. [[Crossref](#)]
30. McNaught, A. D.; Wilkinson, A.; *The IUPAC Compendium of Chemical Terminology*, 2a ed., International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC): Research Triangle Park, NC, 2014. [[Link](#)]
31. Schmid, J. R.; Ernst, M. J.; Thiele, G.; Structural Chemistry 2.0: Combining Augmented Reality and 3D Online Models. *Journal of Chemical Education* **2020**, 97, 4515. [[Crossref](#)]
32. Taber, K. S.; Development of Student Understanding: a case study of stability and lability in cognitive structure. *Research in Science & Technological Education* **1995**, 13, 89. [[Crossref](#)]
33. Peterson, R. F.; Treagust, D. F.; Garnett, P.; Development and application of a diagnostic instrument to evaluate grade-11 and -12 students' concepts of covalent bonding and structure following a course of instruction. *Journal of Research in Science Teaching* **1989**, 26, 301. [[Crossref](#)]
34. Peterson, R. F.; Treagust, D. F.; Grade-12 students' misconceptions of covalent bonding and structure. *Journal of Chemical Education* **1989**, 66, 459. [[Crossref](#)]
35. Tarhan, L.; Ayar-Kayali, H.; Urek, R. O.; Acar, B.; Problem-Based Learning in 9th Grade Chemistry Class: 'Intermolecular Forces'. *Research in Science Education* **2008**, 38, 285. [[Crossref](#)]
36. Furió, C.; Calatayud, M. L.; Difficulties with the Geometry and Polarity of Molecules: Beyond Misconceptions. *Journal of Chemical Education* **1996**, 73, 36. [[Crossref](#)]
37. Melia, L. F.; Barrionuevo, S. D.; Ibañez, F. J.; Think Outside the Lab: Modeling Graphene Quantum Dots in Pandemic Times. *Journal of Chemical Education* **2022**, 99, 745. [[Crossref](#)]
38. Simpson, S.; Autschbach, J.; Zurek, E.; Computational Modeling of the Optical Rotation of Amino Acids: An 'in Silico' Experiment for Physical Chemistry. *Journal of Chemical Education* **2013**, 90, 656. [[Crossref](#)]
39. Snyder, H. D.; Kucukkal, T. G.; Computational Chemistry Activities with Avogadro and ORCA. *Journal of Chemical Education* **2021**, 98, 1335. [[Crossref](#)]
40. Simpson, S.; Lonie, D. C.; Chen, J.; Zurek, E.; A Computational Experiment on Single-Walled Carbon Nanotubes. *Journal of Chemical Education* **2013**, 90, 651. [[Crossref](#)]
41. Firmino, E. D. S.; Sampaio, C. D. G.; Nojosa, A. C. B.; Guerra, M. H. F. S.; Saldanha, G. C. B.; Vasconcelos, A. K. P.; Barroso, M. C. da S.; Uso do Software Avogadro no Ensino de Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE). *ENCITEC - Ensino de Ciências e Tecnologia em Revista* **2020**, 10, 67. [[Crossref](#)]

42. Listyarini, R. V.; Implementation of Molecular Visualization Program for Chemistry Learning. *Prisma Sains: Jurnal Pengkajian Ilmu dan Pembelajaran Matematika dan IPA IKIP Mataram* **2021**, *9*, 64. [[Crossref](#)]
43. Phankingthongkum, S.; Limpanuparb, T.; A virtual alternative to molecular model sets: a beginners' guide to constructing and visualizing molecules in open-source molecular graphics software. *BMC Research Notes* **2021**, *14*, 66. [[Crossref](#)] [[PubMed](#)]
44. Leal, R. C.; Neto, J. M. M.; Lima, F. D. C. A.; Feitosa, C. M.; A Química Quântica na compreensão de teorias de Química Orgânica. *Química Nova* **2010**, *33*, 1211. [[Crossref](#)]
45. Torres Quezada, C.; Varela Gangas, P.; Frías, M. V.; Flores-Morales, P.; Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. *Educación Química* **2017**, *28*, 91. [[Crossref](#)]