

DOI: <http://dx.doi.org/10.21577/1984-6835.20250011>

Informações Suplementares

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 (<https://orcid.org/0000-0002-8154-0919>) Caroline Reis
Santiago Paschoal,^{b,c} (<https://orcid.org/0000-0002-0274-4113>) Diego Fernando da Silva
Paschoal^{a,*} (<https://orcid.org/0000-0003-0817-2379>)**








^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*

[*diegopaschoal01@gmail.com](mailto:diegopaschoal01@gmail.com) ou diegofspaschoal@macae.ufrj.br

Quadro S1: Planejamento das atividades realizadas contendo o título da atividade, tutorial e informações teóricas.

Atividade	Tutorial	Informações Teóricas
Estrutura Molecular	a) Abra o Programa Avogadro; b) Desenhe as moléculas () de H ₂ , N ₂ , O ₂ e H ₂ O; c) Realize a otimização de geometria () de cada molécula usando o campo de força UFF e o algoritmo <i>Steepest Descend</i> ; d) Realize a medição do comprimento e ângulo de ligação dos átomos () para cada molécula clicando sobre um átomo após o outro para realizar sua seleção.	Uma das características usadas para auxiliar na identificação dos compostos, sendo definido como a “distância entre os centros atômicos envolvidos em uma ligação”. ^{1,2}
Estequiometria	a) Abra o programa Avogadro; b) Desenhe as moléculas () que descrevem o processo de combustão da gasolina: octano (C ₈ H ₁₈), gás oxigênio (O ₂), gás carbônico (CO ₂) e água (H ₂ O) (COLOCAR QUAIS MOLECULAS TEM QUE DESENHAR); c) Clique em Build>Insert>Fragment ; d) Aprecerá uma nova janela. Selecione octane.cml.	Avalia quantitativamente processos químicos relacionados a reações químicas. Os cálculos estequiométricos são baseados nas leis ponderais “Lei de conservação da massa” e “Lei das proporções constantes”, onde por meio de uma reação química balanceada é possível obter massa, quantidade de matéria (número de mols), volume, dentre outros parâmetros iniciais ou finais em uma reação química. ^{3,4}
Geometria Molecular	a) Abra o Programa Avogadro; b) Desenhe as moléculas () de NH ₃ , SF ₄ , SF ₂ e BF ₃ ; c) Realize a otimização de geometria () de cada molécula usando o campo de força UFF e o algoritmo <i>Steepest Descend</i> ; d) Realize a medição do ângulo de ligação dos átomos () para cada molécula clicando sobre três átomos para realizar sua seleção.	As geometrias moleculares são grupos determinados a partir do modelo de Repulsão de Pares de Elétrons de Camada de Valência (VSEPR), usados para categorizar e prever a forma que compostos apresentam no espaço. ³⁻⁵ Uma molécula apresentará sua geometria no espaço, de acordo com o modelo VSEPR, de forma a minimizar as repulsões entre os domínios eletrônicos – de átomos ou de pares de elétrons livres. ^{3,4} De forma geral, ocorre a diminuição das repulsões quando se minimiza o número de pares de elétrons livres, assim, interações entre pares de elétrons ocasionam maior repulsão quando comparado a interações entre pares de elétrons com ligações e entre pares de ligações. Além disso, a diminuição da ordem de ligação está diretamente relacionada com a minimização das repulsões, ordens de ligação mais elevadas apresentam maiores densidades eletrônicas entre os núcleos, da mesma forma átomos que apresentam menor eletronegatividade possuem comprimentos de ligação maiores, ocasionando a diminuição da densidade eletrônica entre os átomos. ⁵

		A influência dos pares de elétrons livres na geometria molecular pode ser visualizada na forma que apresentam. As geometrias moleculares angular, piramidal e gangorra apresentaram pares de elétrons livres no átomo central que causam a distorção da geometria para a diminuição do efeito das repulsões nos compostos. ³⁻⁵
Alotropia	<p>a) Abra o Avogadro</p> <p>b) Clique em Build > <i>Nanotube Builder</i> utilizando os parâmetros padrão do programa para o comprimento e diâmetro do nanotubo.</p> <p>c) Após, na barra superior clique em Build>Insert>Fragment>fullerenes>C240.cml e “Insert”.</p>	Alótropos são definidos pela IUPAC como “diferentes modificações estruturais de um elemento”. ^{1,6} As modificações estruturais ocasionadas nos elementos alteram suas propriedades físico-químicas. Os elementos mais comuns que possuem formas alotrópicas são o carbono (grafite, diamante, nanotubos, fulerenos, dentre outras), oxigênio (gás oxigênio, O ₂ ; e ozônio, O ₃), fósforo (branco e vermelho) e o enxofre (monoclínico e rômico). ⁷
Polaridade	<p>a) Abra o Programa Avogadro;</p> <p>b) Desenhe as moléculas () de C₂H₄O, CH₃Cl, BF₃, NH₃ e BCl₃;</p> <p>c) Na barra lateral “Displays types” deixe marcado apenas “Ball and Stick” e “Dipole”;</p> <p>d) Clique em extensions>create surfaces;</p> <p>e) Em uma nova janela que abrirá deixe o “Surface type” como Van der Waals, “Color by” como Eletrostatic Potential” e coloque para calcular.</p>	O momento de dipolo é uma propriedade vetorial, com a sua direção sendo dada considerando as cargas parciais da molécula. ⁴ Em moléculas poliatômicas, sua magnitude é descrita pela soma dos vetores gerados devido a diferença de eletronegatividade. ⁵ A figura 8 apresenta o vetor do momento de dipolo e a superfície de potencial eletrostático para o fluoreto de hidrogênio (a) e para água (b), onde a região de menor densidade eletrônica é descrita na coloração azul e a região de maior densidade na coloração vermelha.

Fonte: Elaborado pelos autores.

Formulário S1: Formulário pré-aula aplicado no primeiro dia com os tópicos de estrutura molecular, estequiometria, geometria molecular e alotropia.

1. Você já ouviu falar sobre química computacional? Sim Não

Como você descreveria a química computacional?

2. Quais são as dificuldades apresentadas no processo de aprendizagem dos conteúdos de química?

Entendimento dos conceitos Alto grau de abstração dos conteúdos

Dificuldade de visualização espacial Dificuldade com matemática

Outras:

3. Você gostaria de usar programas de química computacional durante as atividades de ensino?

Sim Não

Quais vantagens seriam necessárias para usar os programas de química computacional? Por quê?

4. Para você o que é o comprimento de uma ligação?

5. Quais características estruturais de uma molécula podemos usar para identificá-la?

Comprimento de ligação Ângulo entre os átomos Conformação

Outros:

6. Assinale as afirmações que você entende que estão relacionadas com a estequiometria.

() O balanceamento de equações é um tópico de estudo de estequiometria

() A estequiometria é baseada na “Lei de conservação das massas” e na “Lei das proporções constantes

() Cálculos estequiométricos estão diretamente relacionados com as unidades dos parâmetros calculados

Quais outros tópicos/conteúdos e/ou métodos você enxerga como fundamentais no estudo de estequiometria?

7. Para você o que é geometria molecular?

Dentro dos seus conhecimentos quais são as geometrias moleculares das moléculas abaixo?

a) $XeOF_4$:

b) NH_3 :

c) SF_4 :

d) ICl_4^- :

e) SF_2 :

8. Considerando seus conhecimentos, assinale as alternativas as afirmações relacionadas ao conceito de alotropia?

() Diferentes modificações estruturais de um elemento

() Propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas

() Dentre os átomos que apresentam formas alotrópicas pode-se citar o carbono, fósforo e enxofre

() Os alótropos do carbono são o grafite e o diamante

Formulário S2: Formulário pós-aula aplicado no primeiro dia com os tópicos de estrutura molecular, estequiometria, geometria molecular e alotropia.

1. Como você descreveria a química computacional?

2. Quais são as dificuldades superadas no processo de aprendizagem dos conteúdos de química usando programas de química computacional?

() Entendimento dos conceitos () Alto grau de abstração dos conteúdos

() Dificuldade de visualização espacial () Dificuldade com matemática

() Outras:

3. Você gostaria de usar programas de química computacional durante as atividades de ensino?

() Sim

() Não

Quais foram as vantagens apresentadas no uso dos programas de química computacional? Por quê?

4. Para você o que é o comprimento de uma ligação?

5. Quais características estruturais de uma molécula podemos usar para identificá-la?

() Comprimento de ligação () Ângulo entre os átomos () Conformação

() Outros:

6. Assinale as afirmações que você entende que estão relacionadas com a estequiometria.

() O balanceamento de equações é um tópico de estudo de estequiometria

() A estequiometria é baseada na “Lei de conservação das massas” e na “Lei das proporções constantes

() Cálculos estequiométricos estão diretamente relacionados com as unidades dos parâmetros calculados

Quais outros tópicos/conteúdos e/ou métodos você enxerga como fundamentais no estudo de estequiometria?

7. Para você o que é geometria molecular?

Dentro dos seus conhecimentos quais são as geometrias moleculares das moléculas abaixo?

f) $XeOF_4$:

g) NH_3 :

h) SF_4 :

i) ICl_4^- :

j) SF_2 :

8. Considerando seus conhecimentos, assinale as alternativas as afirmações relacionadas ao conceito de alotropia?

() Diferentes modificações estruturais de um elemento

() Propriedade manifestada por alguns elementos químicos que podem formar diferentes estruturas moleculares alterando suas propriedades físico-químicas

() Dentre os átomos que apresentam formas alotrópicas pode-se citar o carbono, fósforo e enxofre

() Os alótropos do carbono são o grafite e o diamante

Formulário S3: Formulário pré-aula aplicado no segundo dia com os tópicos de momento de dipolo e polaridade.

1. Dentre as dificuldades que podem ser apresentadas no estudo dos conceitos de momento de dipolo e polaridade descritas abaixo, quais você possui?

- Identificação da eletronegatividade dos átomos
- Compreensão sobre a geração de momento de dipolo parciais
- Orientação do vetor do momento de dipolo
- Classificação das moléculas em apolares ou polares
- Outras: _____

-
- Não apresento dificuldade com os conceitos de momento de dipolo e polaridade
 - Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade

2. Assinale as afirmações abaixo que você considera que estão relacionadas com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

- A capacidade de um átomo atrair mais densidade eletrônica para si gera dipolos parciais
- A orientação do momento de dipolo está relacionada com os conceitos de eletronegatividade de Pauling
- 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
- Moléculas que possuem momento de dipolo nulo são apolares, todavia aqueles que o momento de dipolo é não nulo são polares
- Nenhuma das afirmações acima correspondem aos conceitos de momento de dipolo e polaridade
- Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade

3. Para você as moléculas abaixo são apolares ou polares?

- | | |
|----------------------|--|
| a) C_2H_4O : _____ | b) CH_3Cl : _____ |
| c) BF_3 : _____ | d) NH_3 : _____ |
| e) BCl_3 : _____ | <input type="checkbox"/> Não sei classificar |

Formulário S4: Formulário pós-aula aplicado no segundo dia com os tópicos de momento de dipolo e polaridade.

1. Quais as dificuldades no estudo dos conceitos de momento de dipolo e polaridade descritas abaixo o uso do programa de química computacional auxiliou a superar?

- Identificação da eletronegatividade dos átomos
 Compreensão sobre a geração de momento de dipolo parciais
 Orientação do vetor do momento de dipolo
 Classificação das moléculas em apolares ou polares
 Outras: _____

-
- Não apresentava dificuldades com os conceitos de momento de dipolo e polaridade
 Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade

2. Assinale as afirmações abaixo que você considera que estão relacionadas com os conceitos de momento de dipolo e polaridade.

- A capacidade de um átomo atrair mais densidade eletrônica para si gera dipolos parciais
 A orientação do momento de dipolo está relacionada com os conceitos de eletronegatividade de Pauling
 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
 Moléculas que possuem momento de dipolo nulo são apolares, todavia aqueles que o momento de dipolo é não nulo são polares
 Nenhuma das afirmações acima correspondem aos conceitos de momento de dipolo e polaridade
 Não tenho conhecimento sobre os conceitos de momento de dipolo e polaridade

3. Para você as moléculas abaixo são apolares ou polares?

- f) C_2H_4O : _____ g) CH_3Cl : _____
h) BF_3 : _____ i) NH_3 : _____
j) BCl_3 : _____ Não sei classificar

Referências Bibliográficas

1. Lok, M.; *The IUPAC Compendium of Chemical Terminology*, International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC): Research Triangle Park, NC, 2019.
2. Minkin, V. I.; Glossary of terms used in theoretical organic chemistry. *Pure and Applied Chemistry* **1999**, *71*, 1919. [[Crossref](#)]
3. Atkins, P. W.; Jones, L. L.; *Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*, 5a. ed, Bookman: Porto Alegre, 2012.
4. Brown, T. L.; Lemay, H. E.; Bursten, B. E.; Catherine, J.; Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G.; Madu, J. D.; Thomson, C. A.; Cole, B.; Horton, H. R.; Moran, L.; Scrimgeour, K. G.; Perry, M.; *Química: a ciência central*, 13a. ed, Pearson: São Paulo, 2016.
5. Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G.; *Inorganic chemistry*, 5a ed., Pearson: Harlow, 2018.
6. 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](#)]
7. Feltre, R.; *Química: Química Geral – Volume 1*, 7a ed, Moderna: São Paulo, 2004.