ISSN: 2358-8829

O AVOGADRO COMO MEDIADOR ENTRE A TECNOLOGIA E APRENDIZADO: A MOLÉCULA DE NICOTINA COMO UM OBJETO DE APRENDIZAGEM

Maria Inês Pereira de Almeida [1]
Gabriel Lima da Silva [2]
Ryan Gabriel Neves de Oliveira [3]
Marcell Bezerra Rebouças Felix [4]
Jonathan Alves Rebouças [5]

INTRODUÇÃO

O surgimento de novas tecnologias e ferramentas computacionais expande os limites atuais da ciência, possibilitando a análise de problemas atuais por perspectivas nunca pensadas anteriormente. Em contrapartida, o ensino de ciências ainda enfrenta a barreira da abstração para a assimilação ativa dos conteúdos. Libâneo (2006) explica que a educação é intrinsecamente subordinada às relações sociais em dado contexto histórico, dessa forma estando sujeita a ser afetada pelas transformações decorridas do rápido avanço tecnológico. Dessa forma, a utilização de ferramentas eficazes e promissoras no ensino de assuntos microscópicos e moleculares tornam-se relevantes para o meio educacional. Nesse contexto, compreender como ferramentas de modelagem molecular afetam o processo de ensino e aprendizagem é crucial para lidar com a abstração teórica dos conteúdos de ciências.

Em seu trabalho, Oliveira, Paschoal e Paschoal (2025) apontam que existe uma grande variedade de programas livres e comerciais que possibilitam a visualização de orbitais e a construção de moléculas ou sistemas complexos por meio da manipulação ou visualização molecular. Dentre eles, os autores destacam o Avogadro, um software de código aberto e gratuito, que com recursos diversificados que permite a abordagem interdisciplinar entre as ciências e um aprendizado mais significativo por meio da visualização. Dessa forma, o

[1] Graduanda do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, ines.almeida11@aluno.ifce.edu.br;
[2] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, lima.gabriel05@aluno.ifce.edu.br;
[3] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, neves.gabriel61@aluno.ifce.edu.br;
[4] Graduando do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, marcell.bezerra06@aluno.ifce.edu.br;
[5] Professor orientador: Doutor em Física, professor do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE, jalvesreboucas@ifce.edu.br.

ISSN: 2358-8829

avogadro pode ser utilizado como ferramenta auxiliar para a abordagem de diversos conteúdos a partir de uma única molécula, sendo possível compreender de forma mais aprofundada a geometria molecular a partir da visualização, ou até o estudo de vetores, por meio das coordenadas disponibilizadas pelo software.

Com isso, o presente estudo visa explorar o software Avogadro como uma ferramenta mediadora entre a tecnologia e o aprendizado, tratando o modelo digital da nicotina como recurso didático. O trabalho surge a partir de uma atividade proposta na disciplina de Física 1 no curso de Licenciatura em Química do IFCE - Campus Iguatu, que consistiu na aplicação de vetores para determinar o tamanho de ligação e dos ângulos da molécula de nicotina, utilizando o software Avogadro como ferramenta complementar para os cálculos realizados. Para aferir a precisão dos dados obtidos com o uso da ferramenta, os resultados obtidos foram posteriormente comparados com os dados disponíveis no Pubchem.

METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)

Para definir a molécula a ser trabalhada, foi realizado um sorteio no qual resultou a molécula de nicotina. Para o cálculo da distância de ligação e dos ângulos, a molécula foi construída no Avogadro e submetida a otimização em sua conformação a partir do Open Babel, recurso presente no programa, considerando três campos de força: GAFF, UFF e MMFF94. Na estrutura molecular exibida pelo Avogadro, a escolha dos ângulos e das ligações priorizou a seleção de átomos próximos a um dos átomos de nitrogênio para a análise geométrica.

As coordenadas de cada átomo i foram extraídas e representadas em coordenadas cartesianas tridimensionais, como $Ri = xi\hat{\imath} + yi\hat{\jmath} + zik$. Dessa forma, o vetores $R_{2.1}$ e $R_{2.3}$ podem ser descritos por:

$$\vec{R}_{2\cdot1} = (x_1 - x_2)\,\hat{i} + (y_1 - y_2)\,\hat{j} + (z_1 - z_2)\,\hat{k}$$

$$\vec{R}_{2\cdot3} = (x_3 - x_2)\,\hat{i} + (y_3 - y_2)\,\hat{j} + (z_3 - z_2)\,\hat{k}$$

A distância entre cada átomo foi calculada a partir do módulo do vetor formado, que corresponde ao tamanho de cada ligação. Para os vetores $R_{2.1}$ e $R_{2.3}$, as fórmulas utilizadas foram:

ISSN: 2358-8829

$$|R_{2.1}| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$$

$$|R_{2.3}| = \sqrt{(x_3 - x_2)^2 + (y_3 - y_2)^2 + (z_3 - z_2)^2}$$

Nesse sentido, a variação vetorial dada pela subtração entre a componente final e a componente inicial em determinada direção, expressa como X_f - X_i refere-se ao vetor deslocamento, sendo consequentemente o vetor correspondente à ligação a ser analisada. Os resultados obtidos no cálculo do módulo serão utilizados para calcular o ângulo formado entre os dois vetores, sendo este o ângulo da ligação, representado por Φ (phi) e compreendido entre 0° e 180°.

$$\Phi = arccos\left(\frac{\vec{R}_{2.1} \cdot \vec{R}_{2.3}}{|R_{2.1}|.|R_{2.3}|}\right)$$

Sua fórmula consiste na aplicação da função arco cosseno ($\cos^{-1}$) à razão entre o produto escalar dos dois vetores e o produto de seus respectivos módulos, como demonstrado acima. Em relação ao produto escalar, pode-se obter a partir da soma dos produtos de suas componentes, como mostrado abaixo:

$$\vec{R}_{2.1} \cdot \vec{R}_{2.3} = (x_1 - x_2)(x_3 - x_2) + (y_1 - y_2)(y_3 - y_2) + (z_1 - z_2)(z_3 - z_2)$$

A fim de avaliar a precisão dos cálculos de cada campo de força, os resultados obtidos foram comparados com os dados disponíveis na base de dados Pubchem, e a média das diferenças absolutas foi calculada.

REFERENCIAL TEÓRICO

Uma das maiores dificuldades no ensino de ciências é a alta abstração necessária por parte dos estudantes para a compreensão de determinados fenômenos, como relatam Gregório, Oliveira e Matos (2016) no contexto da biologia. A ciência abrange um campo de estudo amplo, que se estende do nível microscópico ao macroscópico (Oliveira *et al.,* 2023). Por isso, o uso de estratégias e ferramentas complementares que auxiliem no desenvolvimento do pensamento crítico científico e da capacidade de aplicação prática do conhecimento teórico

ISSN: 2358-8829

torna-se indispensável tanto para o processo de ensino, quanto para a formação de docentes. Nesse cenário, o uso de ferramentas computacionais ganha destaque na discussão.

Com base nisso, vale analisar as vantagens e as limitações do software Avogadro no ensino de Ciências. A literatura reúne diversos trabalhos sobre sua aplicação em sala de aula que analisam os impactos da ferramenta na aprendizagem. É inegável que o programa possui aplicações e recursos diversificados, atuando na visualização, construção e edição ou análise conforme Batista *et al.,* (2018) abordaram em seu trabalho. Somado a isso, o estudo de Oliveira *et al.,* (2023) traz resultados relevantes para a discussão, indicando que embora o software pareça inicialmente complexo para os discentes que possuem dificuldade com informática, ao final das atividades todos os participantes consideraram a experiência positiva. Os autores concluem ainda que, em todos os conteúdos abordados houve um aumento na quantidade de alunos que compreenderam, especialmente os tópicos que exigiam visualização espacial do composto.

Por outro lado, o uso do software enfrenta limitações. A primeira delas diz respeito à formação docente deficiente quanto à utilização de novas tecnologias na prática pedagógica. Barbosa, Mesquita e Paiva (2025) apontam que parte dos professores não se sentem seguros ao utilizar ferramentas em aula, o que reforça a necessidade de adequar os processos formativos iniciais e continuados dos professores. Outra questão a avaliar é a implementação do uso de tais metodologias, podendo ser um desafio em determinadas regiões do país que carecem de equipamentos de informática ou acesso à internet. Do ponto de vista técnico, o programa se baseia em equações da mecânica clássica para realizar os cálculos, podendo apresentar desvios nos dados fornecidos quando utilizado em estudos moleculares mais complexos, que necessitam de cálculos quânticos (di Felice *et al.*, 2023).

Apesar das ressalvas acima, o software permanece como uma ferramenta promissora para o ensino de ciências, pois ajuda a superar a alta abstração dos conteúdos por meio da visualização e manipulação molecular. A ferramenta possibilita também a interdisciplinaridade entre química, física e biologia, permitindo o estudo de temas como moléculas bioativas, psicoativas, vetores, geometria molecular, ou até alotropia.

Sob essa perspectiva interdisciplinar, o estudo de Camargo, Silva e Santana (2025) buscou compreender os fundamentos dessa abordagem, seus obstáculos e estratégias a partir da Base Nacional Comum Curricular (BNCC). Os autores defendem que a interdisciplinaridade se caracteriza como uma necessidade para a formação de sujeitos críticos, que dialoguem e integrem conhecimentos de diferentes áreas. A pesquisa reforça que a articulação de diversas áreas do conhecimento contribui para a formação de vínculos

ISSN: 2358-8829

significativos e uma aprendizagem mais profunda, e que a interdisciplinaridade já está presente de forma implícita nas competências gerais da BNCC. Os apontamentos de Camargo, Silva e Santana (2025) são corroborados pela discussão de Martins e Nunes (2022), que ao analisarem o ensino fundamental destacam que atividades lúdicas interdisciplinares possuem grande potencial na construção do conhecimento científico.

A despeito dos pontos apresentados, existe ainda um aspecto indispensável para articular a interdisciplinaridade, softwares e ensino de ciências. Aguiar e Flôres (2014) conceituam objetos de aprendizagem (OAs) como ferramentas de aprendizagem caracterizados por potencial reusabilidade, durabilidade e adaptabilidade. São ferramentas vantajosas no processo de aprendizagem cujo uso se molda a partir dos objetivos que norteiam o professor orientador. Podem ainda se expressar de diferentes formatos, desde vídeos, slides, ou qualquer recurso digital que possa ser reusado. Possuem o intuito de auxiliar os alunos na compreensão de conceitos complexos, sendo então uma ferramenta promissora no ensino de ciências e de assuntos que envolvam alto nível de abstração, uma vez que tornam a aula mais estimulante, e podem ser adaptado às necessidades dos estudantes com o intuito de envolver o estudante na atividade a fim de promover uma aprendizagem realmente significativa.

Por fim, cabe introduzir a molécula de nicotina como um objeto de aprendizagem. A molécula possui uma estrutura relativamente pequena, apresenta características que a tornam complexa. A nicotina ($C_{10}H_{14}N_2$) é composta por apenas 26 átomos, mas possui uma estrutura bicíclica e um carbono quiral, sendo este o ponto de maior complexidade da molécula. Para além de seu relevante conhecimento no âmbito social, bem como do alto interesse biológico e químico, a abordagem de diferentes assuntos torna-se uma possibilidade para o processo de ensino-aprendizagem. Ao usar a nicotina como um objeto de aprendizagem a partir do software Avogadro, o professor é capaz de estimular a investigação científica adaptada ao nível de cada estudante.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após a obtenção e a análise dos dados obtidos com auxílio do Avogadro em diferentes campos de força, foi possível observar certas variações referentes ao tamanho de ligação e de seus ângulos quando comparados com a literatura. As diferenças presentes entre cada campo de força podem ser compreendida por fatores ligados a natureza eletrônica e estrutural da molécula, como explicam Gillespie e Hargittai (2013) com o modelo Repulsão do Pares de

ISSN: 2358-8829

Elétrons da Camada de Valência (VSEPR). Os autores explicam que o comprimento das ligações e o tamanho dos ângulos são influenciados pela repulsão entre os pares de elétrons, sejam eles ligantes ou não. Nessa mesma perspectiva, quando uma molécula apresenta pontos de tensão, os ângulos e ligações são ajustados pelo próprio programa a fim de minimizar a energia potencial do sistema. Para além disso, as forças internas e externas na molécula, como estiramento ou compressão das ligações, aumentam a energia e causam pequenas deformações nos comprimentos e ângulos para alcançar um estado de mínima energia.

A partir desta perspectiva compreende-se que as pequenas variações observadas são esperadas, ainda mais com o uso de uma ferramenta de otimização. Apesar disso, os resultados obtidos apresentam parâmetros muito próximos aos dados fornecidos pelo Pubchem. Para comparar os diferentes campos de força, calculou-se a média das diferenças absolutas de cada um utilizando os dados disponíveis no PubChem, um banco de dados de referência conhecido por seu rigor científico. Conforme representado abaixo, para isso os resultados foram organizados em duas tabelas: uma referente aos ângulos de ligação, e uma referente ao tamanho dos ângulos.

Tabela 1 – Comprimentos das ligações selecionadas da molécula de nicotina obtidos por diferentes campos de força
Fonte: Elaboração Própria (2026)

ID	LIGAÇÃO	MMFF94	GAFF	UFF	PUBCHEM
17	N-C	1,459Å	1,478Å	1,471Å	1,484Å
2	C-N	1,477Å	1,485Å	1,479Å	1,463Å
4	N-C	1,482Å	1,482Å	1,477Å	1,476Å
12	C-H	1,104Å	1,093Å	1,095Å	1,095Å

Tabela 2 – Ângulos de ligação selecionados da molécula de nicotina obtidos por diferentes campos de força
Fonte: Elaboração Própria (2026)

ID	LIGAÇÃO	MMFF94	GAFF	UFF	PUBCHEM
15	C-N-C	112,0°	113,1°	111,7°	113,2°
14	C-N-C	112,7°	113,8°	112,1°	112,1°
31	H-C-N	112,6°	110,1°	111,7°	110,9°

ISSN: 2358-8829

Com isso, MMFF94, GAFF e UFF apresentaram, respectivamente, as seguintes médias de diferenças absolutas nos ângulos e tamanhos de ligação: *1,17 º* e *0,014 Å*; *0,87 º* e *0,009 Å; 0,78 º* e *0,008 Å*. Dentre os campos de força avaliados, conclui-se que o UFF apresentou o menor desvio no tamanho médio das ligações e dos ângulos dentre os campos de força analisados. Os resultados encontrados corroboram os apontamentos de Lewis-Atwell, Townsend, Grayson (2021) que afirmam alta confiabilidade do campo de força UFF para pequenas moléculas orgânicas. De forma geral, os resultados encontrados foram excelentes, mas ainda apresentaram pequenos, mas significativos desvios. Esse dado evidencia limitações do uso da ferramenta, dada às possíveis alterações nos resultados obtidos. Todavia, apesar dos problemas abordados neste trabalho, o conjunto de elementos que constituem o Avogadro, bem como seus potenciais benefícios para o processo de ensino-aprendizagem, ainda superam tais lacunas. A conciliação do meio teórico e prático é capaz de tornar a compreensão dos conteúdos muito mais prática e visual, favorecendo o estudo ativo.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Dessa forma, embora os resultados apresentados não sejam suficientes para afirmar a eficácia do Avogadro ou os impactos diretos no processo de aprendizagem, o programa demonstrou ser uma ferramenta promissora, completa e versátil para o ensino de ciências. No entanto, para o pleno alcance dos benefícios do Avogadro no contexto educacional, é recomendado que haja o desenvolvimento de um roteiro de atividades que considere suas barreiras. Apesar disso, ainda são necessários estudos futuros que analisem a aplicação do software em diferentes níveis de ensino e modalidades, com o intuito de analisar a retenção dos conhecimentos e compreensão dos conceitos abordados.

Palavras-chave: Nicotina; Objeto de Aprendizagem, Avogadro, Vetores, Química.

REFERÊNCIAS

AGUIAR, Eliane Vigneron Barreto; FLÔRES, Maria Lucia Pozzatti. Objetos de Aprendizagem: conceitos básicos. *In*: TAROUCO, Liane Margarida Rockenbach *et al.* (org.). **Objetos de Aprendizagem**: teoria e prática. Porto Alegre: Evangraf, 2014. cap. 1, p. 12-28. ISBN 978-85-7727-643-1.

ISSN: 2358-8829

BARBOSA, Jakeline S. B.; MESQUITA, Adrielle M. C.; PAIVA, Joseilson A. Utilização de softwares educacionais no ensino de química. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE QUÍMICA, 64., 2025, Belo Horizonte. **Anais...** Belo Horizonte: Associação Brasileira de Química, 2025.

BATISTA, Gerliane da Costa; MARINHO, Emanuelle Machado; MARINHO, Marcia Machado; MARINHO, Emmanuel Silva. **Avogadro no ensino de química: um avançado editor molecular de visualização de um grande potencial pedagógico**. In: SEMINÁRIO INTERNACIONAL DE EDUCAÇÃO, TECNOLOGIA E SOCIEDADE, 23., 2018. *Anais...* Exemplo/Tema: Metodologias Ativas. 2018.

CAMARGO, Lindomar Linhares de; SILVA, Océlio Brito da; SANTANA, Flávio Carreiro de. Desafios e possibilidades da interdisciplinaridade. **Revista Ibero-Americana de Humanidades, Ciências e Educação**, São Paulo, v. 11, n. 8, p. 1527-1543, ago. 2025.

DI FELICE, Rosa *et al*. A perspective on sustainable computational chemistry software development and integration. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 19, n. 20, p. 7056–7076, 2023. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00419.

GILLESPIE, Ronald J.; HARGITTAI, István. **The VSEPR model of molecular geometry**. Courier Corporation, 2013.

GREGÓRIO, E. A.; OLIVEIRA, L. G.; MATOS, S. A. Uso de simuladores como ferramenta no ensino de conceitos abstratos de Biologia: uma proposição investigativa para o ensino de síntese proteica. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 11, n. 1, p. 101-125, 2016.

LIBÂNEO, José Carlos. **Didática**. São Paulo: Cortez, 2006.

LEWIS-ATWELL, Toby; TOWNSEND, Piers A.; GRAYSON, Matthew N. Comparisons of different force fields in conformational analysis and searching of organic molecules: a review. **Tetrahedron**, v. 79, art. 131865, 2021. DOI: https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131865.

MARTINS, Nara Regina Schuquel; NUNES, Janilse Fernandes. Atividades Interdisciplinares para potencializar o Ensino de Ciências da Natureza. **Research, Society and Development**, v. 11, n. 6, e13111628798, p. 1-18, 2022. DOI: http://dx.doi.org/10.33448/rsd-v11i6.28798.

OLIVEIRA, Júlio de Paula Campbell. **Práticas de Química Computacional no ensino de Química Geral em cursos de graduação**. 2023. 75 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Química) – Instituto Multidisciplinar de Química, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Macaé, 2023.

OLIVEIRA, Júlio de Paula Campbell; PASCHOAL, Caroline Reis Santiago; PASCHOAL, Diego Fernando da Silva. Metodologias Alternativas no Ensino de Química: O Uso do Software Avogadro para Compreensão de Propriedades Químicas no Ensino Superior. **Revista Virtual de Química**, v. 17, n. 1, p. 106-119, 2025. DOI: https://doi.org/10.21577/1984-6835.20250011.

PUBCHEM DATABASE. **Nicotine: CID 89594.** Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/89594. Acesso em: 10 de ago. 2026.

SANTOS, Anderson Oliveira. Ferramentas digitais no ensino de ciências da natureza. **Ciência em Evidência**, Capivari, v. 2, n. 2, p. 65-74, 2021. Dossiê Especial: I Seminário TIC e Educação. ISSN: 2763-5457.