



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

Instituto de Química

Licenciatura em Química



A QUÍMICA QUÂNTICA NO ENSINO MÉDIO: ESTRATÉGIAS PARA SUPERAÇÃO DE OBSTÁCULOS EPISTEMOLÓGICOS E BANALIZAÇÕES CONCEITUAIS

Tuan Campos Pacheco

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Coordenação do Curso de Licenciatura em Química do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Licenciado em Química.

Orientador: Luiz Cláudio S R Oberti

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2025

Agradecimentos

Não foi uma tarefa fácil concluir o curso de Licenciatura em Química enfrentando uma pandemia no meio da jornada e com dificuldades financeiras enormes na metade final do curso. Quero agradecer, em primeiro lugar, à minha mãe, Dona Marly, a pessoa mais generosa, corajosa e a mais altruísta que conheci em toda minha vida, e que nunca deixou de me apoiar mesmo nos momentos mais difíceis. Sinceros agradecimentos devem ser ditos e transmitidos aos meus demais familiares: meu pai Rui, minha irmã Tainah e meus sobrinhos Guilherme e Joaquim. Quero agradecer à minha companheira Maria Cecília Kovac, que não apenas incentivou intensamente o trabalho e contribuiu para os pontos de vista, mas esteve me dando apoio no momento mais difícil da jornada: o fim da graduação.

Agradeço também ao orientador deste trabalho, professor Luiz Cláudio Oberti, fundamental na minha formação e dono da melhor oratória que já conheci na vida. Este senhor foi simplesmente quem me ensinou que o conhecimento não é neutro e quem despertou meu interesse por epistemologia, sociologia e pelo Ensino de Química logo no primeiro período quando cursei Química na Escola I, e escutava atento seus lindos discursos com críticas ferrenhas ao positivismo e ao elitismo presentes na academia. Na disciplina que trata da temática do cotidiano, eu pude ter noção da extensão do conhecimento que o professor Luiz possui e sou testemunha de que é muito vasto e valioso.

Quero agradecer ao meu orientador de IC e professor, Thiago Cardozo, meu mestre nas artes secretas da Química Teórica e também alguém fundamental na minha formação. Um professor jovem muito talentoso e muito compreensivo, que sempre me fez sentir em casa. Thiago não só me recebeu e me deu todo apoio em um momento de incerteza profissional, como também me proporcionou o melhor ambiente de trabalho que já conheci na vida. Além disso, só fez aumentar meu interesse por Química Quântica com suas aulas e explicações deslumbrantes.

Agradeço aos ilustríssimos colegas de laboratório do prof. Thiago e amigos da vida: Karol Gomes e Lucas Araújo, que em tardes de muita diversão, conversas sérias e conversas descontraídas, me proporcionaram a melhor companhia em ambiente de trabalho que já tive. Agradeço aos demais colegas de laboratório William e Mário, que também foram muito caros nessa caminhada. Foram todos

fundamentais para mim em um período em que me sentia muito sozinho e passava por dificuldades.

Agradeço também aos ilustres colegas de curso: Luiz Octávio, Carol Goulart, Felipe Amorim, Matheus Rodrigues, Juan Mercês Leonel, Rhayssa Rhonsek, Marcola, Leandro Zulu, Júlia Catarina, Júlia Medeiros, Maicon Posser, Saimon Lima, Iago Torres, Karol Rangel, João Pedro Peixoto, Linda, Alex Oliveira, Paulo Gustavo (PG), ao colega da Física, Cláudio Motta (Bola), e a tantos outros queridos de quem eu possa eventualmente ter esquecido.

Agradeço também ao meu professor de Cálculo I, Carlos Diosdado Peñafiel, que despertou em mim um interesse singular por matemática que eu nunca pensei que teria.

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2025

Dedico este trabalho à minha mãe Marly Ribeiro Campos, à minha namorada Maria Cecília Kovac, à minha saudosa amiga Thais Reis (1997-2016) e ao meu cãozinho Ozzy (2008-2023).

RESUMO

Embora os conceitos de Química Quântica, tais como nível quântico principal, nível quântico secundário, orbital e hibridização apareçam com frequência em abordagens do Ensino de Química no nível médio, são apresentados sem dedução alguma e sem qualquer detalhamento sobre suas origens ou sobre o contexto de problemas que os originaram. No mais feliz dos casos, as relações entre o conteúdo e o tema da evolução dos modelos atômicos são expostas, no entanto, a exposição é feita sem que a importância desses paradigmas em química moderna para o entendimento de propriedades e fenômenos seja delineada. A naturalização desse tipo de abordagem pode incorrer em uma banalização dos conceitos. Por outro lado, o Ensino de Física, ao qual também cabe a incumbência de discutir os fundamentos desses conceitos, tem adotado uma postura passiva diante da responsabilidade de discutir a dramática mudança de paradigmas que marca a transição da Física Clássica para a Física Moderna. Embora a complexidade da estruturação matemática dos fundamentos de química quântica seja incompatível com o escopo do Ensino Médio, as aplicações do tema são muito importantes para se compreender aspectos da vida moderna e noções sobre diferentes modelos para os fundamentos da natureza. Sendo assim, se coloca diante do Ensino de Química o desafio da mediação do tema. O presente trabalho fornece alternativas didáticas para se abordar a química quântica e desenvolve uma análise sobre a importância e as dificuldades do ensino do tema em nível médio à luz do referencial teórico de Gaston Bachelard, apontando aspectos indispensáveis inerentes à racionalização do tema, assim como os obstáculos epistemológicos e banalizações que incorrem nas abordagens comuns.

Palavras-chave: Ensino de Química, Química Quântica.

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2025

ABSTRACT

Although the concepts of quantum chemistry, especially those regarding on principal quantum number, angular quantum number, atomic orbitals and hybridization are plenty in the context of Chemistry Education in High School, the approach to this concepts are often lacking in rigour since no deduction or details on its origin or on the context of issues which motivated it is given. So far, the best one has done was to present the relations between these concepts and the evolution of atomic models, however, this is done with no further discussion on how these paradigms of modern chemistry are crucial to explain chemical properties and phenomena. To get acquainted with such approaches, may be equivalent to getting acquainted with a banalization or desensitization of the subject. On the other hand, Physics Education to which the responsibility to discuss the dramatic paradigm shift of the transition from classical to modern physics lies upon, has adopted a passive attitude often neglecting to carry out the task. Despite the tremendous complexity of the mathematical structure of Quantum Chemistry, its applications are crucial to understand aspects of modern life and to achieve notions regarding different models to the fundamentals of nature. Therefore, Chemical Education is faced with the challenge of mediation to the quantum concepts. The present work provides feasible educational approaches to quantum chemistry in high school, also develops an analysis of the challenges in teaching quantum chemistry advised by the theoretical reference of Gaston Bachelard, shedding new light to important aspects inherent to the rationalization of the subject as well as the trivialization that often occur in its common approaches.

Keywords: Chemistry Education, Quantum Chemistry.

Rio de Janeiro

February 2025

Sumário

Introdução	8
CAPÍTULO I	10
A construção da Monografia	10
1. Problematizando o tema de estudo na perspectiva escolar	10
2. Os fundamentos epistemológicos da pesquisa	11
3. Natureza da Pesquisa	13
4. Objetivos e questões de Estudo	13
CAPÍTULO II	14
A Importância do Ensino de Química Quântica na Escola	14
1. Reflexões pedagógicas sobre o conhecimento escolar dos fundamentos quânticos	14
2. Conceitos de Química Quântica presentes em Química do Ensino Médio	19
2.1 Configuração eletrônica de elementos químicos no estado fundamental	19
2.2 Hibridização dos orbitais atômicos	22
2.3 Raio Atômico e Carga Nuclear Efetiva	24
2.4 Uma questão do ENEM 2017 sobre transição eletrônica e emissão de fóton	24
CAPÍTULO III	26
Construindo Estratégias Didáticas	26
1. Obstáculos epistemológicos: que cuidados tomar?	26
2. Obstáculos no ensino dos modelos atômicos	27
3. Obstáculos no ensino de estrutura eletrônica	29
4. O uso de ferramentas computacionais como o Iboview para a visualização dos orbitais e apresentação de suas energias	34
CAPÍTULO IV	38
Conclusões e Recomendações	38
1. Os números quânticos são uma resposta para um problema específico	38
2. O uso das analogias de Glynn com cordas vibrantes	40
3. Recomendação do uso da revista A Estrutura Eletrônica dos Elementos Químicos em esforço interdisciplinar	42
Bibliografia	43

Introdução

A estrutura eletrônica dos elementos químicos é um tema que se introduz de maneira simplificada no início do ensino médio (ou, em alguns casos, no último ano do ensino fundamental) e que se “aprofunda” ao longo deste nível de ensino em algumas escolas. No entanto, a abordagem dos conceitos correlatos ao tema não raramente se reduz à aplicação de regras aritméticas a seguir, como em um jogo que, com certa frequência, se reduz à uma atividade impensada e banal (LOPES, 1997, p. 564). Por conta de sua complexidade, a discussão dos números quânticos, que se baseia em conceitos de Mecânica Quântica, coloca-se como um desafio ao educador químico e aos pesquisadores da área: como abordar um tema de tamanha robustez, cuja necessária mediação didática em sala de aula não o reduza a obstáculos epistemológicos intransponíveis ao ensino da ciência química (LOPES, 1992, p. 401-404)? Ou mesmo: até que ponto a inclusão da abordagem da estrutura quântica da matéria no ensino médio é *essencial* à composição da química escolar?

É consenso acadêmico que o conhecimento da estrutura da matéria é hoje tão profundo e complexo que uma abordagem inteiramente clássica do assunto se mostra insuficiente para dar conta de fenômenos e propriedades observáveis. Se a abordagem quântica responde às lacunas clássicas e muitas vezes as subverte, tal alcance não se deve entender como uma “evolução” contínua entre ambas as epistemes. Ao contrário, é a descontinuidade da razão entre elas, ou seja, a impossibilidade de chegar-se aos paradigmas quânticos por rearranjos do instrumental teórico clássico que impõe, especialmente aos educadores químicos e físicos, a necessidade de identificar, mensurar e dar consequência a qualquer abordagem escolar que transite entre perfis epistemológicos distintos (MORTIMER, 2011); (LOPES, 1996, p. 254-256, 258-261).

Assumimos neste trabalho a necessidade de incluir conceitos de Mecânica Quântica nos conteúdos de química tratados no ensino médio, o que, de antemão, igualmente nos impõe fornecer argumentos e alternativas didáticas factíveis, que visem a trazer aos alunos e alunas essa importante contribuição científica, nos

limites e objetivos da educação escolar. Ao admitirmos, com isso, a necessidade de estratégias didáticas adaptativas e mesmo simplificadoras, refutamos com todo ímpeto que as adaptações necessárias se reduzam a amontoados de senso-comum banalizados e sem qualquer rigor científico. Esta tarefa complexa é, em suma, o objetivo desta monografia.

CAPÍTULO I

A construção da Monografia

1. Problematizando o tema de estudo na perspectiva escolar

Embora abordada ainda no ensino fundamental, a estrutura atômica e a distribuição eletrônica ganham relevância e maior escopo no ensino médio. Esta pesquisa, portanto, restringe-se a este nível de ensino. Ali, são abordados conceitos como nível quântico principal e subníveis quânticos, orbitais atômicos e hibridização de orbitais atômicos. Entretanto, tais abordagens ignoram o fato desses conceitos serem respostas a problemas específicos. A omissão dos problemas e questões que originam esses conceitos resulta em trivialização e dessensibilização em relação ao impacto das mudanças de paradigmas em que se inserem. Não menos grave, o Ensino de Física tem adotado uma postura passiva ao negligenciar o seu papel na discussão do assunto (PARENTE, 2013, p. 1), que poderia servir de apoio aos profissionais do Ensino de Química que atualmente se encontram isolados na condução da tarefa e a cumprem muitas vezes sem fazer qualquer referência à Física Moderna e sua importância na elaboração de tais conceitos. A discussão mais aprofundada que trata do tema se dá no ensino dos modelos atômicos, que na maioria das vezes, no entanto, se limita a uma descrição histórica da transição de um modelo para o outro, direcionando o foco para o quanto as noções sobre a estrutura da matéria se modificaram, sem, no entanto, apresentar qualquer tensão, quebras de paradigmas ou mesmo ênfases nos limites superados entre o anterior e o novo, reduzindo a sucessão dos modelos atômicos a um contar de histórias sem História.

Quando se fala em modelos de Rutherford e de Bohr, por exemplo, está se falando em conservação da energia e momento angular, mas com frequência sem citar e sem trabalhar conservação da energia e momento angular. Quando se fala

em orbital, se fala em uma descrição probabilística de posição e movimento, sem apontar as questões que motivam essa racionalização.

A problematização do assunto não se encerra apenas na análise do ensino de um tema específico. A presente questão é um caso particular dos questionamentos indispensáveis à prática docente. Não é possível contentar-se com uma “opinião”, especialmente sobre questões que não se consegue formular com clareza, e o problema da estabilidade do elétron no átomo é uma problematização interessante porque abre espaço para se discutir a quantização da energia e do movimento. É preciso conhecimento! Em uma boa hora, as disciplinas escolares afins – a contribuição da física é fundamental – trariam ótima sinergia ao processo, o que, por óbvio, também implicaria reescalonar os tópicos específicos ao longo do ano letivo ou da seriação.

2. Os fundamentos epistemológicos da pesquisa

Os conceitos de química quântica não só fornecem uma compreensão mais ampla da estrutura da matéria, dos fundamentos da natureza e das leis físicas em um domínio de dimensões muito pequenas da realidade fundamental, como também tratam de uma ruptura com noções comuns sobre as leis do movimento. Além disso, possuem aplicações importantes para a compreensão de estruturas moleculares, fenômenos e propriedades associadas a compostos conhecidos. Quando aqui se refere ao termo *ruptura* está se considerando o significado de ruptura em contraponto a uma pretensa razão contínua, consideração essa que está alicerçada na epistemologia de Gaston Bachelard (LOPES, 1996, p. 248-273).

Antes de discorrer sobre uma concepção epistemológica da mecânica quântica, é necessário esclarecer que quando nos referimos ao termo *racionalidade* neste trabalho, nos referimos às premissas axiomáticas e aos postulados teóricos da estrutura racional de uma determinada teoria científica. Para Bachelard, a mecânica quântica é um exemplo de ruptura com uma racionalidade centrada numa filosofia realista, que ele chama de realismo coerente (LOPES, 1992, p. 398-405). É um exemplo de que a racionalidade científica avança nos fundamentos da natureza não pela consolidação dos conhecimentos anteriores, mas pelo confronto com

concepções previamente adquiridas. Ainda nessa linha bachelardiana, observa-se uma relação, em certa medida estreita, entre os conceitos de química quântica e a noção de fenomenotécnica (fenômenos acessíveis somente através da articulação entre razão e técnica) (BACHELARD, 1996, p. 77).

No entanto, ainda que tenha sido afirmada essa importância, observa-se a necessidade de se tomar cuidados específicos (alguns deles bastante sutis) e a necessidade de um certo grau de domínio sobre os conceitos que tangenciam a química quântica por parte do docente, para que a abordagem do tema não incorra em erros conceituais propriamente ditos, ou em obstáculos epistemológicos (BACHELARD, 1996, p. 17-29). Obstáculo epistemológico é um conceito também introduzido por Bachelard, que descreve como estruturas racionais e cognitivas de conhecimentos anteriores podem ofuscar aspectos-chave para entender novos conceitos, e que frequentemente esses obstáculos epistemológicos se convertem em obstáculos pedagógicos, tão logo essas abordagens penetram na realidade escolar sem uma mediação didática cuidadosa.

Nesse sentido, o presente diagnóstico feito do ensino de estrutura eletrônica em termos de conceitos quânticos é que não raro há uma banalização dos conceitos estudados, que extrapola em muito a mera simplificação, e são resistentes a mediações didáticas inócuas (LOPES, 1997, p. 563-564). A banalização ocorre, por exemplo, quando a estrutura eletrônica é reduzida a um mero conjunto de regras a ser seguido: i) os números quânticos são inteiros; ii) alguns números quânticos são proibidos de acordo com o número quântico principal abordado; iii) os orbitais são meras subcamadas nas quais os elétrons são alocados, ou seja, um mero lugar onde objetos podem ser colocados (ainda que nessas abordagens os orbitais sejam descritos por números quânticos). Não se trata de desqualificar a prática da distribuição eletrônica, mas para esquivar-se dessas banalizações e super-simplificações, se faz necessário alguma imersão nas noções físicas sobre energia e leis do movimento que embasam os conceitos de orbital e números quânticos. Em nenhum momento deve se perder de vista o fato inegável de que a estrutura matemática e racional da mecânica quântica em sua totalidade é incompatível com o escopo da educação básica. Por outro lado, não se pode negar que, enquanto realização humana, são possíveis as mediações de aspectos específicos dessa área e que eles podem ser indispensáveis. Consequentemente,

tomando esses cuidados adicionais em tais abordagens, pode ser possível compreender a distribuição eletrônica em certa medida, ao invés de meramente reproduzi-la. No que tange a esse escopo, urge a audácia de propor os caminhos para tais mediações e também os discutir.

3. Natureza da Pesquisa

Este é um trabalho de pesquisa bibliográfica de natureza teórica. Apresenta instrumentos de tecnologia que podem ser aplicados à sala de aula, mas não avalia, nesta fase, seu alcance, que deverá ser objeto de pesquisa posterior.

4. Objetivos e questões de Estudo

Este trabalho se organizou a partir de uma questão original: é importante ensinar conceitos de química quântica, tais como números quânticos, orbitais e densidade eletrônica na educação básica? Se sim, quais cuidados devem ser tomados? A resposta a estes questionamentos tornou-se a premissa deste estudo: sim, a abordagem quântica da estrutura da matéria no ensino médio não é apenas possível, como necessária.

Para isto, admite que os processos de mediação didática que tornam os conceitos teóricos assimiláveis na escola devem levar em conta a necessária adequação em tempo e espaço ao longo da seriação regular, com o compromisso – na verdade, um desafio – de *protegê-los* da banalização conceitual e da conversão em obstáculos epistemológicos ao aprendizado da ciência química.

São apresentados os argumentos pedagógicos que embasam a afirmação da importância do ensino de química quântica, bem como as possíveis estratégias para que o ensino desse tema não sacrifique sua importância e, acima de tudo, seu caráter transformador.

Para delinear quais cuidados devem ser tomados, as banalizações conceituais comuns e os obstáculos epistemológicos ao aprendizado são

identificados e são discutidas estratégias para contorná-los. Tais estratégias consistem na exposição argumentativa dos conceitos de quantização da energia e do movimento, em caráter interdisciplinar, com uso de uma analogia cuidadosa, de definições mais rigorosas e, quando possível, ferramentas visuais modernas.

CAPÍTULO II

A Importância do Ensino de Química Quântica na Escola

1. Reflexões pedagógicas sobre o conhecimento escolar dos fundamentos quânticos

Não existe maior intersecção com a mecânica quântica do que o ensino da configuração eletrônica e dos números quânticos, incorporado ao Ensino de Química desde a década de 50. Se tratando do ensino de distribuição eletrônica com respeito aos números quânticos, não é sempre que se encontra uma discussão sobre seus fundamentos nos livros didáticos e, conseqüentemente, em sala de aula. Com exceção do número quântico principal n , que é associado o nível de energia dos elétrons de valência de acordo com o período da tabela periódica, a conexão entre os demais números quânticos, as “regras” de distribuição e o que se sabe sobre o elétron e o átomo não é clara. Não se pretende aqui desqualificar a distribuição eletrônica, enquanto prática cognitiva de descrição dos átomos, distinção entre eles e refinamento das noções periódicas, mas sim problematizar a banalização conceitual que pode acompanhá-la.

“Mais vale a ignorância total do que um conhecimento esvaziado do seu princípio fundamental” (BACHELARD, 1996, p. 50): com essa bela sentença, Bachelard endossa a perspectiva de que o conhecimento científico é sempre uma

resposta a uma pergunta. Como será visto adiante, a Química Quântica é uma resposta necessária a problemas que surgem ao se tentar compreender estruturas atômicas, moleculares e propriedades químicas. Não obstante, a função de onda (conceito central em mecânica quântica) permite racionalizar as propriedades físicas do elétron que afetam propriedades químicas. Porque ela é a solução (mesmo que aproximada) de um problema, com hipótese que difere radicalmente da noção clássica de partícula da formulação newtoniana para as leis do movimento (LEVINE, 2000, p. 7-12).

Um forte contraponto que se levanta contra a proposta de refinar o ensino dos conceitos quânticos no ensino médio, diz respeito à inadequação da maioria dos cursos de Licenciatura em Química em relação ao tema, dado que apenas alguns desses cursos oferecem alguma disciplina de introdução à química quântica, que é de enorme complexidade. Embora apontemos aqui a passividade do Ensino de Física em relação ao tema, não podemos ignorar o seguinte raciocínio: se já é um imenso desafio ensinar a mecânica da partícula (movimento clássico) no ensino médio, que dirá ensinar conceitos de física moderna e até de mecânica quântica. Porém, por mais que a mecânica clássica seja mais alinhada com concepções intuitivas de movimento, ainda assim contraria o senso comum como no caso das expectativas da queda livre de corpos de diferentes massas no vácuo. Não obstante, também a mecânica clássica é de enorme complexidade matemática, complexidade essa que também é um enorme desafio no nível universitário. Sendo assim, entendemos que as dificuldades universitárias em relação ao tema bem como a complexidade inerente a ele, não compõem um argumento absoluto para deixar de abordar a mudança de paradigma da mecânica quântica na educação básica.

A atenção do químico preocupado em descrever a ligação química volta-se então inteiramente para o elétron. Para Bachelard, trata-se do que ele chama de um pluralismo coerente: a redução da diversidade — problema filosófico central da química por muitos séculos — se dá paradoxalmente pela sua ampliação: o elétron comum a todos os elementos já não é mais apenas um elétron genérico qualquer, mas ele assume características que vão definir sua contribuição para o sistema físico e essas características vão classificar os elétrons em caráter de pluralidade; não pode haver dois elétrons com números quânticos iguais no mesmo átomo

(princípio da exclusão), ou seja, aquilo que antes reduzia a diversidade agora corresponde à ampliação da mesma (BACHELARD, 2009, p. 198). No entanto, ao analisar dessa maneira, Bachelard parece perder de vista o fato dos elétrons serem radicalmente indistinguíveis em um sistema quântico, o que devolve aos elétrons o caráter não-diverso, singular. Visto que cada um dos elétrons será descrito, simultaneamente, por todas as funções de onda que descrevem o sistema.

O Princípio de Aufbau, apresentado comumente na forma de diagrama de Pauling, dificilmente é utilizado acompanhado da explicação de que as configurações que seguem o diagrama são tais que resultem na menor energia, respeitando-se o princípio de Antissimetria. Assim, pode-se favorecer a interpretação de que se trata de um jogo onde se “colocam os elétrons” nos lugares “certos”, pois é ali que eles “cabem”, sem nunca ocorrer a ideia de ser na verdade a configuração mais estável para aquele sistema físico. Notar que há configurações possíveis, como a de um estado excitado, que seriam consideradas 'incorretas' nessa abordagem banalizante, mas o grande ganho se encontra em perceber que o Princípio de Aufbau abriga uma gama de conceitos profundos, que embora não possam ser ensinados de forma explícita no ensino médio, alguns de seus aspectos poderiam ser mediados para que se obtivesse ao menos alguma compreensão daquilo que está sendo feito. Mais do que uma mera simplificação, não discutir os fundamentos banaliza o conceito de orbital, reduzindo-o a um lugar onde se colocam as coisas que cabem e, além disso, perigosamente flerta com a noção de que o problema da aprendizagem se reduz a um problema de linguagem: “basta mudar a linguagem que todo mundo vai aprender”; “se tudo for um ‘joguinho’ de regras explicadas em termos simples, elimina-se o esforço e o tempo necessários ao aprendizado”. É curioso que um bom contraponto a esse ponto de vista tem algo que ver, de fato, com a apropriação de um tipo de linguagem: não a banal, imprecisa e vulgar, mas a científica, que exige um tipo de refinamento para melhor descrever os conceitos apresentados. Seja como for, é necessário ter claro que banalização conceitual flerta com alienação.

Ainda sobre o que há de transformador no Princípio de Aufbau, destaca-se que caso não houvesse o princípio da antissimetria, i.e. se os elétrons não fossem *férmions*, todos elétrons em um átomo poderiam ser descritos pela função de onda $1s$, que é o nível de menor energia. Tal situação física poderia impossibilitar a

necessidade das ligações químicas, visto que não haveria como superar a atração tão próxima do núcleo, resultando em um universo completamente diferente do que conhecemos e, mais importante: em um planeta Terra radicalmente diferente e provavelmente sem vida.

Abordar campos modernos e relativamente recentes da ciência, principalmente aqueles que dizem respeito aos fundamentos da natureza e trazem novos pontos de vista sobre a realidade, representa uma resistência à prática perpetuada no ensino de aproximar conhecimento comum de conhecimento científico (LOPES, 1997, p. 565). Essa prática banaliza a ciência em nome de uma simplificação que, embora inevitável e necessária, se conduzida sem o menor pudor, resulta em uma perspectiva que toma o conhecimento como uma narrativa e uma narrativa facilmente construída, que se dá a partir de observações evidentes e analogias grosseiras. Na melhor das hipóteses, quando não é tomado como mera narrativa, é interpretado como um processo intelectual fácil e acessível, como sentença elegantemente Alice Lopes: "nada mais que um refinamento das atividades do senso comum" (LOPES, 1996, p. 256). Em contrapartida, seria uma decisão firme assumir o compromisso de introduzir os alunos em um campo mais abstrato e intrigante que exige não apenas mediação, adaptação da linguagem e inevitavelmente simplificações, mas também reflexão, atenção e muito esforço cognitivo. É um fato que o conhecimento científico se baseia na retificação das observações mais imediatas, das constatações feitas através da sensibilidade do homem àquilo que é concreto, sendo necessário superá-las indo além do aparente e do evidente.

Os princípios da mecânica quântica, marcados pela ruptura do realismo (LOPES, 1996, p. 258) e pelo abandono de noções comuns do movimento clássico, quando discutidos paralelamente ao contexto histórico de seu desenvolvimento, podem incorporar à dimensão cognitiva os avanços marcados pela retificação dos erros, pela problematização de conhecimentos anteriores e pela superação de concepções mal adquiridas. Esses princípios reforçam a historicidade do conhecimento e dialogam com a noção de recorrência histórica (BACHELARD, 1996, p. 249). Abordagens cognitivas que incorporam os contextos e problemas históricos também podem romper com noções individualizantes sobre o avanço da

ciência, que tendem a mistificá-la como um conjunto de saberes já prontos e acabados.

A mecânica quântica rompe com noções comuns sobre a realidade e a discussão de seus princípios promove a percepção do inusitado, permite compreender noções e conceitos que não fazem parte do senso comum. Para discuti-la, é necessário que as concepções intuitivas do conhecimento comum e das observações imediatas deem lugar a uma interpretação racional articulada à técnica, mais abstrata e contraintuitiva. Esse movimento é, sobretudo, uma mudança cultural radical. Sobretudo porque a experiência imediata pode, em muitos casos, constituir um obstáculo ao desenvolvimento da abstração. Seria o caso de se perguntar se alguém possui senso comum sobre estrutura eletrônica, mas sem dúvida existe uma aproximação desses conceitos com o senso comum nas abordagens mais dessensibilizadas. Seja como for, tem-se na mecânica quântica e na química quântica uma notável ruptura com o realismo coerente, ou seja, a concepção da realidade a partir de observações do concreto, típica do imediatismo mais ingênuo do senso comum cotidiano. Se faz necessário destacar que o termo *realismo* aqui utilizado diz respeito à tradição filosófica do *realismo* à qual Bachelard atribui uma incompatibilidade em relação à racionalidade quântica.

Outro tipo de ruptura marcante promovida pela mecânica quântica se dá na transição do macro ao micro: as leis são em certa medida outras e as possibilidades são outras. Não há continuidade, embora haja uma certa correspondência, entre as ocorrências do mundo clássico e as do mundo quântico. Mais importante ainda é lembrar que a mecânica quântica pode descrever fenômenos do mundo clássico, mas a mecânica clássica não é capaz de descrever os fenômenos do mundo quântico. Em suma, as noções de química quântica abrigam situações difíceis de serem imaginadas. Às vezes será necessário ao homem racionalizar situações que ele não consegue imaginar.

As características de movimento de um sistema quântico são acessíveis apenas através da articulação entre razão e técnica. Isto significa que a gama de experiências na natureza acessíveis através dos sentidos é pobre perto da gama de experiências acessíveis através da razão e da técnica, onde novas experiências podem ser previstas ou até criadas. O real imediato deve dar lugar ao real construído, onde novas possibilidades são criadas. Em química quântica, novas

propriedades, novas relações passam a ser uma questão de probabilidade, o possível não é mais somente o que existe de imediato e aparente na natureza; o possível pode agora ser criado.

Tais observações adicionam mais um aspecto a ser discutido na defesa do ensino de química quântica: a concepção ultrapassada da racionalidade química que vigora nos livros didáticos. O químico do século XIX permanece dominante nas páginas dos livros didáticos; é o químico manipulador do real aparente que dita as regras do jogo (LOPES, 1993, p. 324). Adicionamos a essa observação uma outra que a complementa: o químico teórico ou computacional que planeja e modela a realidade por vias totalmente abstratas, criando novas possibilidades, permanece oculto. O diagnóstico que se faz é que o conceito científico aqui discutido é comumente apresentado apenas na forma de um resultado, dificilmente na forma de um problema. É difícil conceber um ensino de química quântica que não envolva a apresentação dos problemas que o motivam, em detrimento da tradicional apresentação de resultados ou regras a serem seguidas.

Durante as últimas décadas, a pedagogia tem demonstrado preocupação em mudar as metodologias de ensino em virtude de resultados indesejados e de novos aportes conceituais de áreas como a sociologia, a História, a própria Filosofia. No entanto, e isto se vê claramente no ensino de química, o tecido epistemológico das novas metodologias que visam a romper com a tradição permanecem os mesmos. O efeito da mudança cultural provocada por revoluções científicas, abrangendo a maneira de lidar com o próprio conhecimento, permanece inexplorado.

Um argumento impossível de ser ignorado, e que se levanta espontaneamente contra a proposta de refinar o ensino de química quântica no ensino médio, diz respeito às imensas dificuldades e complexidades inerentes ao formalismo da mecânica quântica. Seria ensandecimento supor que esse conteúdo pudesse ser ensinado sem simplificações e sem nenhum tipo de mediação. Há, contudo, outros conceitos como o de entalpia em termodinâmica, cujo formalismo e a racionalidade também podem ser complexos, mas conseguiram um melhor trânsito à sala de aula na escola básica.

Ainda que a mecânica quântica seja de enorme grau de dificuldade e complexidade, tanto na sua estrutura matemática quanto na enunciação de seus

postulados, suas noções possuem um caráter revolucionário de descontinuidade com as amenidades do mundo macroscópico e do real aparente. Os alunos não podem ser privados deste aspecto em nome de um didatismo. Como aponta Nersessian: "o conhecimento científico é difícil, mas enquanto produção humana, sua dificuldade não é insuperável" (LOPES, 1997, p. 565). As rupturas aqui apontadas, e especialmente a ruptura com as amenidades do mundo macroscópico, subvertem, em certos aspectos, a interpretação das leis que governam a natureza e os fenômenos. Privar os alunos desse caráter transformador e impactante pode vir a ser irresponsável. Se a função dos conhecimentos escolares é contra-hegemônica, por que os reduzir somente ao ordinário e ao enfadonho?

Visto que até aqui, a discussão de química quântica apresentada nos livros didáticos é marcada pelo monopólio de uma preocupação em ilustrar os conceitos com imagens, analogias, evitando-se ao máximo penetrar na estrutura racional do conceito (LOPES, 1997, p. 564). Ou seja, a discussão é marcada por um realismo que busca dar mais concretude do que racionalidade à abordagem.

2. Conceitos de Química Quântica presentes em Química do Ensino Médio

2.1 Configuração eletrônica de elementos químicos no estado fundamental

A configuração eletrônica dos elementos químicos no estado fundamental é descrita em termos de um modelo de partículas independentes (MPI), no qual a repulsão entre os elétrons é descrita de maneira aproximada e possibilita o uso de estados monoelétrônicos que descrevem cada elétron individualmente, chamados de orbitais. Os elétrons em um MPI são descritos por um conjunto de funções de onda que gera o espaço das soluções do problema de um átomo hidrogenóide, i.e., um átomo que possui apenas um elétron atraído por um núcleo que possui carga positiva Z e massa infinita em comparação à massa do elétron. Nesse problema, o operador Hamiltoniano tem a forma:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{R} \quad (1)$$

e a equação de Schrödinger para o problema do átomo hidrogenóide é

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2)$$

As soluções particulares ($\{\psi_i\}$) do problema (2) dependem de números quânticos que determinam as condições de contorno, as raízes de cada função de onda ψ . Assim, os chamados subníveis dos elétrons em um átomo são na verdade funções de onda aproximadas para descrever os elétrons individualmente no átomo e que se chamam orbitais. Os orbitais são denotados pelos conjuntos de números quânticos que os descrevem: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3p,

Para gerar a descrição aproximada da repulsão, primeiro é preciso considerar um determinante de Slater como função de onda aproximada, que é uma função produto de Hartree anti-simetrizada, denotada por

$$|\Psi\rangle = |\chi_a\chi_b\cdots\chi_n\rangle$$

na qual $\{\chi_a\}$ é o conjunto de spin-orbitais: produtos de orbitais e de autofunções de spin, com coordenadas espaciais e de spin, respectivamente. Um campo médio de repulsão entre os elétrons, é então obtido aplicando o postulado do valor médio ao determinante de Slater, gerando os termos de Coulomb e Troca explicitados a seguir. Para o caso de um gás nobre de camada fechada, o método aproximado é chamado de aproximação Hartree-Fock restrita (HF) (SZABO, 1982, p. 108-160), a equação canônica HF em unidades atômicas com autovalor de energia ϵ_a e autovetor χ_a associado ao elétron com coordenadas '1' em um sistema de n elétrons é dada por

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{Z}{R}\right)\chi_a(1) + \sum_{b \neq a}^n \{[\int \chi_b(2)\frac{1}{r_{12}}\chi_b(2)d2]\chi_a(1) - [\int \chi_b(2)\frac{1}{r_{12}}\chi_a(2)d2]\chi_b(1)\} = \epsilon_a \chi_a(1) \quad (3)$$

ou, em notação de Dirac

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{Z}{R}\right)|\chi_a(1)\rangle + \sum_{b \neq a}^n \{[\langle \chi_b(2)|\frac{1}{r_{12}}|\chi_b(2)\rangle]|\chi_a(1)\rangle - [\langle \chi_b(2)|\frac{1}{r_{12}}|\chi_a(2)\rangle]|\chi_b(1)\rangle\} = \epsilon_a |\chi_a(1)\rangle$$

Na qual R é a coordenada do núcleo atômico, r_{12} é o vetor de posição relativa entre um par de elétrons 1 e 2 e Z é a carga do núcleo. O termo entre chaves é o termo de repulsão média entre os elétrons. E o valor médio da energia total do sistema de n elétrons é dado por

$$E_{HF} = \sum_a^n \langle \chi_a(1)|h(1)|\chi_a(1)\rangle + \frac{1}{2}\sum_a^n \sum_{b \neq a}^n \{ \langle \chi_a(1)\chi_b(2)|\frac{1}{r_{12}}|\chi_a(1)\chi_b(2)\rangle - \langle \chi_a(1)\chi_b(2)|\frac{1}{r_{12}}|\chi_b(1)\chi_a(2)\rangle \} \quad (4)$$

Na qual $h(1) = -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z}{R}$.

Aplica-se o postulado do valor médio à eq. (3) multiplicando-a à esquerda pelo complexo conjugado e os spin-orbitais são escritos como combinação de uma base de funções hidrogenóides, a fim de gerar uma equação matricial que é resolvida em termos da matriz dos coeficientes dessa combinação. Substituindo os coeficientes obtidos na eq. (3) uma nova equação pode ser resolvida obtendo uma nova matriz de coeficientes. O procedimento é repetido até que a matriz não se altere mais e então a energia total do sistema dada pela eq. (4) é calculada. Esse procedimento se chama Método do Campo Autoconsistente (SCF - *Self-Consistent Field*) porque a otimização dos orbitais resulta na otimização simultânea do campo de repulsão aproximado.

Para os demais elementos químicos de camada aberta, o método mais adequado é o ROHF (Restricted Open-Shell Hartree-Fock Approximation) (LEVINE, 2000, p. 486), porém seu formalismo será omitido aqui por simplicidade. O conjunto de orbitais otimizados no SCF, ou seja, a 'configuração eletrônica do estado fundamental' é tal que o valor médio de energia (eq. 4) calculado para o átomo seja o menor possível e assim a função de onda total obtida seria a mais próxima possível da função de onda real, que é desconhecida pela impossibilidade de se obter solução exata considerando explicitamente o termo de repulsão intereletrônica de um Hamiltoniano de n elétrons.

No contexto do ensino médio, a configuração eletrônica dos elementos químicos é ensinada em termos dos números quânticos que a descreve e, por conseguinte, dos orbitais denotados pelos números quânticos que os descrevem. O mais comum é que o princípio seja enunciado na forma do Diagrama de Pauling: um esquema mnemônico para memorizar o ordenamento de energia dos orbitais. Assim, um átomo de carbono tem nas abordagens a configuração do estado fundamental $1s^2 2s^2 2p^2$. Ou seja, respostas exatas ao problema do átomo hidrogenóide e aproximadas do problema da repulsão, de modo a resultar na menor energia total do sistema. Cabe, portanto, o questionamento sobre o conhecimento por parte dos pesquisadores do Ensino de Química acerca da natureza quântica da notação $ns^p (n+1)s^q (n+1)p^r \dots$

2.2 Hibridização dos orbitais atômicos

Na otimização de funções de onda moleculares, ou seja, na descrição quântica de ligações químicas é necessário considerar que a densidade eletrônica de cada átomo sofre distorções na presença do campo elétrico gerado na presença de átomos vizinhos. Esse efeito pode ser entendido como uma polarização na densidade eletrônica de cada átomo. Por conseguinte, as funções de onda dos átomos poderiam ser diferentes para descrever a distorção espacial da densidade eletrônica na presença de ligantes. Uma maneira conveniente de obter uma descrição desse tipo é combinando diferentes orbitais atômicos para descrever um único orbital atômico mais adequado. Em 1931 Rosen usou esse conceito para

aprimorar a função de onda Heitler-London para a molécula H_2 (LEVINE, 2000, p. 413-414) e em 1933 Dickinson usou o conceito para aprimorar a função de onda do elétron do H_2^+ (LEVINE, 2000, p. 389-390). Nessas abordagens, o orbital atômico do hidrogênio é escrito como combinação linear dos orbitais 1s e 2p, funções de onda que pertencem ao espaço das soluções do problema do átomo de hidrogênio:

$$|\phi\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \phi \rangle = c_1 |1s\rangle + c_2 |2p\rangle \quad (5)$$

Na qual c_1 e c_2 são elementos da matriz de projeção de ϕ na base $\{\psi_i\}$ das soluções hidrogenóides e, ao mesmo tempo, parâmetros da otimização da energia variacional. Ao procedimento de escrever um orbital atômico como combinação linear de orbitais atômicos distintos entre si dá-se o nome de hibridização de orbitais atômicos, porque gera um orbital atômico híbrido. Essa prática se vale de um belo conceito de Álgebra Linear: sendo $\{\psi_i\}$ uma base de funções linearmente independentes, i.e. que geram um espaço, é possível escrever qualquer função contida no espaço como combinação linear do conjunto $\{\psi_i\}$. E tal função será única e unicamente determinada pelas componentes c_1 , c_2 , etc. nesse espaço.

No contexto do ensino médio, a hibridização é comumente apresentada na química orgânica nos estudos dos compostos de carbono. Para descrever 4 ligações simples os 4 orbitais que participam da hibridização são 2s, 2p_x, 2p_y e 2p_z (sp^3), argumenta-se que para tal, a energia do orbital 2s deve se aproximar da do 2p. Para descrever duas simples e uma dupla se combinam um orbital 2s e dois orbitais 2p (sp^2) e para a ligação tripla um orbital 2s e um único orbital 2p (sp). Em cada hibridização, o rearranjo da densidade eletrônica afeta as repulsões entre os elétrons dos átomos e a obtenção da menor energia total do sistema resulta em diferentes geometrias moleculares que, na Química Quântica (fora do contexto da educação básica), se justificam pela aproximação de Born-Oppenheimer (LEVINE, 2000, p. 366-375). Associadas a cada hibridização tem-se as geometrias: tetraédrica (sp^3), trigonal plana (sp^2) e linear (sp). Esse corpo teórico robusto permite atribuir com segurança uma geometria molecular a cada hibridização no ensino médio. Em abordagens mais aprofundadas, geometrias mais complexas são

associadas a hibridizações mais complexas envolvendo orbitais do tipo d , como é o caso da geometria octaédrica associada à hibridização d^2sp^3 .

2.3 Raio Atômico e Carga Nuclear Efetiva

Uma outra maneira de aprimorar a descrição de sistemas químicos é atribuindo parâmetros de otimização à parte radial da função de onda hidrogenóide, que se relaciona com a distância do elétron em relação ao núcleo. Denotando esse parâmetro por k temos a parte radial simplificada dada por

$$\phi = k \frac{3}{2} \pi^{-\frac{1}{2}} e^{-k|r|} \quad (6)$$

na qual $|r|$ é a distância em relação ao núcleo e k pode ser interpretado como a carga nuclear efetiva, pois variando k entre 0 e 1 se obtém orbitais mais contraídos ou mais difusos (afastados do núcleo). Novamente, esse parâmetro pode ser otimizado de modo a resultar na menor energia total e na melhor função de onda total para o sistema.

No contexto do ensino médio, o conceito de carga nuclear efetiva é avaliado através das tendências periódicas de seu aumento ou diminuição e, por ser um parâmetro que afeta a parte radial da função de onda, está diretamente relacionado ao raio atômico de cada elemento químico. Abordam-se então essas tendências, mas cabe o questionamento se os autores das abordagens conhecem a origem dessa propriedade e sua relação com a mecânica quântica.

2.4 Uma questão do ENEM 2017 sobre transição eletrônica e emissão de fóton

Na questão 97 do caderno amarelo 5 do segundo dia do ENEM 2017 consta o seguinte enunciado:

Um fato corriqueiro ao se cozinhar arroz é o derramamento de parte da água de cozimento sobre a chama azul do fogo, mudando-a para uma chama amarela. Essa mudança de cor pode suscitar interpretações diversas, relacionadas às substâncias presentes na água de cozimento. Além do sal de cozinha (NaCl), nela se encontram carboidratos, proteínas e sais minerais.

Cientificamente, sabe-se que essa coloração da chama ocorre pela

- A) Reação do gás de cozinha com o sal volatilizando o gás cloro.
- B) Emissão de fótons pelo sódio, excitado pela chama.
- C) Produção de derivado amarelo, pela reação com o carboidrato.
- D) Reação do gás de cozinha com a água, formando gás hidrogênio.
- E) Excitação das moléculas de proteína, com formação de luz amarela.

(INEP, 2017)

A resposta correta no gabarito para a questão acima é a alternativa (B). Isso suscita a seguinte questão: como a comissão que selecionou a questão considera razoável que os alunos do ensino médio saibam responder tal pergunta, se a relação entre transição eletrônica e emissão de fótons não faz parte do escopo da maioria das abordagens do ensino médio? Senão pelo grau de especificidade que demanda conhecer o fato do calor da chama promover os elétrons dos íons de sódio para estados excitados e que a luz emitida na relaxação é de cor amarela. Este é um exemplo claro de que os conceitos de química quântica são invocados nas abordagens e até mesmo cobrados em processos seletivos como o ENEM. Tais conceitos devem, portanto, ser devidamente discutidos.

CAPÍTULO III

Construindo Estratégias Didáticas

1. Obstáculos epistemológicos: que cuidados tomar?

Para Gaston Bachelard, é em termos de obstáculos ao conhecimento que o saber científico deve ser delineado.

E não se trata de considerar obstáculos externos, como a complexidade e a fugacidade dos fenômenos, nem de incriminar a fragilidade dos sentidos e do espírito humano: é no âmago do próprio ato de conhecer que aparecem. (BACHELARD, 1996, p. 27)

Para o autor, o ato de conhecer se dá contra um conhecimento anterior e pela retificação de seus erros. O conhecimento anterior, que por essência é incompleto, pode constituir um obstáculo e provocar estagnação enquanto estrutura cognitiva e racional. O que se pensa saber frequentemente ofusca o que precisa ser ineditamente conhecido. De maneira mais objetiva, o conhecimento não questionado tende a incrustar hábitos intelectuais que posteriormente se tornarão obstáculos ao aprendizado e bloquearão o processo de construção de um novo conhecimento (LOPES, 1993, p. 325).

De maneira sistemática, Bachelard classifica os obstáculos epistemológicos em quatro categorias: obstáculos verbalistas, animistas, substancialistas e realistas. No que diz respeito ao significado do termo *orbital* em Química Quântica, observa-se a frequente ocorrência do obstáculo epistemológico verbalista nos livros didáticos de Química (LOPES, 1997, p. 565), pois os químicos frequentemente atribuem ao termo orbital a região de maior probabilidade de se encontrar o elétron, incorrendo assim num erro conceitual sutil. E no ensino de distribuição eletrônica e dos números quânticos, observa-se a ocorrência de obstáculos realistas (LOPES,

1992, 257-260), pois, na análise feita por Lopes sobre os livros didáticos, fica evidente como muitos autores não conseguem abrir mão de um modelo planetário para descrever o átomo, mesmo quando estão falando abertamente sobre números quânticos, nem de comparar a incerteza na posição do elétron com o bater de asas veloz de um beija-flor, ou até mesmo chegando ao extremo de dizer que a escola é o *orbital do aluno*. O próprio Bachelard observou em sua experiência na educação básica que “no ensino elementar, as experiências muito marcantes, cheias de imagens, são falsos centros de interesse” (BACHELARD, 1996, p. 50) e que, na psicanálise do conhecimento que o autor propõe, deve-se analisar com cuidado as tentações sedutoras da facilidade.

2. Obstáculos no ensino dos modelos atômicos

Geralmente é na 9ª série do Ensino Fundamental ou na 1ª do Ensino Médio onde se discute o tema dos modelos atômicos. Uma reflexão sobre a transição entre os modelos Rutherford e Bohr marca a descontinuidade entre o pensamento clássico e o pensamento moderno. O modelo de Rutherford é incompleto porque pressupõe a órbita dos elétrons conforme as leis clássicas do movimento e da radiação. Segundo o eletromagnetismo clássico, elétrons em trajetória circular deveriam emitir radiação eletromagnética em um espectro contínuo até que colapsassem no núcleo, mas não é o que se observa no comportamento da matéria. A racionalização do átomo só avança quando Bohr propõe a quantização do momento angular do elétron em seu segundo postulado, cujo modelo, inspirado nos trabalhos de Planck e Einstein, assume momento angular constante para cada órbita é proporcional à constante de Planck dividida por 2π

$$|L| = n\hbar \quad (7) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

A quantização do momento angular resulta na quantização da energia, conforme a energia é calculada usando as leis clássicas da interação coulombiana e do movimento circular. Embora Bohr tenha postulado que o elétron não emite

radiação continuamente porque seu movimento muda descontinuamente entre as órbitas de momento angular quantizado e, portanto, energia quantizada, Bohr assume no primeiro postulado trajetórias contínuas em cada órbita conforme as noções clássicas de movimento (EISBERG & RESNICK, 1979, p. 138-145). A energia é quantizada porque a combinação das energias cinética e potencial coulombiana (modeladas classicamente) pode ser expressa em termos do momento angular quantizado.

A apresentação puramente formal da quantização da energia é apresentada ao aluno na primeira série do ensino médio, em geral. Com efeito, é cedo para essa discussão. Para entender o modelo de Bohr fisicamente seria necessário conhecer as noções clássicas de conservação da energia mecânica e de momento angular na Física do Ensino Médio. A conservação da energia é contemplada e os alunos se deparam com a equação:

$$E = E_c + E_p \quad (8)$$

No entanto, como aponta Parente, o conceito de momento angular não é contemplado no ensino médio (PARENTE, 2013, p. 3) e os alunos são privados da elegante equação

$$|\underline{L}| = m|\underline{v}||\underline{r}| \text{sen}\theta \quad (9)$$

Para contornar esse entrave, Parente propõe o método das analogias de Glynn utilizando conceitos de ondas estacionárias em cordas com extremidades fixas (PARENTE, 2013, p. 24-37). O método faz uso dos postulados de Bohr para atribuir relações bijetoras entre os modos normais de vibração de uma corda com extremidades fixas, que são quantizados e possuem comprimentos de onda, com os níveis de energia dos elétrons no átomo de Bohr que são também quantizados e aos quais também se atribui um comprimento de onda conforme a equação de De Broglie. As transições que geram o espectro do hidrogênio, portanto, são entendidas pela analogia com transições entre modos vibracionais da corda vibrante. Vê-se que

a análise feita no presente trabalho quando posta em diálogo com o trabalho de Parente aponta para a necessidade de uma abordagem interdisciplinar ou transdisciplinar, tendo o paradigma Rutherford-Bohr como ponto de partida. Recomenda-se fortemente que a abordagem transdisciplinar de Parente para o modelo da Partícula na Caixa (PARENTE, 2013, p. 38-48) receba a merecida atenção dos professores e pesquisadores do ensino de química e das ciências em geral como perspectiva futura.

Considera-se então necessário um esforço interdisciplinar para abordar com clareza os conceitos de modelos atômicos se a intenção for que o aprendizado não se reduza meramente à repetição de frases e enunciação das diferenças entre os modelos.

Quanto à transição entre o modelo de Bohr e o de Schrödinger, rompe-se totalmente com a noção clássica de trajetória e tanto na formulação de Schrödinger quanto na de Heisenberg a determinação dos autovalores de energia implica na indeterminação da posição do elétron. O movimento do elétron passa a ser descrito então em termos da probabilidade de ser encontrado no conjunto de pontos do espaço contido pelo módulo quadrado da função de onda que o descreve. Poderia evidenciado nas abordagens de educação básica que o conceito de orbital que depois seria utilizado em estrutura eletrônica deriva do modelo atômico de Schrödinger. Embora as expressões matemáticas desse modelo sejam largamente mais complicadas que as equações (7), (8) e (9), as suas implicações são interessantes pela ruptura com noções comuns sobre o movimento. Pode haver alguma estratégia possível para extrair desse modelo algo que possa ser abordado na educação básica em termos dessa ruptura.

3. Obstáculos no ensino de estrutura eletrônica

Tradicionalmente, o ensino de estrutura eletrônica em algumas escolas se inicia no último ano do ensino fundamental pela alocação de elétrons em camadas conforme regras preestabelecidas de quantos elétrons 'cabem' em cada camada e as camadas se diferenciam pela distância em relação ao núcleo do átomo. Não se trata de negar a importância e nem de eliminar a prática da distribuição eletrônica de

elementos químicos, que permite comparar a estrutura eletrônica dos elementos entre si e refinar o estudo das propriedades periódicas. Porém, se trata de reconhecer que o aprendizado dessas atividades será mais proveitoso se vier acompanhado da introdução histórica de seus fundamentos.

É o que se faz no livro de Guedes e Amazonas (GUEDES & AMAZONAS, 1997, p. 77-90) no qual o conceito de camadas é explicitado em termos do ordenamento de energias e dos postulados de Bohr. Assim se associa as transições entre as camadas com a energia do fóton absorvido ou emitido. Nesse caso, o uso dos postulados de Bohr se mostra um importante aliado no estudo da eletrosfera e do número quântico principal. A mudança de um espectro contínuo para um discreto é feita em termos da comparação da incidência da luz branca em um prisma resultando num arco-íris contínuo com a incidência da luz do hidrogênio excitado em um prisma, que resulta em linhas de cores específicas. Os demais números quânticos e o termo orbital são introduzidos expondo os princípios de De Broglie e de Heisenberg. Só após tais exposições é apresentado o diagrama de Pauling.

De modo geral no ensino médio, com a introdução do diagrama de Pauling e com o que denotaram por notação espectroscópica é apresentado o conceito de camada e subcamada, a camada diz respeito ao número quântico principal 'n' e a subcamada diz respeito aos números quânticos de momento angular e magnético (l e m_l). Em abordagens mais cuidadosas as camadas são descritas como níveis de energia e as subcamadas como subníveis de energia e, ainda que vagamente, essa abordagem cuidadosa com as palavras remete à noção de autovalor de energia que diz respeito aos estados monoelétrônicos. A palavra orbital também aparece em alguns livros e, por serem apresentados por vezes como meras subcamadas, pode provocar a interpretação errônea dos orbitais como lugares físicos. Inclusive, no livro de Guedes e Amazonas o orbital é chamado de "região de maior probabilidade de encontrar o elétron" (GUEDES & AMAZONAS, 1997, p. 81). Observa-se que se trata de uma imprecisão conceitual e um obstáculo epistemológico verbalista, cujo endosso em ambiente educacional pode constituir um obstáculo pedagógico. Embora não incorra em obstáculos verbalistas e esteja mais alinhada com os conceitos fundamentais, a noção de níveis e subníveis de energia não rompe com as noções comuns sobre as leis do movimento e frequentemente atribui aos elétrons uma trajetória elíptica ou esférica contínua. Nessa abordagem o movimento

do elétron em nada se difere do movimento clássico, incorrendo na indesejável prática de pressupor continuidade entre perfis epistemológicos distintos: o contínuo e o discreto. Tampouco o domínio distinto de observação da realidade que implica em leis físicas distintas é mencionado ao se falar de números quânticos e subníveis de energia. Esse tipo de descuido incorre no obstáculo epistemológico realista e que também se estende em um obstáculo pedagógico, pois a necessidade de conceber e imaginar em termos concretos os conceitos é priorizada em detrimento da abstração necessária para compreender os fundamentos dos conceitos.

Para além do que se queixaria Bachelard, conclui-se que um problema crítico é a alienação da estrutura eletrônica em relação a todo o restante da ementa curricular de química no ensino médio. Porém, uma aplicação muito eficiente de um fundamento básico de quântica é a emissão de um fóton por parte de um átomo, de um íon ou até mesmo de uma molécula. Uma vez feita a introdução dos postulados de Bohr e da noção de estados estacionários usando como conceito análogo as cordas vibrantes, é possível abranger o fenômeno da emissão de fótons muito presente na realidade cotidiana.

Para átomos polieletrônicos e moléculas, o uso de orbitais para descrever a estrutura eletrônica é empregado através de um MPI, no qual a repulsão dos elétrons é tratada como um campo médio gerado por uma distribuição contínua de carga elétrica e um efeito desse campo médio é interpretado como uma blindagem da carga nuclear. Essas funções de onda podem ser separadas em duas partes: a parte radial da função de onda, que é descrita em termos da distância em relação ao núcleo e se relaciona com os números quânticos principal 'n' e 'l' e a parte angular, que se relaciona com os números quânticos l e ml. A forma explícita dessas funções é formidavelmente complicada e está muito além do escopo do ensino médio. No entanto, como qualquer função, a função de onda total possui raízes: pontos, planos e regiões nas quais a função de onda é nula. Pelas relações com a mecânica ondulatória essas raízes são chamadas de nós ou nodos. Em termos de descrição do movimento, representar essas funções destacando os nós provoca rupturas com as noções realistas do movimento, pois o módulo quadrado dessas funções fornece a densidade de probabilidade de se encontrar o elétron, mas preserva os nós que são as regiões onde não há probabilidade de ser encontrado.

Vejamos a densidade de probabilidade para os orbitais 2s e 2pz, por exemplo, na figura 1.

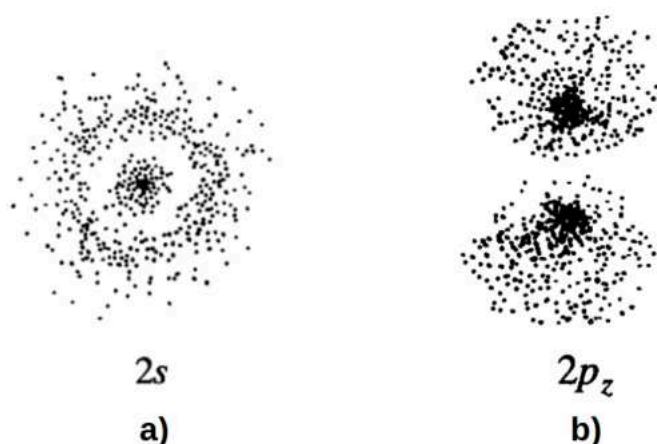


Figura 1. Densidades de probabilidade dos orbitais hidrogenóides: a) 2s e b) 2p_z. Créditos da figura: Levine, Ira. Quantum Chemistry. 5th Edition, Prentice Hall, 2000. p. 154.

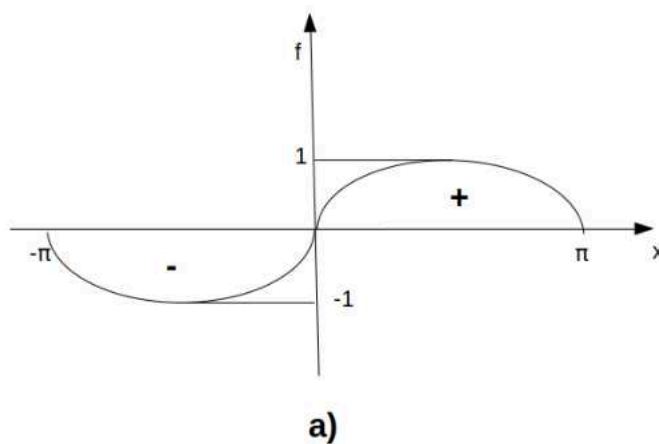
Vemos na figura 1-a que existe a probabilidade não-nula de se encontrar o elétron em duas regiões ao redor do núcleo, mas que a probabilidade entre essas duas regiões é nula em determinado raio. Como pode ser que o elétron possa ser encontrado na 'camada' externa e na interna, sem que possa ser encontrado no espaço entre elas? Como ele passaria de uma para outra sem que passasse pelo espaço entre elas? Assim, como é possível ao elétron ser encontrado em regiões separadas por uma distância sem percorrer a distância que há entre elas? De modo análogo, na figura 1-b, como pode ser que o elétron seja encontrado 'acima' e 'abaixo' sem ser encontrado entre as duas regiões? Visto que a região dessa distância coincide com uma probabilidade nula de se encontrar o elétron.

Se os nós abrissem essa possibilidade de ruptura com noções realistas, a representação espacial das densidades de probabilidade poderia ser explorada nesse sentido. Quanto à forma explícita da função de onda que a origina se levanta a questão de ser ou não possível mediar o conceito da função de onda de modo a tornar sua abordagem em ensino médio viável. Talvez seja apenas possível introduzir a ideia de uma função de onda mais simples de um elétron confinado e

sua densidade de probabilidade. Em contexto da educação básica, imaginemos que um aluno seja informado sobre estes dois postulados e uma definição através de uma mediação didática:

1. A função de onda f contém toda a informação sobre um elétron confinado ao longo do eixo x no intervalo $-\pi \leq x \leq \pi$.
2. O quadrado da função de onda f^2 fornece a probabilidade de se encontrar o elétron ao longo do eixo x .
3. Definição: $f = \text{sen } x$

A função de onda e a densidade de probabilidade podem ser vistas na figura 2 e na 2-b vemos que o mesmo raciocínio acerca da probabilidade de se encontrar um elétron entre regiões separadas por um nó pode ser feito com uma partícula descrita pela função seno neste intervalo.



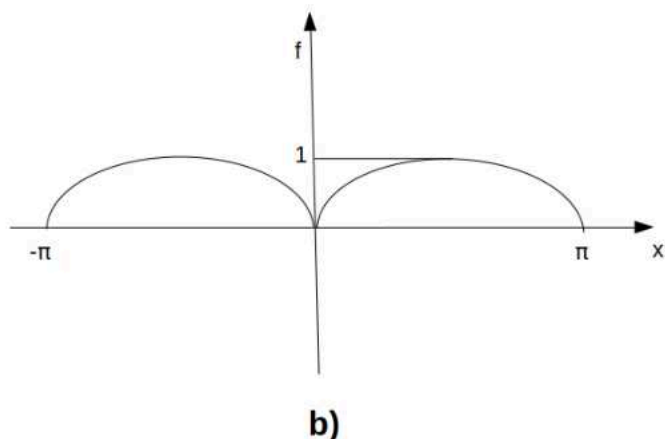


Figura 2. Função de onda (a) e densidade de probabilidade (b) de um elétron confinado na região do eixo x .

Noções como essa que deriva do problema da Partícula na Caixa, confrontam os realismos ingênuo e coerente. A resposta que o autor Ira Levine fornece para esse tipo de situação é ainda mais prodigiosa e pode ser traduzida, mais ou menos, para:

(...) nosso cérebro evoluiu para interpretar o mundo macroscópico por conta da necessidade de adaptação. Não devemos nos surpreender, portanto, se nosso cérebro não for capaz de interpretar fenômenos em escala subatômica pois ele não foi desenvolvido para essa finalidade (LEVINE, 2000, p. 26)

4. O uso de ferramentas computacionais como o Iboview para a revisitação de temas já tratados classicamente mediante nova episteme.

Ainda na linha da seção anterior de apresentar a ruptura com noções clássicas do movimento, é possível através do software Iboview (KNIZIA, 2013)

plotar os orbitais de um cálculo ROHF para elementos representativos como o átomo de carbono (Figura 3). Com esse tipo de ferramenta visual podemos revisitar, com uma nova episteme; a quântica, temas já tratados por uma visão inteiramente clássica, porém marcando explicitamente a mudança de paradigma que contraria o senso comum. Isso se faz através da abordagem da questão da probabilidade existir de um lado e de outro mas não no espaço entre eles em relação ao núcleo atômico, mantendo em mente que este orbital da figura não é a região da densidade de probabilidade. Podemos também, nesse esquema da figura, notar que as energias são específicas para cada estado que descreve o elétron, i.e., a energia dos elétrons em um átomo é quantizada e não pode assumir qualquer valor. Não obstante, essas energias apresentadas nas figuras 3, 4 e 5, são as energias dos orbitais HF cujo significado físico é o negativo da energia de ionização para o elétron naquele estado. Isso abre a possibilidade de revisitarmos com uma noção quântica a tendência periódica das energias de ionização, que se torna maior conforme avançamos no segundo período (Figuras 3, 4 e 5).

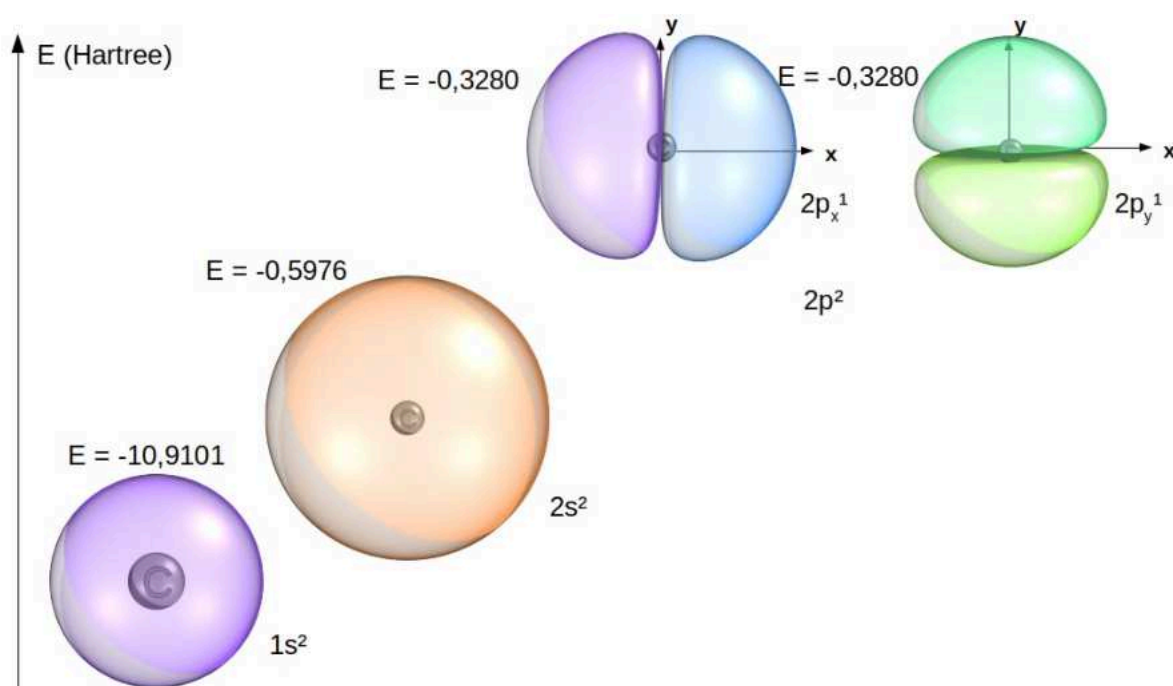


Figura 3. Orbitais e distribuição eletrônica do átomo de carbono e suas respectivas energias em unidades atômicas fundamentais. Calculados com o método ROHF usando o pacote ORCA 5.0.3 (NEESE, 2022) (ROHF/STO-3G).

A gama de abordagens possíveis não para por aí. Podemos, com esquemas semelhantes para os átomos de nitrogênio (Figura 4) e oxigênio (Figura 5) comparar as energias com as do carbono e notar que conforme avançamos à direita no mesmo período da tabela periódica as energias dos orbitais se tornam mais negativas. Os esquemas foram preparados estrategicamente para respeitar as diferenças de tamanho do raio atômico entre essas espécies, assim, nota-se a diferença entre os tamanhos.

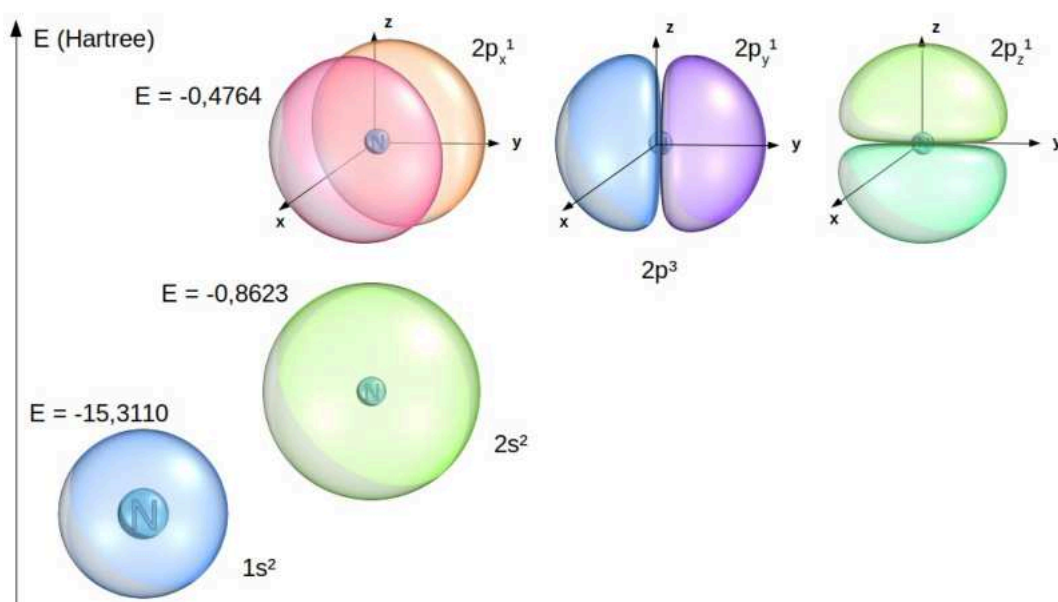


Figura 4. Orbitais e distribuição eletrônica do átomo de nitrogênio e suas respectivas energias em unidades atômicas fundamentais. Calculados com o método ROHF (ROHF/STO-3G).

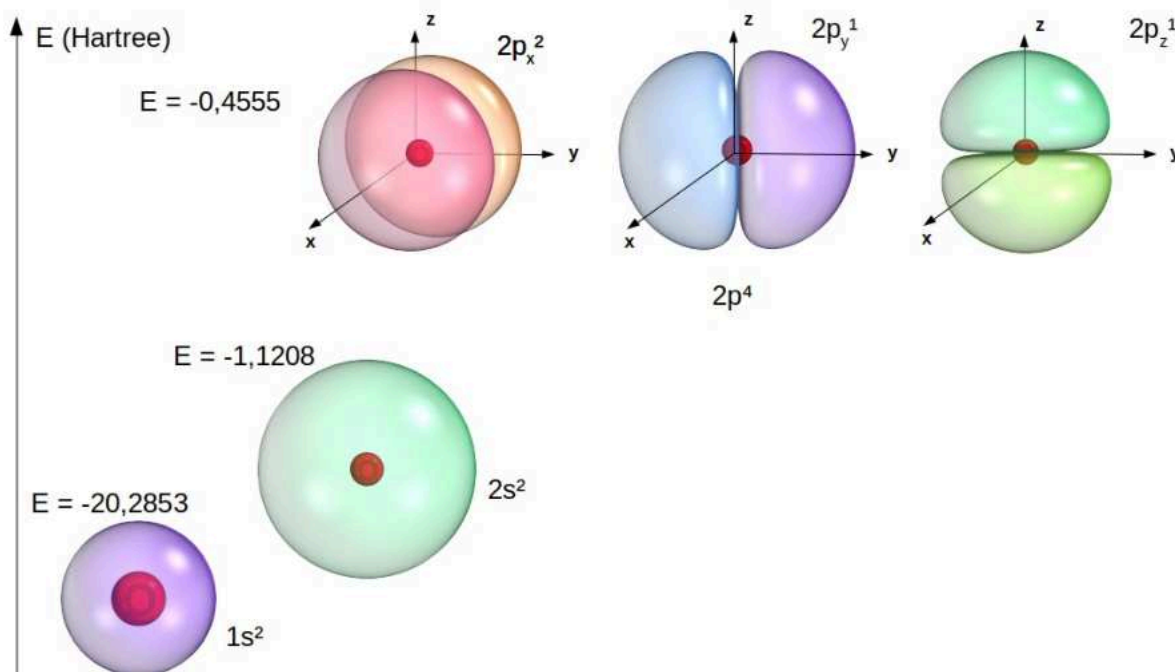


Figura 5. Orbitais e distribuição eletrônica do átomo de oxigênio e suas respectivas energias em unidades atômicas fundamentais. Calculados com o método ROHF (ROHF/STO-3G)

E para justificar o aumento da energia de ionização e o tamanho desses orbitais, é necessário lançar mão da carga nuclear efetiva. O conceito de carga nuclear efetiva resulta convenientemente do modelo quântico para estrutura atômica, pois uma vez sendo impossível resolver a equação considerando explicitamente a repulsão, considera-se uma repulsão média: os demais elétrons fornecem uma distribuição contínua de carga que gera um campo elétrico de carga negativa e que blinda a carga elétrica atrativa do núcleo. Embora possua mais elétrons que o nitrogênio e o carbono, os elétrons adicionais do oxigênio não contribuem para o aumento da blindagem e, assim, o aumento do número atômico resulta em um aumento da carga nuclear efetiva. O resultado é uma atração maior em relação ao núcleo que torna as energias de seus orbitais mais negativas e, conseqüentemente, seus orbitais mais contraídos. É necessário ter em mente que tais figuras estão fora de escala, mas com um ajuste mais rigoroso é possível deixá-las coerentes com as escalas nas unidades *Angström* de comprimento, possibilitando a revisão do tema dos raios atômicos mediante uma episteme quântica, que é novidade para os alunos.

CAPÍTULO IV

Conclusões e Recomendações

1. Os números quânticos são uma resposta para um problema específico

Observou-se que, no contexto do ensino de química, os conceitos de orbital e de números quânticos são frequentemente apresentados sem que se faça qualquer menção à mudança de paradigma que marca este campo epistêmico, cuja consequência é uma deformação conceitual que os apresenta como prontos e acabados. Em termos práticos, numa sala de aula, as abordagens dominantes apresentam respostas para perguntas que nunca foram feitas e é necessário se questionar que valor tem uma resposta para a qual não se conhece a pergunta. O orbital é a resposta para um problema, até onde se conhece o problema determina o quanto a resposta pode fazer sentido e na educação básica, de fato, não é possível conhecer o problema completamente, entretanto é possível demarcar quais aspectos do problema podem ser mediados e trazidos para o contexto do ensino médio. Como sentenciou Louis Castel em 1740:

“Um homem que raciocina, que faz uma demonstração, trata-me como homem; raciocino junto com ele; deixa-me a liberdade de julgar e, se me força, é através da minha própria razão. Mas aquele que grita "é um fato" considera-me como escravo.” (BACHELARD, 1996, p. 52)

e esta maneira de abordar a questão, como resposta direta a uma pergunta oculta, demonstrou resultar numa banalização dos conceitos causando dessensibilização em relação à profundidade que possuem e ao impacto que eles podem causar na percepção de mundo. Essa banalização precisa ser problematizada e são necessários esforços intelectuais para vislumbrar maneiras de contorná-la e, como

foi colocado no início do trabalho, sem abrir mão da mediação e das simplificações inevitáveis na transição do conhecimento científico para o conhecimento escolar que são, por essência, de naturezas e finalidades diferentes. É necessário, nesse sentido, frisar novamente que nossa análise não encontra razões para abolir a prática da distribuição eletrônica. Se observou, porém, que o refinamento conceitual dessa atividade será mais proveitoso ao aprendizado.

Observou-se também que o ensino do tema, como se vê, constitui um conhecimento inquestionado e, por conseguinte, incorre frequentemente em obstáculos epistemológicos de naturezas verbalista e realista: seja quando o orbital é apresentado como um lugar, uma camada a ser ocupada, seja quando o orbital é apresentado com um subnível de energia quantizada sem se fazer qualquer discussão sobre a quantização da energia ou sobre as leis probabilísticas do movimento. Contudo, também foi constatado ao longo do trabalho que tais obstáculos e dessensibilizações podem ser contornados valorizando aspectos específicos do conteúdo que se relacionam com propriedades químicas e também através de esforços interdisciplinares ou transdisciplinares com o auxílio do ensino de física e possivelmente de outras áreas como matemática pela estruturação matemática do paradigma quântico e da filosofia pelas implicações quanto à visão de mundo e às rupturas frente ao realismo coerente. O ensino de física, por sua vez, precisa adotar uma postura mais ativa no ensino dos paradigmas da física moderna, focando nas transições das concepções clássicas para as concepções modernas e seus impactos na maneira de entender a realidade.

Propusemos estratégias didáticas de revisitação de conceitos já tratados classicamente, sob uma nova perspectiva epistêmica, trazendo a novidade da ruptura com noções comuns sobre o movimento que consiste em uma mudança de paradigma e usando recursos visuais atraentes. No entanto, salientamos que cabe ao professor de química decidir aplicar ou não as propostas que apresentamos. Esclarecemos também que quanto mais madura for a idade dos alunos alvos dessas revisitações, maior será a chance das abordagens serem proveitosas.

2. O uso das analogias de Glynn com cordas vibrantes

Observou-se que existe uma brecha crucial no ensino de química onde cabe um esforço interdisciplinar junto à física, e esta brecha se dá na abordagem da transição do modelo atômico de Rutherford para o modelo atômico de Bohr. O esforço interdisciplinar consiste em uma discussão expositiva dos fundamentos e das motivações históricas e físicas para a construção do paradigma da quantização da energia do átomo. A análise feita neste trabalho conclui que o ensino do tema dos modelos atômicos deveria ser realocado na grade horária da segunda ou da terceira série do ensino médio, onde se vê maior maturidade e já houve familiarização com os conceitos de conservação da energia e eletromagnetismo. Como foi exposto, a conservação do momento angular não é contemplada no ensino médio. Porém, conforme sugeriu Parente, o entrave pode ser contornado com o uso das analogias de Glynn entre os modos de vibração de uma corda vibrante com extremidades fixas e os níveis de energia quantizada do elétron no átomo.

Apesar das ondas possuírem uma velocidade de propagação no espaço, não possuem uma localização específica no espaço como é o caso de uma partícula. O aspecto de deslocalização do elétron levou De Broglie a considerar o comportamento do elétron e de outras partículas como análogo ao do fóton em termos de exibir propriedades de onda e de partícula. Como é proposto no trabalho de Parente, essa é a oportunidade para se lembrar do conceito análogo: os modos de vibração dos estados estacionários de uma corda vibrante com extremidades fixas (PARENTE, 2013, p.29). A analogia encontra fundamento na manipulação algébrica das expressões de comprimento de onda de uma corda vibrante e da equação de De Broglie, permitindo assim chegar-se na expressão da energia quantizada do átomo de Bohr sem fazer uso do conceito de conservação do momento angular (PARENTE, 2013, P. 30-33). O método de analogias de Glynn propõe que se encontrem domínios de similaridade entre o conceito alvo (átomo de Bohr) e o conceito análogo (cordas vibrantes) e obtém-se então uma relação bijetiva entre o conceito análogo e o conceito alvo. Os modos normais de uma corda vibrante possuem um comprimento de onda, assim como o elétron na órbita estacionária do átomo de Bohr, os modos normais e os níveis de energia surgem aplicando-se condições de contorno e, por fim, os modos normais de vibração da

corda são quantizados assim como as energias dos estados estacionários do átomo de Bohr.

Cabem, no entanto, algumas ressalvas em relação à proposta. A primeira é que não existe justificativa física para igualar o comprimento de onda associado a um elétron no átomo ao comprimento arbitrário $2L$ de uma corda vibrante com extremidades fixas. Os elétrons não são cordas e as oscilações associadas a eles são de natureza eletromagnética e não são de maneira algumas ondas mecânicas que se propagam em uma corda macroscópica de massa desprezível. Em caráter de mediação para o ensino médio é possível conceder alguma licença para essa imprecisão conceitual, desde que não se perca de vista o risco dela incorrer no obstáculo epistemológico realista que foi criticado no presente trabalho. Além disso, embora o uso da analogia ajude a suavizar a aridez da linguagem formal e possa ajudar a ampliar a compreensão, o uso descuidado de analogias que busquem aproximar o conhecimento científico do senso comum evitando a abstração pode provocar sérios problemas de aprendizado pois não há continuidade entre o conhecimento científico e o senso comum cotidiano, uma vez que um se constrói retificando os equívocos do outro. Porém, não é o caso da proposta de Parente pois esta não evita a abstração, inclui um desenvolvimento matemático e conceitual dedutivo e além disso relaciona dois conceitos científicos: cordas vibrantes e átomo de Bohr em sua analogia. Não constitui, portanto, uma negligência à abstração e tampouco uma tentativa de aproximar o conhecimento científico do conhecimento comum cotidiano. Recomenda-se, portanto, como perspectiva futura a aplicação do método proposto por Parente para abordar a transição entre os modelos de Rutherford e Bohr em um esforço interdisciplinar. Contudo, o presente trabalho não avalia o alcance dessa proposta em sala de aula e, assim, se recomenda uma pesquisa posterior com essa finalidade.

3. Recomendação do uso da revista A Estrutura Eletrônica dos Elementos Químicos em esforço interdisciplinar

Para suprir a carência de discussões sobre os fundamentos da química quântica que se observou nas abordagens tradicionais, recomenda-se o uso da revista *A Estrutura Eletrônica dos Elementos Químicos*, que contém texto explicativo e resultados obtidos com cálculos computacionais, cujas funções de onda otimizadas foram visualizadas com o software Iboview onde se produziu as figuras. As figuras apresentadas na seção 3.4 foram retiradas desta revista. A revista está no formato adequado de *Creative Commons*, acompanhado dela foi produzido também um Guia do Professor com recomendações de como utilizar o material ou produzir outras figuras semelhantes às que foram utilizadas na revista. O uso da revista assim como o uso de ferramentas computacionais no ensino médio é altamente recomendado porque ilustra aspectos modernos da química teórica e do conhecimento científico. Em face do exposto no presente trabalho e, assim como no Guia do Professor, recomenda-se o uso do material mediante leitura conjunta com toda a turma e com pausas e intervalos entre as seções para que a leitura não se torne maçante e nem dificulte o aprendizado. É recomendado no guia que sejam feitas pausas para idas ao quadro a fim de refinar o entendimento dos conceitos apresentados e para não negligenciar o dever de desenvolver a abstração. Recomenda-se, portanto, como perspectiva futura a aplicação do material didático mediante as instruções do guia do professor. A revista pode ser baixada gratuitamente através do link [A Estrutura Eletrônica dos Elementos Químicos](#) e o guia do professor através do link [Guia do Professor](#). Entretanto, é necessário salientar que o presente trabalho não avalia o alcance dessa proposta em sala de aula e, diante disso, se recomenda uma pesquisa posterior com essa finalidade.

4. Recomendações futuras

O presente trabalho não possuía como objetivo discutir o que diz a legislação educacional brasileira a respeito do ensino de química quântica no ensino médio. Recomendamos que sejam realizadas pesquisas posteriores nesse sentido, sempre dialogando com o fato da legislação exigir o ensino de conceitos de física moderna no ensino de física.

Apontamos para a questão grave de nem todos os cursos de Licenciatura em Química possuírem disciplinas adequadas para o ensino dos temas quânticos. Por essa razão, recomendamos que sejam ministrados cursos de introdução à química quântica em todas as modalidades de formação dos professores de química.

Consideramos ser urgente a abordagem de rupturas epistêmicas, em especial a descontinuidade clássica-quântica, nas disciplinas de Didática da Química e Prática de Ensino dos cursos de Licenciatura em Química. Visto que já apontamos a necessidade de se medir e dar consequência ao impacto de mudanças epistêmicas em sala de aula, impacto que permanece inexplorado nas pesquisas de ensino.

Sem perceber, introduzimos uma espécie de analogia de Glynn que possui como conceito análogo a função seno e seu módulo quadrado e como conceito alvo a função de onda e sua densidade de probabilidade de se encontrar o elétron em uma região do eixo x . Contudo, é necessário um refinamento sistemático da abordagem que propusemos, o que deverá ser objeto de outra pesquisa.

Um assunto complexo relacionado à estrutura eletrônica é o *spin* do elétron, que não abordamos na presente pesquisa. É necessário falar sobre spin no ensino médio? Até onde se pode ir com o conceito de spin? São questões que devem ser objeto de pesquisas e recomendamos fortemente que assim seja.

Por fim, recomendamos que o tema seja revisitado utilizando-se outros referenciais teóricos e epistemológicos, quer sejam os novos trabalhos concordantes ou discordantes, consideramos urgente que o tema não seja esquecido ou negligenciado em futuros trabalhos sobre o ensino de química.

Bibliografia

BACHELARD, Gaston. **A Formação do Espírito Científico: CONTRIBUIÇÃO PARA UMA PSICANÁLISE DO CONHECIMENTO**. 5ª Ed. Contraponto, 1996. p. 17-29, 27, 50, 52, 77, 249.

BACHELARD, Gaston. **O Pluralismo Coerente da Química Moderna**, 1ª Ed. Contraponto, 2009. p. 198.

EISBERG, R., RESNICK, R., **Física Quântica – Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas**, 23ª ed., Campus (1979) p. 138-145

GUEDES, B. S., AMAZONAS, J. T., **Química Geral e Inorgânica: 2º grau, volume 1**. SEI (Sistema Educacional Integrado), vol. 1, 3ª edição, 1997. p. 77-90.

INEP, **EXAME NACIONAL DO ENSINO MÉDIO - PROVA DE CIÊNCIAS DA NATUREZA E SUAS TECNOLOGIAS**. 2017, Caderno 5 Amarelo do 2º dia. p.2. Disponível em https://download.inep.gov.br/educacao_basica/enem/provas/2017/cad_5_prova_amarelo_12112017.pdf. Acesso em 4 de Fevereiro de 2025.

KNIZIA, G., **Intrinsic atomic orbitals: An unbiased bridge between quantum theory and chemical concepts** J. Chem. Theory Comput., 9 4834 (2013)

LEVINE, I. **Quantum Chemistry**. 5th Edition, Prentice Hall, 2000. p. 7-12, 26, 366-375, 389-390, 413-414, 486.

LOPES, A. R. C. **LIVROS DIDÁTICOS: OBSTÁCULOS AO APRENDIZADO DA CIÊNCIA QUÍMICA I - Obstáculos Animistas e Realistas**. QUÍMICA NOVA, 15(3), 1992. p. 398-405.

LOPES, A. R. C. **Livros Didáticos: Obstáculos Verbais e Substancialistas ao Aprendizado da Ciência Química**. R. bras. Est. pedag., Brasília, v.74, n.177. 1993. p.309-334

LOPES, A. R. C. **CONTRIBUICÓES DE GASTON BACHELARD AO ENSINO DE CIÊNCIAS**. ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS, 1993, 11 (3), 324-330.

LOPES, A. R. C. **BACHELARD: O FILÓSOFO DA DESILUSÃO**. Cad.Cat.Ens.Fis., v.13,n3: 1996. p. 248-273, 254-256, 258-261.

LOPES, A. R. C. **CONHECIMENTO ESCOLAR EM QUÍMICA - PROCESSO DE MEDIAÇÃO DIDÁTICA DA CIÊNCIA**. QUÍMICA NOVA, 20(5) (1997). p. 563-568.

MORTIMER *et. al.* **Bases teóricas e epistemológicas da abordagem dos perfis conceituais**. *Tecné , Epísteme y Didaxis: TED*. 2011, (30), 111-125. ISSN: 2665-3184. Disponível em <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=614265297008>. Acesso em 4 de Fevereiro de 2025.

NEESE, F. **Software update: The ORCA program system—Version 5.0**. 2022, Wiley interdisciplinary reviews: Computational Molecular Science. 12(1) DOI:10.1002/wcms.1606

PARENTE, Francisco Áureo Guerra. **Uma Proposta ao Ensino do Átomo de Bohr no Ensino Médio**. Instituto de Física - UFRJ, 2013. p. 1, 3, 24-37, 29, 30-33, 38-48.

SZABO, A. OSTLUND, N. **Modern Quantum Chemistry - Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**. Dover, 1982, p. 108-160.