

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

SILAS GOULART DA CUNHA

**A ESTRUTURA ELETRÔNICA DO ÁTOMO: UM ESTUDO
SOBRE O CONHECIMENTO DE QUÍMICA QUÂNTICA NO
ENSINO SUPERIOR**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Porto Alegre, fevereiro de 2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

SILAS GOULART DA CUNHA

**A ESTRUTURA ELETRÔNICA DO ÁTOMO: UM ESTUDO SOBRE
O CONHECIMENTO DE QUÍMICA QUÂNTICA NO ENSINO
SUPERIOR**

Dissertação apresentada como requisito parcial para a
obtenção do grau de Mestre em Química

Profa. Dra. Lívia Streit
Orientadora

Porto Alegre, fevereiro de 2022

CIP - Catalogação na Publicação

Cunha, Silas Goulart da

A estrutura eletrônica do átomo: um estudo sobre o conhecimento de química quântica no ensino superior / Silas Goulart da Cunha. -- 2022.

128 f.

Orientadora: Livia Streit.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química, Porto Alegre, BR-RS, 2022.

1. Ensino de química quântica. I. Streit, Livia, orient. II. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UFRGS com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

A presente dissertação foi realizada inteiramente pelo autor, exceto colaborações devidamente citadas nos agradecimentos, no período entre julho de 2019 e janeiro de 2022 no Instituto de Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul sob Orientação da Professora Doutora Livia Streit. A dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de Mestre em Química pela seguinte banca examinadora:

Prof. Dr. Paulo Fernando B. Gonçalves

Prof. Dr. Rogério Custodio

Prof^a. Dr^a. Tania Denise M. Salgado

Prof^a. Dr^a. Livia Streit

Agradecimentos

Primeiramente quero agradecer minha orientadora Livia Streit por ter iniciado tudo isso.

Aos meus familiares que permitiram que eu chegasse até aqui. Agradecimento especial para minha noiva Andreia, por ser um poço infinito de apoio e motivação.

Ao Diego Dias por ter ajudado na construção e desenvolvimento do trabalho.

Aos integrantes do Grupo de Pesquisa em Ensino de Química.

Aos professores Hubert, Leliz, Marcelo e Maria do Carmo que cederam seu tempo, permitindo que a pesquisa ocorresse.

Aos participantes da pesquisa.

À UFRGS, PPGQ, IQ e CAPES pelo incentivo à pesquisa.

Aos integrantes de banca por aceitarem fazer parte desse momento de minha vida.

Ao Rodrigo dos Santos Fuscaldo por compartilhar o seu modelo de dissertação, ajudando na escrita do trabalho.

"O fator isolado mais importante que influencia a aprendizagem é o que o estudante já sabe. Descubra isso e ensine-o de acordo"

David Ausubel

PRODUÇÃO CIENTÍFICA RELACIONADA AO MESTRADO

ARTIGO EM REDAÇÃO

Cunha, S.; Dias, D.; Streit, L. The electronic structure of the atom: (mis)interpretations of quantum concepts by Brazilian University Chemistry students.

Lista de Figuras

Figura 1. Estrutura de Lewis para a molécula de água.....	21
Figura 2. Diagrama de energia para o átomo de hidrogênio ⁷⁵	33
Figura 3. Diferentes representações para o átomo de hélio ²¹	34
Figura 4. Modelo bidimensional de orbitais moleculares ⁴⁸	35
Figura 5. Gráfico do quadrado das funções de onda multiplicados pelo volume da região ⁵²	38
Figura 6. Gráfico da média do valor para cada questão da CQ (Q1).....	45
Figura 7. Histograma da soma dos valores para as questões da CQ (Q1).....	46
Figura 8. Gráfico da média do valor para cada questão da CR (Q1).....	47
Figura 9. Histograma da soma dos valores para as questões da CR (Q1).....	48
Figura 10. Gráfico da média do valor para cada questão da CQ (Q2).....	50
Figura 11. Histograma da soma dos valores para as questões da CQ (Q2).....	51
Figura 12. Gráfico da média do valor para cada questão da CR (Q2).....	52
Figura 13. Histograma da soma dos valores para as questões da CR (Q2).....	52
Figura 14. Diagrama de energia para o átomo de hidrogênio ⁷⁵	62
Figura 15. Modelo bidimensional de orbitais moleculares ⁴⁸	63
Figura 16. Diferentes representações para o átomo de hélio ²¹	78
Figura 17. Exemplos de respostas para a questão 2 (QI1A).....	81
Figura 18. Exemplos de respostas para a questão 2 (QI1B).....	82
Figura 19. Gráfico do quadrado das funções de onda multiplicados pelo volume da região ⁵²	83
Figura 20. Exemplos de respostas para a questão 1 (QI1A).....	89
Figura 21. Exemplos de respostas para a questão 1 (QI1B).....	90
Figura 22. Exemplos de respostas para a questão 1 (QQ).....	91

Lista de Tabelas

Tabela 1. Resumo dos planos de ensino das disciplinas dos cursos de Química, etapa aconselhada, objetivos e tópicos relacionados à química quântica	43
Tabela 2. Distribuição dos estudantes nos cursos e disciplinas (Q1)	44
Tabela 3. Média dos valores para cada turma para a CQ (Q1).....	45
Tabela 4. Média dos valores para cada turma para a CR (Q1)	46
Tabela 5. Média dos valores para cada turma para a CQ (Q2).....	49
Tabela 6. Média dos valores para cada turma para a CR (Q2)	51
Tabela 7. Semelhanças entre os dois questionários	53
Tabela 8. Distribuição das respostas para cada turma	62
Tabela 9. Distribuição das respostas para cada turma (questão 2a)	79
Tabela 10. Distribuição das respostas para cada turma (questão 2b)	80
Tabela 11. Resultados das provas dos estudantes de Química Quântica.....	112

Símbolos e Abreviaturas

CQ – Categoria Quântica

CR – Categoria Representação

ERE – Ensino Remoto Emergencial

FMT – *Folk Molecular Theory* (Teoria Molecular Popular)

Q1 – Questionário 1

Q2 – Questionário 2

Q11A – Turma de Química Inorgânica I A

Q11B – Turma de Química Inorgânica I B

Q13 – Turma de Química Inorgânica III

QQ – Turma de Química Quântica

Resumo

Neste estudo, foram investigados as concepções e os obstáculos de aprendizagem química quântica de estudantes universitários de cursos de química da UFRGS. Empregou-se metodologia qualitativa e os dados foram coletados por meio de dois questionários, um no início e outro no final do semestre contendo questões representacionais e conceituais de química quântica. Também foi realizada, em outro semestre, uma intervenção na disciplina de Química Quântica por meio de aulas extras de forma *online*, aplicando metodologias ativas. Não foi possível notar uma melhoria na compreensão dos alunos quanto à estrutura eletrônica do átomo. Os estudantes tiveram melhor desempenho com questões representacionais do que questões conceituais em ambos os questionários. A análise dos questionários sugere um processo de aprendizagem mecânica de conceitos relacionados à química quântica, oposto à aprendizagem significativa. As médias de acertos para os Q1 e Q2 foram 45,0 e 23,3%, respectivamente. Esses resultados podem estar parcialmente relacionados à diferença na forma das sentenças apresentadas nos dois questionários, embora sendo os questionários equivalentes em conteúdo. Alguns obstáculos apresentados pelos alunos foram observados: diferenciar conceitos quânticos e clássicos; definição de orbital; dualidade partícula-onda e função de onda; princípio da incerteza de Heisenberg; compreensão do diagrama de energia; e associar um modelo mental do átomo com características macroscópicas. Com relação à intervenção na disciplina de Química Quântica, os estudantes têm preferência em aprender o conteúdo de forma matemática, com deduções de equações e resolução de exercícios. As aulas ministradas apresentaram baixa adesão dos estudantes, limitando a aplicação das metodologias ativas. Como consequência, não foi possível avaliar a efetividade de tais metodologias. Os resultados das provas revelam que os estudantes apresentam dificuldade nos seguintes conteúdos: função própria, probabilidade e espectroscopia.

Palavras-chave: ensino de química quântica, estrutura eletrônica, metodologias ativas.

Abstract

In this study, the conceptions and learning obstacles of students of chemistry programmes at UFRGS regarding quantum chemistry concepts were investigated. Qualitative research methodology was employed and data were collected through two questionnaires, one at the beginning, and another at the end of the semester. In a different academic semester, an intervention was performed in the Quantum Chemistry course, through extra online classes, using active learning methodologies. It was not possible to notice an improvement in students' understanding of the electronic structure of the atom. Students performed better with representational questions than conceptual questions for both questionnaires. Results suggest students undergo a process of rote learning of quantum chemistry concepts, opposed to meaningful learning. Average of correct answers for Q1 and Q2 were 45,0 and 23,3%, respectively. These results may be partially related to the difference in the form of sentences in the two questionnaires, although the questionnaires are equivalent in content. Students presented the following learning obstacles: differentiating quantum from classical concepts; definition of the concept of orbital; wave-particle duality and wave function; Heisenberg's uncertainty principle; understanding of an energy diagram; and associating a mental model of the atom with macroscopic features. Regarding the intervention in the Quantum Chemistry course, students prefer to learn the content via a mathematical approach, with equation deduction and problem solving. The classes had low student participation, limiting the application of active learning methodologies. As a result, it was not possible to assess the effectiveness of such methodologies. Exam results reveal that, on average, 31.2% of the questions were not answered, and 63% of the questions were answered correctly. Students showed obstacles in the following exam topics: proper function, probability, and spectroscopy.

Keywords: quantum chemistry teaching; electronic structure; active learning methodologies.

Sumário

1. Introdução	12
2. Objetivos	14
3. Revisão Bibliográfica	15
3.1. Ensino de Química	15
3.1.1. <i>Química Quântica</i>	16
3.1.2. <i>FMT</i>	20
3.2. Aprendizagem Significativa	23
3.3. Metodologias Ativas	26
3.3.1. <i>Think-pair-share</i>	26
3.3.2. <i>Peer Instruction</i>	27
4. Metodologia	28
4.1. Parte 1 – Panorama das concepções dos estudantes	28
4.1.1. <i>Etapa 1 – Aplicação do Questionário 1</i>	29
4.1.2. <i>Etapa 2 – Aplicação do Questionário 2</i>	36
4.1.3. <i>Etapa 3 – Análise de Conteúdo</i>	40
4.2. Parte 2 – Intervenção na disciplina Química Quântica	41
4.2.1. <i>Etapa 1 – Descrição dos estudantes</i>	41
4.2.2. <i>Etapa 2 – Aulas ministradas</i>	42
4.2.3. <i>Etapa 3 – Feedback das aulas ministradas</i>	42
4.2.4. <i>Etapa 4 – Análise das provas</i>	42
5. Resultados e Discussão	43
5.1. Parte 1 – Panorama das concepções dos estudantes	43
5.1.1. <i>Abordagem quantitativa</i>	44
5.1.2. <i>Abordagem Qualitativa</i>	53
5.2. Parte 2 – Intervenção na disciplina Química Quântica	93
5.2.1. <i>Etapa 1 – Descrição dos estudantes</i>	93
5.2.2. <i>Etapa 2 – Aulas ministradas</i>	95
5.2.3. <i>Etapa 3 – Feedback das aulas ministradas</i>	109
5.2.4. <i>Etapa 4 – Análise das provas</i>	111
6. Conclusões e considerações finais	113
Referências	115
Anexos	121
Questionário 1	121
Questionário 2	124

1. Introdução

O primeiro contato dos estudantes com o ensino de química quântica ocorre durante o ensino médio, quando os modelos atômicos são apresentados. Contudo, a abordagem dos modelos, que são abstratos, é feita de forma fragmentada entre o microscópico e o macroscópico. Dessa forma, os estudantes não conseguem relacionar os modelos aprendidos em sala de aula com o impacto que eles têm no seu cotidiano, distanciando a química de sua realidade. Além disso, o tempo usado para a discussão dos modelos em sala de aula é pequeno, gerando obstáculos no processo de aprendizagem, especialmente no que diz respeito ao que são os modelos, sua aplicação às situações químicas e como eles evoluíram ao longo dos anos¹. O átomo, então, é entendido desde muito cedo como algo concreto, onde os elétrons estão bem localizados ao redor de um pequeno núcleo. Em um estudo realizado em 2016 por Papageorgiou *et al.*² na Grécia, estudantes do ensino médio deveriam desenhar representações do átomo e os resultados do trabalho mostram que as representações clássicas, como o modelo de Bohr, apareceram em grande quantidade quando comparadas com as representações envolvendo características quânticas. Os equívocos conceituais e concepções errôneas do átomo mostrados por esses alunos tendem a perpetuarem-se através de suas jornadas acadêmicas ou profissionais. Bouayad *et al.*³ relataram em um estudo com estudantes universitários que alguns dos erros dos estudantes são referentes aos fundamentos básicos da química quântica, como não reconhecer um orbital como uma função matemática e entender o orbital atômico como a trajetória percorrida pelo elétron. As confusões que existem sobre os conceitos quânticos não se restringem à química quântica, mas também estão presentes em outras áreas da química, visto que o estudo do comportamento dos elétrons e, de forma mais geral, dos átomos é crucial para o entendimento das transformações que ocorrem devido às reações químicas, das ligações químicas e da estrutura dos átomos e moléculas. Nesse sentido, a química quântica não é uma área apenas matemática com aplicações em físico-química, mas mostra contribuições para outras áreas como, por exemplo, a química orgânica⁴. Portanto, é importante que os estudantes de cursos que envolvam conteúdos de química tenham um bom conhecimento básico de química quântica.

Concepções equivocadas de estudantes de química a respeito da estrutura atômica nos levam a questionar a adequação pedagógica dos conteúdos no ensino superior, bem como as estratégias de ensino e aprendizagem. Metodologias ativas de aprendizagem

podem ser empregadas no ensino de química para auxiliar os estudantes no entendimento de conceitos de um determinado conteúdo.⁵ Na metodologia ativa, o estudante é o protagonista no processo de ensino e aprendizagem, opondo-se ao método tradicional em que o aluno é o coadjuvante. Nesse contexto, é útil relacionar o ensino de química quântica, que apresenta muitos problemas e desafios, com os métodos ativos com a finalidade de propiciar a compreensão de conceitos quânticos.

2. Objetivos

Os objetivos gerais deste trabalho são investigar as concepções dos conceitos de química quântica de estudantes universitários de cursos de química e investigar o uso de metodologias ativas como uma alternativa ao ensino tradicional em uma turma de Química Quântica. Para isto, os objetivos específicos são:

1. Identificar, através de uma análise documental do plano de ensino, disciplinas dos cursos de química que abordam os conceitos de química quântica na UFRGS;
2. Analisar a concepção de alunos de graduação em química da UFRGS sobre os conceitos de química quântica;
3. Determinar as dificuldades existentes nas abordagens de conceitos de química quântica;
4. Investigar a efetividade do uso de metodologias ativas no ensino de Química Quântica na UFRGS.

Esses objetivos podem ser resumidos com a seguinte pergunta de pesquisa:

A aprendizagem significativa de conteúdos da química quântica ocorre com estudantes de química da UFRGS?

3. Revisão Bibliográfica

Nesta seção será apresentada uma revisão bibliográfica sobre os temas principais do trabalho. Inicialmente, será feita uma contextualização do ensino de química e química quântica, exibindo os desafios que o ensino nessa área apresenta. Subsequentemente, a aprendizagem significativa será exposta como uma forma de pensar como ocorre o processo de ensino e aprendizagem e, por fim, serão discutidas metodologias ativas como uma alternativa ao ensino tradicional.

3.1. Ensino de Química

O número de apresentações de trabalhos na seção de Ensino de Química nas Reuniões Anuais da Sociedade Brasileira de Química (RASBQs) teve um aumento significativo de 5 apresentações em 1978 até cerca de 190 apresentações em 2004^{6,7}. De forma semelhante, entre 1997 e 2011 também ocorreu um aumento no número de trabalhos apresentados no Encontro Nacional de Pesquisadores em Educação em Ciências (ENPEC)⁸. Esse aumento na produção de trabalhos evidencia a importância e preocupação no desenvolvimento da área de ensino de química. A pesquisa no ensino de química tem grande relevância como um meio de superar as dificuldades que o ensino dessa disciplina enfrenta. Para o Ensino Superior, o Exame Nacional de Desempenho de Estudantes (Enade) indica que os estudantes de química têm dificuldades com a disciplina. Os relatórios do Enade de Química de 2005, 2008, 2011 e 2014 mostram que a média de acertos dos estudantes de química é de 28% para os conteúdos específicos de química⁹. Nesse sentido, é fundamental entender o que ocasiona o baixo desempenho dos estudantes de química e como resolver essa situação.

A química é uma disciplina que envolve alguns conhecimentos de difícil compreensão por serem abstratos. Não é possível mostrar os átomos para os estudantes. Assim, é essencial que o ensino de química seja pensado sob três aspectos do conhecimento: fenomenológico, teórico e representacional¹⁰. O aspecto fenomenológico engloba o que pode ser visto, sentido ou medido, como a mudança de cor em uma solução, a mudança de temperatura ou a mensuração da energia liberada em uma reação. Esse aspecto tem potencial para motivar e engajar os alunos, já que é através dele que os estudantes podem perceber como a química está inserida na sociedade e no meio, não a restringindo ao laboratório. O aspecto teórico compreende discussões de conceitos e temas abstratos que não podem ser visualizados, como é o caso da química quântica. Por

fim, o aspecto representacional está relacionado à linguagem química por meio de símbolos, equações e representações de modelos.

De forma semelhante, Johnstone¹¹⁻¹³ descreve três níveis para representar a química: macro, sub-micro e simbólico. O macro é tangível e visível. O sub-micro é o nível atômico ou invisível ao olho humano. O simbólico é aquele representado por fórmulas, equações, símbolos e gráficos. Durante o processo de ensino, os professores percorrem esses três níveis facilmente, contudo, os estudantes têm dificuldade em fazer o mesmo. Para Johnstone, os conceitos devem partir do nível macro e progressivamente serem atualizados com os níveis sub-micro e simbólico, de forma que os estudantes consigam acompanhar gradativamente esses conceitos. Nesse caso, a química quântica deveria ser introduzida de uma forma mais concreta, por exemplo, através de aplicações no cotidiano, e, a partir disso, ser relacionada gradualmente com os níveis simbólico e sub-micro.

3.1.1. Química Quântica

A mecânica clássica ou newtoniana é capaz de descrever uma variedade de sistemas de forma precisa. No entanto, quando aplicada a fenômenos microscópicos, a mecânica clássica exibe diversas limitações¹⁴. Nesse contexto, no início do século XX ocorreu o desenvolvimento da mecânica quântica, que tem como foco os sistemas na escala atômica¹⁵. O uso da mecânica quântica juntamente com conceitos químicos para discutir problemas da química deu origem à química quântica¹⁶.

Com relação ao ensino de química quântica, muitos problemas surgem devido ao elevado grau de abstração que os estudantes devem alcançar para conseguir compreender alguns conceitos. Como consequência, os estudantes preferem modelos mais discretos e concretos¹⁷. Além de problemas envolvidos com a matemática avançada necessária para a abordagem da química quântica, alguns dos principais problemas relacionados ao ensino de química quântica são:

– Representação do átomo: estudantes australianos de ensino médio imaginam o átomo de forma concreta, semelhante ao sistema solar¹⁷. Além disso, o modelo de Bohr é uma das representações preferidas por calouros de uma universidade grega em cursos de química, biotecnologia e ciências dos materiais¹⁸. Park e Light¹⁹ publicaram um estudo, com estudantes do primeiro ano do curso de química de uma universidade estadunidense, relacionando essa preferência do modelo de Bohr com a dificuldade que esses estudantes

têm em compreender o conceito de probabilidade de encontrar elétrons, ligada ao conceito de orbital. A mesma dificuldade no entendimento de probabilidade foi relatada para estudantes do ensino médio da Grécia²⁰. Para que os estudantes consigam ter uma imagem mental adequada do átomo, os conceitos de quantização de energia e probabilidade devem estar bem estabelecidos e, além disso, os estudantes devem conseguir integrar esses dois conceitos quando imaginam um modelo atômico, como descrito no estudo sobre as representações do átomo de hélio de Allred e Bretz²¹ com estudantes de nível superior dos Estados Unidos da América.

– Partícula-onda: o elétron é pensado apenas como uma partícula, o que gera a ideia do determinismo do caminho percorrido pelo elétron, como relatado por Muniz *et al.*²² em um trabalho com estudantes universitários estadunidenses de cursos de físico-química. Para o caso de experimentos como o sistema de dupla fenda, os estudantes de dois cursos de mecânica quântica tendem a explicar o fenômeno através da mecânica clássica²³. O conceito de partícula-onda pode ser descrito como a combinação dos conceitos clássicos de partícula e de onda na escala atômica²⁴. Através do efeito fotoelétrico é possível interpretar a característica particular de uma onda eletromagnética, pois a onda interage e transfere momento para a matéria como se fosse uma colisão clássica²⁵. Além disso, o experimento de Davisson-Germer mostra que partículas como elétrons, prótons e nêutrons possuem propriedades ondulatórias, como a difração²⁴.

– Função de onda: Chhabra e Das²⁶ realizaram uma pesquisa com estudantes de graduação no curso de Mecânica Quântica do National Institute of Science Education and Research na Índia, sobre como os estudantes entendem o conceito de função de onda. Os resultados mostram equívocos, como: relacionar a amplitude da função de onda com a velocidade de uma partícula ou, ainda, que o caminho de uma partícula pode ser descrito por uma função de onda. Schrödinger, após ser incentivado a apresentar um seminário sobre a associação entre onda e partícula, desenvolveu uma equação diferencial parcial linear que descreve um sistema quântico, conhecida como equação de Schrödinger²⁷. As soluções obtidas dessa equação são as funções de onda do sistema²⁸. Uma função de onda é capaz de descrever partículas sob o olhar da mecânica quântica²⁹, ou seja, descrever a dualidade partícula-onda.

– Princípio da incerteza: os alunos iniciantes de uma universidade grega, apresentaram dificuldades no entendimento desse princípio de acordo com estudos de Tsaparlis e Papaphotis¹⁸ em 2009. A ideia de incerteza foi associada aos instrumentos ou procedimento de medição, como um erro causado pelo equipamento ou operador. O princípio da incerteza de Heisenberg descreve a impossibilidade de se determinar, simultaneamente e com precisão, o momento e a posição de uma partícula-onda através da equação²⁹: $\Delta x \Delta p_x \geq h$. O “*h*” é uma constante (constante de Planck), Δx é a variação da posição e Δp_x é a variação do momento linear. Quanto mais precisa é a medida da posição, menor será Δx e, nesse caso, maior será Δp_x , ou seja, menos precisa é a medida do momento²⁸.

– Orbital atômico: alguns estudos revelam a dificuldade que os estudantes tem com o conceito orbital. De acordo com estudos de Taber^{30,31}, com estudantes entre o nível médio e superior, e Tsaparlis³², com estudantes de graduação do curso de química quântica, os estudantes têm dificuldade em diferenciar orbitais atômicos e orbitais moleculares. Nakiblogu³³ relata que, apesar de 54% dos estudantes universitários analisados entenderem o orbital como uma região espacial no átomo em que o elétron provavelmente será encontrado, 29% dos alunos têm um entendimento errôneo sobre orbitais, como considerar que orbital e órbita são sinônimos, ou seja, descrever um átomo como semelhante ao sistema solar. Além disso, Taber³⁰ e Nicoll³⁴ mostraram que estudantes de nível superior confundem os termos orbital e camada. Conforme o trabalho de Taber³⁰, os estudantes definem orbital como uma camada onde os elétrons estão girando em órbitas circulares. É possível definir o orbital de duas formas: matemática e físico-química³⁵. A forma matemática diz que orbital atômico é uma função de onda espacial de um elétron em um átomo²⁹, ou seja, é uma função matemática e não pode ser vista ou medida³⁶. Por outro lado, a definição físico-química relaciona o orbital atômico como uma região espacial ao redor do núcleo em que existe a probabilidade de se encontrar um ou dois elétrons³⁵.

A evolução da pesquisa em ensino de química converteu-se no desenvolvimento de possíveis formas de aprimoramento do ensino de conteúdos de química quântica. Alguns exemplos são descritos abaixo:

– Representações: ferramentas que auxiliam na visualização da estrutura e dinâmica molecular são interessantes como uma forma de auxiliar os estudantes no entendimento de processos químicos³⁷. Segundo alguns autores, as imagens que remetem ao modelo de Bohr do átomo devem ser evitadas³⁸ para não criar dificuldades na superação desse modelo frente aos modelos quânticos³⁹. Por outro lado, McKagan *et al.*⁴⁰ relatam que currículos que não abordam as diferenças entre os modelos atômicos contribuem para a preferência do modelo de Bohr, e os currículos que incluem essas discussões promovem uma maior preferência por modelos quânticos para o átomo. Além disso, é muito importante mostrar que modelos quânticos são superiores para solucionar problemas da química quando comparados com o modelo de Bohr³⁹. Outra representação muito importante e que facilita o entendimento dos estudantes é a representação do orbital, contudo, é fundamental que se enfatize que as figuras e desenhos, normalmente usadas em livros, são representações e não possuem uma realidade física⁴¹. Akaygun⁴² realizou um estudo com estudantes de ensino médio da Turquia e observou que os estudantes aprimoraram a imagem mental da estrutura atômica através de *softwares* para o desenvolvimento de animações. Outro ponto importante a ser considerado é evitar o uso de argumentos por analogias, especialmente por meio de recursos visuais incompletos e enganosos, como desenhos de átomos e orbitais ou a denominação de modelos, como bola de bilhar, pudim de passas e modelo planetário⁴³.

– Probabilidade: um conceito muito importante para o entendimento da química quântica é a probabilidade. Esse conceito deve ser desenvolvido nas aulas com a finalidade de evitar que os estudantes concebam características quânticas como concretas⁴⁴, como por exemplo, os orbitais⁴⁵.

– Apresentação de controvérsias: a maioria dos livros didáticos tradicionais não apresentam algumas das possíveis interpretações da mecânica quântica. A principal abordagem dos livros é instrumentalista, isto é, através apenas do formalismo matemático e estatístico, dificultando a compreensão dos estudantes^{39,46}. A discussão das diferentes interpretações na ciência resulta em bons resultados no ensino e aprendizagem⁴⁷.

– Abordagem qualitativa: Dangur *et al.*⁴⁸ realizaram um trabalho relativo à compreensão dos conceitos de mecânica quântica por alunos de graduação. A ideia dos pesquisadores foi ministrar um minicurso como parte de um curso de química quântica. O minicurso

abordava temas abstratos da química quântica como: orbitais atômicos, orbitais moleculares e o modelo de bandas de energia. A abordagem empregada foi visual e conceitual. Comparando os estudantes de graduação que fizeram o minicurso e os estudantes que não fizeram, constatou-se um aumento na pontuação dos estudantes que fizeram o minicurso, ou seja, o uso de uma abordagem qualitativa, que integra a compreensão de conceitos e representações visuais em um curso de mecânica quântica, desenvolve o entendimento conceitual dos alunos. Müller e Wiesner⁴⁹ relatam a aplicação de uma disciplina introdutória de química quântica de forma conceitual. Os estudantes são expostos às diferenças entre a mecânica clássica e quântica desde o início do curso e os resultados mostram que os estudantes conseguiram se apropriar de conceitos de quântica, além de evitar muitos equívocos comuns, tais como: a estrutura eletrônica de um átomo é semelhante ao sistema solar, o movimento do elétron é similar ao movimento de uma partícula clássica, a posição e momento de objetos quânticos podem ser determinados simultaneamente e, de acordo com as concepções dos estudantes, ter preferência ao modelo atômico de Bohr frente ao modelo de nuvem eletrônica.

3.1.2. *FMT*

Um dos grandes problemas no ensino de química quântica está na dificuldade que alguns estudantes têm em estabelecer uma diferença clara entre o que é clássico e o que é quântico. Entre os exemplos está a representação do átomo. Conforme Allred e Bretz²¹, os estudantes conseguem conceber dois modelos contraditórios ao mesmo tempo, como é o modelo de Bohr, que ainda possui características clássicas, e o modelo quântico, que descreve os elétrons não como partículas clássicas e sim através do conceito de dualidade partícula-onda. O problema descrito acima não tem origem nas ideias e concepções dos estudantes. Segundo Gómez e Martín⁵⁰, a química quântica é uma disciplina acadêmica e, dessa forma, não está claramente relacionada ao amplo conhecimento químico desenvolvido nos laboratórios de química inorgânica, química orgânica ou química analítica. Os problemas reais de química demandam um conhecimento aprofundado de matemática para serem abordados sob a óptica da química quântica, dificultando sua solução por estudantes com um conhecimento básico de matemática. Por outro lado, para a resolução de tais problemas, é suficiente o entendimento de um modelo visual simples que é independente da mecânica quântica. Esse modelo foi nomeado de Teoria Molecular Popular (do inglês *FMT – Folk Molecular Theory*)⁵¹. Para Gómez e Martín⁵⁰, a *FMT* é “um conjunto informal de ideias estruturais e regras semi-empíricas”. De acordo com a

FMT, as ligações que ocorrem entre os átomos são concretas, existe algo ligando os átomos como uma mola, e essas ligações podem ser (e são) representadas por regras como as de Lewis, a hibridização de orbitais atômicos ou a teoria de repulsão dos pares de elétrons no nível de valência (do inglês *Valence Shell Electron Pair Repulsion* – VSEPR). A FMT é a base teórica de muitos professores, visto que é simples. Não há o formalismo matemático que a química apresenta e ela consegue descrever uma variedade de sistemas químicos em nível microscópico. Como consequência, os estudantes são apresentados à FMT em disciplinas introdutórias de química⁵⁰.

Como um exemplo, tem-se a **Figura 1** abaixo que representa a molécula de água de acordo com a estrutura de Lewis.

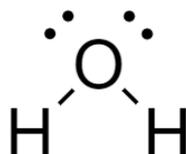


Figura 1. Estrutura de Lewis para a molécula de água

A estrutura de Lewis é usada para determinar a geometria molecular e isso é possível através de um procedimento com algumas etapas simples como: definir o átomo central (átomo menos eletronegativo), inserir as ligações entre o átomo central e os outros átomos, completar o octeto desses outros átomos e distribuir os elétrons restantes no átomo central⁵².

Os problemas que surgem com o uso do modelo de Lewis são⁵⁰:

1 – Não é um modelo quantitativo das interações entre os componentes em termos de um modelo matemático, ou seja, não é um modelo físico. Contudo a FMT descreve o comportamento e a interação dos átomos de forma a tornar possível de se verificar fisicamente propriedades como composição, estrutura e reatividade. Como algo não físico pode explicar algo que é fisicamente observável?

2 – Os dados fornecidos pela FMT são adimensionais. Por exemplo: número e tipo de átomos; carga molecular; polaridade; caráter iônico; geometria. Um exemplo é a polaridade de dois compostos. É possível dizer qual é mais polar observando a estrutura molecular. Outro exemplo é referente a estabilização de um composto através da ressonância. É possível dizer que um composto é mais estável apenas observando a quão

longa é a cadeia de ligações duplas e simples. Entretanto, esse mesmo comportamento pode ser explicado resolvendo a equação de Schrödinger para o modelo da partícula na caixa e concluindo que quanto maior a caixa, menor a energia do sistema⁵³.

Com relação à Teoria de Ligação de Valência (TLV) sob o ponto de vista da FMT, é de entendimento de professores e alunos que ela sempre apresentou desvantagens com relação a Teoria do Orbital Molecular (TOM). Contudo, ela foi aceita por muitos químicos e seu uso foi tão conveniente que a FMT incorporou a TLV. É possível destacar dois aspectos importantes da TLV⁵⁰:

1 – Novamente, não há uma justificativa física. A TLV é uma aproximação para conseguir explicar alguns fenômenos quânticos. O maior exemplo disso é a hibridização. Lamoureux e Ogilvie^{54,55} discutem os problemas causados pelo uso da hibridização como conteúdo no ensino de química orgânica. Entre as críticas, estão: a hibridização é apresentada aos estudantes como uma direta consequência da mecânica quântica, o que é falso, e a hibridização é um modelo falho e limitado por uma abordagem simples de trigonometria⁵⁵.

2 – Outro problema encontrado é nas denominações que perdem seu significado original. Por exemplo, na TLV, termos como "orbital atômico", "sobreposição", "hibridização orbital" ou "ressonância" são relacionados com a matemática. Contudo, na FMT esses mesmos termos possuem uma realidade física⁵⁰. Um exemplo é o orbital atômico que alguns estudantes descrevem como uma região física ou entendem que orbital e camada são sinônimos⁵⁶.

O principal erro surge no fato que os termos quânticos foram dotados de significados clássicos. Conforme novos dados e observações químicas surgem, a FMT é atualizada de forma que permaneça funcionando. Nesse sentido, são adicionadas novas regras ou até exceções às regras. Um exemplo é a inserção de conceitos quânticos na FMT, como o orbital, mas com o sentido clássico, ou seja, orbital como órbitas ao redor do núcleo, sem associação com o conceito de quantização como descrito por Bohr nos primórdios da mecânica quântica. Dessa forma a FMT é mantida e perpetuada⁵⁰. Didiş *et al.*⁵⁷ realizaram uma pesquisa que teve o objetivo de examinar os modelos mentais de estudantes universitários de física sobre a quantização de observáveis físicas. Os resultados mostram que o modelo científico e os modelos não científicos foram usados por 29 e 40 estudantes, respectivamente. Portanto, a quantidade maior de estudantes que

usaram modelos não científicos indica a dificuldade que os alunos têm com conceitos quânticos⁵⁷.

A química é vista como uma disciplina não matemática. Isso tem como consequência o distanciamento da mecânica quântica da química devido à falta de aparato matemático que a formação dos químicos fornece⁴⁵, permitindo o estabelecimento da FMT. Gómez e Martín⁵⁰ relatam que a mecânica quântica fornece resultados de natureza diferente quando comparada com a FMT.

Algo importante de salientar é que hoje quem está sendo formado em química nas universidades através da FMT pode se tornar um professor no futuro e, assim, ensinar outras pessoas que pensarão de forma semelhante, isto é, usando a FMT⁵⁰. A relação entre a FMT e a mecânica quântica é um obstáculo para o ensino de disciplinas envolvendo a química quântica. A FMT não funciona como uma base conceitual abordada em uma disciplina introdutória de química quântica, e uma forma de combater a relação entre a química quântica e a FMT é através do ensino da história da ciência. Com isso, os alunos podem ter noção de como aconteceram os processos de desenvolvimento de teorias e modelos ao longo dos anos, percebendo a importância das teorias mais atuais quando comparadas às anteriores. Uma possível solução é a inserção de uma disciplina que aborde a história da ciência.

3.2. Aprendizagem Significativa

A busca para explicar como ocorrem os processos de ensino e aprendizagem é manifestada por teorias de aprendizagem. Segundo Moreira⁵⁸, é possível distinguir três tipos de aprendizagem: afetiva, psicomotora e cognitiva. A afetiva está relacionada aos sentimentos, por exemplo: é fácil lembrar de algo que despertou algum sentimento. A psicomotora está relacionada com memória muscular, como andar de bicicleta. Por fim, a cognitiva “é aquela que resulta do armazenamento organizado de informações na mente do ser que aprende”⁵⁸. Os conhecimentos aprendidos e informações retidas por uma pessoa é denominada de estrutura cognitiva⁵⁸. Aqui é possível identificar a situação de estudar tradicionalmente, em que o indivíduo tenta relacionar conteúdos já aprendidos com os novos, organizando-os na mente. Na teoria de aprendizagem significativa de Ausubel o foco está na aprendizagem cognitiva⁵⁸.

De acordo com Ausubel⁵⁹, a aprendizagem significativa ocorre quando um novo material ou conhecimento é relacionado com alguma ideia relevante já existente na estrutura cognitiva do estudante. Essa estrutura é chamada de subsunçor e, após a

interação, ela será modificada. O novo conhecimento adquirido faz parte da estrutura cognitiva e servirá como um subsunçor para novas informações⁵⁸.

Para ocorrer a aprendizagem significativa é necessário a presença de dois elementos⁵⁹:

- O estudante precisa querer aprender o novo conhecimento de forma significativa. A relação entre o novo conhecimento e o subsunçor existente no estudante ocorre de forma organizada. Nesse sentido, se a intenção do estudante é apenas memorizar um determinado conteúdo de forma não organizada, então a aprendizagem significativa estará comprometida;
- O material que o estudante pretende aprender deve ser potencialmente significativo para ele, isto é, o material deve ser algo relacionável com a estrutura cognitiva do aluno. Se o material não for potencialmente significativo, a aprendizagem significativa também estará comprometida.

Em resumo, para ocorrer a aprendizagem significativa devem existir conceitos claros já entendidos na mente do estudante e que podem receber atualizações. Esses conceitos estão na estrutura cognitiva do estudante. Essa estrutura vai funcionar como um ponto de ancoragem para o novo material. Por fim, o novo material irá modificar a estrutura cognitiva do estudante. Para ilustrar, é possível pensar no processo de aprendizagem significativa para o conceito de partícula-onda: inicialmente o conceito de elétron é trabalhado como apenas partícula (no ensino médio, quando os estudantes aprendem os modelos clássicos). Entretanto, com a mecânica quântica, uma nova ideia surge: o elétron como onda. O subsunçor no caso é o elétron que já foi compreendido pelo aluno e o conceito de partícula-onda é o novo conhecimento. Quando ocorre a ancoragem do novo conhecimento com o subsunçor, este será modificado e incluirá a ideia de partícula-onda para o elétron. É possível afirmar que quanto mais ocorrer a aprendizagem significativa, mais os subsunçores serão desenvolvidos⁶⁰.

A aprendizagem significativa pode ocorrer de duas formas mais gerais⁵⁸:

- Aprendizagem por recepção: a informação é transmitida de forma completa para o estudante, em outras palavras, o estudante recebe a informação. Se essa informação se ligar a um subsunçor, então a aprendizagem significativa ocorre. Esse tipo de aprendizagem significativa é a que pode ocorrer em uma aula tradicional;
- Aprendizagem por descoberta: o estudante deve conseguir chegar sozinho na informação (ocorre a descoberta). De forma semelhante à aprendizagem por recepção, a

aprendizagem significativa só acontece se, após a descoberta, a informação ancorar-se a um subsunçor. Um exemplo é em aulas usando um método investigativo.

O contrário da aprendizagem significativa para Ausubel é a aprendizagem mecânica. A relação entre o novo conhecimento e a estrutura cognitiva é arbitrária, aleatória. O resultado é a armazenagem da informação por um tempo determinado⁵⁹. Um exemplo é a memorização de equações ou a memorização de diagramas, como ocorre durante o ensino médio para o diagrama (ou triângulo) de Pauling. Além disso, Ausubel⁵⁹ comenta que a aprendizagem mecânica é passiva enquanto que a aprendizagem significativa é ativa, pois o novo conhecimento deve se relacionar com a estrutura cognitiva. A relação entre a aprendizagem mecânica e significativa não é binária, existe um espectro entre a mecânica e a significativa⁵⁸.

Moreira⁵⁸ comenta que caso o estudante não tenha um subsunçor para que o novo conhecimento se relacione, é possível usar a aprendizagem mecânica para um conteúdo totalmente novo até que algumas informações relevantes surjam na estrutura cognitiva do estudante. Essas informações podem servir como subsunçores e, dessa forma, permitirem a aprendizagem significativa. Quando isso ocorrer, os subsunçores iniciais serão modificados e permitirão ancorar novos conhecimentos. Por outro lado, é possível usar organizadores prévios para um conhecimento novo. Esses organizadores servirão como uma base para ancorar o novo conhecimento e permitir o desenvolvimento de subsunçores⁶⁰. Os organizadores prévios podem ser um conteúdo essencial para o tema que será aprendido. Por exemplo, para fazer a ponte entre a química clássica (elétron como partícula) e a química quântica (elétron como partícula-onda) é necessário que o estudante tenha familiaridade com alguns conceitos como: onda, probabilidade e a apresentação de experimentos em que são evidenciadas as falhas de modelos clássicos.

Para os professores que pretendem ensinar usando a aprendizagem significativa, é importante destacar algumas ações⁵⁸:

- Reconhecer no material a ser ensinado os subsunçores que o aluno deve ter para que ocorra a aprendizagem significativa;
- Verificar o que os estudantes já sabem e compreender quais subsunçores eles já têm;
- Ensinar os estudantes usando um material adequado de forma que o aluno consiga organizar, na sua estrutura cognitiva, o novo conhecimento ensinado.

A aprendizagem significativa não significa que algo aprendido não será esquecido, contudo ele estará presente em um subsunçor e, desta forma, poderá ser reaprendido facilmente⁵⁸. Por fim, o que foi apresentado anteriormente nos trabalhos de

Johnstone é relacionável à aprendizagem significativa. Iniciar o ensino de conteúdos químicos a partir do nível macro é iniciar algo que faça sentido para o aluno, que o aluno já tenha um conhecimento prévio, isto é, que o estudante tenha subsunçores adequados para ancorar novos conhecimentos¹³.

3.3. Metodologias Ativas

Existem diferentes métodos para o ensino, entre eles estão as metodologias ativas que têm como foco o protagonismo do estudante através de sua participação e reflexão durante o desenvolvimento das aulas⁶¹. Como comparação, o método de ensino predominante é o tradicional, em que o papel do estudante é de apenas receber as informações de professores que são os detentores do conhecimento. Esse tipo de método, além de ser passivo, pode causar um desgaste nos estudantes, culminando no abandono ou desistências em cursos superiores⁶².

As metodologias ativas apresentam vantagens quando comparadas aos métodos tradicionais. Conforme Freeman *et al.*⁶³, as melhoras aparecem nas médias de exames, na frequência de reprovação e também com relação ao aumento de conceitos compreendidos pelos estudantes. Ainda de acordo com os autores, a aprendizagem com metodologias ativas é empiricamente validada.

Partanen^{64,65} mostrou em dois trabalhos que as metodologias ativas podem ser aplicadas também fora de aula, obtendo melhorias significativas quando comparadas aos métodos ativos aplicados exclusivamente em sala de aula. O trabalho foi usado em aulas envolvendo a química quântica através de exercícios ao longo das semanas, incentivando os estudantes a acompanharem as aulas constantemente e receberem *feedback* dos professores.

3.3.1. Think-pair-share

O método *think-pair-share* é um tipo de metodologia ativa baseada na colaboração entre os estudantes⁶⁶. Ele funciona da seguinte maneira⁶⁷: depois da conclusão de um determinado conteúdo, o professor propõe uma questão conceitual para que os alunos respondam individualmente, mas apenas pensando (*think*). Após um período de tempo, os estudantes discutem em duplas suas respostas (*pair*). Por fim, cada dupla deve compartilhar sua resposta com a turma (*share*). Através dessa metodologia o professor consegue perceber os equívocos conceituais e abordá-los posteriormente.

Com relação as vantagens dessa metodologia, é possível destacar que ela é ativa, portanto, o estudante deixa de ser uma peça passiva no processo de aprendizagem e torna-se o protagonista, apresenta um ganho na aprendizagem, quando comparada com a aula tradicional, e também desenvolve a interação e discussão entre os estudantes, criando um ambiente mais agradável e propenso à participação dos alunos^{68,66}.

3.3.2. *Peer Instruction*

Desenvolvida por Eric Mazur, a *peer instruction* (em português, aprendizagem por pares) tem como base também a interação entre os estudantes. As aulas são elaboradas de forma que os conteúdos sejam abordados em pequenos blocos. No fim de cada bloco, ocorre um teste de conceitos na forma de perguntas conceituais sobre o tema ensinado no bloco. O teste contém questões objetivas, ou seja, são perguntas com diferentes alternativas de respostas. Inicialmente os estudantes respondem individualmente e, após um determinado tempo, eles discutem em duplas para responderem novamente. No fim, o professor fornece um *feedback*, explicando a resposta correta. Se a turma apresentar um desempenho excelente, a aula vai para o próximo bloco com um novo tópico, contudo, caso o desempenho não seja bom, o professor pode intervir, explicar novamente o tema e repetir o teste com outra questão⁶⁹.

As vantagens dessa metodologia são⁷⁰:

- Ela é ativa, logo, o aluno não participa da aula passivamente;
- Diminuição na evasão de estudantes;
- Apresenta um ganho na aprendizagem dos estudantes, quando comparada aos métodos tradicionais de ensino, não apenas para conceitos, mas também para questões quantitativas;
- Aumento na capacidade de usar um conhecimento aprendido anteriormente para resolver um problema novo;
- Melhora na relação entre professores e estudantes;
- Melhora na comunicação entre estudantes.

Quanto ao ensino de mecânica quântica, o uso da metodologia *peer instruction* pode melhorar o desempenho dos estudantes, não apenas durante o semestre de uso da metodologia, mas também após esse semestre, indicando uma boa retenção dos conceitos estudados com a metodologia⁷¹.

4. Metodologia

Este trabalho aplicou metodologia qualitativa que, segundo Flick⁷², apresenta uma coleta de dados abrangente com questões abertas, possibilitando respostas espontâneas dos participantes. Ainda segundo o pesquisador, o objetivo desse tipo de metodologia é “apresentar uma descrição ou avaliação detalhada de algumas práticas continuadas”. O trabalho está dividido em duas partes. A primeira parte aborda o entendimento que estudantes universitários têm sobre conceitos de química quântica. A segunda parte é um relato da intervenção com o uso de duas metodologias ativas em uma turma de química quântica.

4.1. Parte 1 – Panorama das concepções dos estudantes

Em um primeiro momento foram revisadas todas as ementas e planos de ensino das disciplinas dos cursos de Bacharelado em Química, Licenciatura em Química e Química Industrial do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), para que fossem selecionadas aquelas disciplinas que trabalhem com conceitos relacionados à química quântica ou que tenham esses conceitos como pré-requisitos. Assim, todos os materiais da pesquisa construídos são, primariamente, direcionados para as turmas das disciplinas: Química Quântica, Química Inorgânica I (duas turmas) e Química Inorgânica III. As três disciplinas são cursadas por estudantes dos cursos de Bacharelado em Química Industrial, Bacharelado em Química e Licenciatura em Química. A disciplina Química Quântica tem caráter eletivo para os alunos matriculados no curso de Licenciatura em Química.

A pesquisa, teve o levantamento de dados realizado por meio de dois questionários, validados por professores do Grupo de Pesquisa em Ensino de Química do Instituto de Química da UFRGS. Para cada etapa, foi usado um questionário contendo questões conceituais de química quântica. Utilizou-se questionários com a finalidade de comparar as respostas dos participantes da pesquisa⁷². As perguntas foram analisadas e classificadas como dados qualificáveis do tipo nominais, isto é, que não podem ser classificados numericamente e sim colocadas em conjuntos⁷³. Escolheu-se duas categorias conforme a habilidade exigida dos estudantes: visual e textual. Conforme o trabalho de Dangur *et al.*⁴⁸, uma abordagem que integra a compreensão conceitual e visual ajuda no entendimento da mecânica quântica pelos estudantes. Dessa forma, optou-se por

investigar esses dois aspectos. As questões dos questionários foram divididas em duas categorias:

- Categoria Representação (CR): questões que exigem a compreensão dos estudantes sobre a química quântica baseada em representações, ilustrações e modelos. Nessa categoria, é possível comparar a relação dos conceitos quânticos com o que os estudantes imaginam e visualizam daquele conceito;
- Categoria Quântica (CQ): questões envolvendo os conceitos da química quântica segundo uma visão mais matemática. É importante avaliar se os conceitos quânticos estão sendo interpretados erroneamente sob a ótica da química clássica.

As respostas constituem dados quantificáveis do tipo intervalares, em outras palavras, dados possíveis de serem distribuídos em uma escala de intervalos iguais⁷³. Cada resposta foi analisada e classificada em quatro níveis de entendimento químico sobre a questão⁷⁴. A classificação genérica para cada nível é⁴⁸:

- 1 – Nenhuma resposta; resposta errada; resposta sem relação com a pergunta;
- 2 – Resposta muito curta; resposta parcialmente errada; resposta parcialmente correta, mas sem considerar aspectos quânticos;
- 3 – Resposta correta, mas considerando parcialmente aspectos quânticos;
- 4 – Resposta correta.

Uma terceira etapa foi necessária para organizar e analisar os dados obtidos através dos questionários.

4.1.1. Etapa 1 – Aplicação do Questionário 1

A primeira etapa serviu como uma caracterização do grupo de estudantes das três disciplinas e deveria ser feita para avaliar seus conhecimentos prévios. Para tal, um questionário (Questionário 1 – Q1) foi proposto utilizando as referências Allred e Bretz⁷⁵, Dangur *et al.*⁴⁸ e Kalkanis *et al.*⁷⁶, das quais adaptaram-se algumas das questões para a realidade dos estudantes da UFRGS. A versão final do Q1 encontra-se disponível nos Anexos.

O Q1 foi aplicado no início do semestre letivo de 2019/2, entre a primeira e segunda semana de setembro, compreendendo a terceira e quarta semana do semestre. Para aplicar esse questionário, foram procurados os professores das disciplinas para que pudessem, se possível, ceder alguns minutos de suas aulas para que os estudantes matriculados respondessem às questões propostas. O preenchimento do questionário durou em média 20 minutos. Os discentes receberam uma cópia do Q1 e foram instruídos

a escrever suas respostas preferencialmente à caneta para melhor avaliação dos resultados obtidos. Todos os estudantes que responderam o Q1, aceitaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. As perguntas do Q1 podem ser classificadas de duas maneiras: questões abertas, em que os estudantes devem fornecer suas respostas⁷⁷, com a finalidade de registrar respostas individuais com grande riqueza de detalhes⁷³; e questões fechadas, que permitem assistir os estudantes fornecendo diferentes alternativas de respostas⁷³.

Para cada questão foi atribuído um valor de 1 até 4 conforme o desempenho dos estudantes, sendo o mínimo 1 e o máximo 4. As figuras do Q1 não foram apresentadas com legendas para os estudantes participantes. Abaixo são apresentadas cada questão, a intenção daquela pergunta e o que era esperado para cada valor.

1 – O que você entende pelas propriedades de partícula e onda de prótons, nêutrons e elétrons?

Intenção: compreender o que os estudantes entendem do conceito partícula-onda e verificar se esse conceito não é restrito aos elétrons.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder; Descrição clássica como: elétron é negativo.
2	Responder que tem comportamento de partícula e onda sem discutir ou basear a resposta no enunciado da pergunta.
3	Discutir parcialmente que tem comportamento de partícula e onda.
4	Discutir como as partículas podem ser descritas como partícula e onda.

2 – A sentença a seguir refere-se às questões a-d: "Livros-texto de Química muitas vezes oferecem múltiplas representações do átomo."

a) Qual representação de átomo vem primeiro a sua mente?

Intenção: determinar como os estudantes imaginam um átomo em uma mesma turma e em turmas de grau de instrução diferentes.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder;

	Descrever o átomo como uma esfera sólida ou uma esfera com carga positiva com elétrons incrustados.
2	Afirmar que o átomo possui um núcleo e elétrons ao redor sem considerar camadas ou níveis e subníveis.
3	Apresentar o átomo com um núcleo e elétrons ao redor em níveis e subníveis.
4	Responder que o átomo possui um núcleo muito pequeno e os elétrons como uma nuvem ou densidade eletrônica.

b) Que outras representações do átomo você conhece?

Intenção: identificar se o estudante conhece outras representações para o átomo, principalmente representações mais complexas do que aquela escolhida na questão anterior.

O estudante que não respondeu ou deixou em branco, recebeu o valor 1. O estudante que obteve 1, 2 ou 3 para a pergunta **2a** e respondeu, para **2b**, com pelo menos uma representação de igual ou superior complexidade, recebeu o valor conforme a definição da pergunta **2a**. Por exemplo, se em **2a** o aluno descreveu um átomo como uma esfera maciça, receberá 1 para **2a**, e se respondeu em **2b**:

- O átomo como uma esfera com carga positiva e com elétrons incrustados, receberá 1 para **2b**;
- O átomo com um núcleo pequeno e uma nuvem eletrônica ao redor, receberá 4 para **2b**.

Caso responda, para **2b**, com uma representação inferior em complexidade, obtém o mesmo valor de **2a**. O estudante que recebeu o valor 4 para **2a** e descrever qualquer outra representação, recebeu o valor 4.

c) Qual dessas representações você diria estar correta?

Intenção: verificar se os estudantes entendem que existem representações mais complexas e que melhor explicam as propriedades dos átomos mesmo que eles imaginem o átomo como algo mais simples.

Usou-se as mesmas definições empregadas na questão **2a**.

d) Ao responder à questão c), o que você entende por correto?

Intenção: discutir o conceito de correto e como representações classificadas como corretas podem ser consideradas incorretas com o passar dos anos.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Afirmar que é o mais usado ou avançado.
3	Responder que é o mais possível ou o mais complexo.
4	Responder que é algo provado experimentalmente; aceito por convenção; mais próximo da realidade.

3 – O que você entende por orbital?

Intenção: entender o que os estudantes compreendem do conceito orbital. Essa pergunta é fundamental, visto que o termo “orbital” é muito usado durante as aulas e muitas vezes não é despendido o tempo necessário para discutir o seu significado.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder; Afirmar que é o próprio elétron.
2	Responder que é o local físico onde o elétron está localizado.
3	Descrever uma região do espaço com maior possibilidade de encontrar elétrons.
4	Discutir que é uma região do espaço onde exista maior probabilidade de encontrar elétrons. O estudante deve transmitir a ideia matemática de probabilidade; Relacionar com uma função de onda espacial para um ou dois elétrons.

4 – O que você entende pelo princípio da incerteza de Heisenberg?

Intenção: verificar o que os estudantes entendem do conceito.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Responder apenas sobre posição.
3	Considerar posição e velocidade ou energia.
4	Relacionar momento e posição.

5 – De acordo com as suas respostas às questões 3 e 4, haveria uma conexão entre a definição de orbital e o princípio da incerteza de Heisenberg?

Intenção: discutir a relação entre os dois conceitos. Quando a energia (ou momento) do elétron em um orbital é definida por um autovalor de energia, há incerteza na determinação da posição do elétron, visto que o próprio orbital representa uma distribuição espacial.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder ou responder “não”.
2	Responder apenas “sim”.
3	Afirmar que sim e relacionar apenas a posição ou apenas energia/momento.
4	Afirmar que sim e discutir a impossibilidade de determinar a posição exata do elétron em um orbital, sendo que esse orbital tem uma energia quantizada.

6 – A respeito da interpretação do diagrama de níveis de energia para o átomo de hidrogênio (**Figura 2**), representado abaixo, responda à questão:

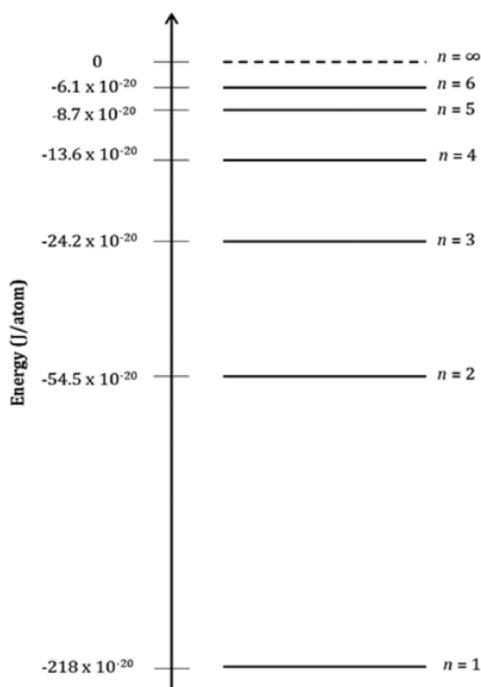


Figura 2. Diagrama de energia para o átomo de hidrogênio⁷⁵

Qual destas afirmações melhor explica porque o valor da energia nesta figura é muito negativo quando $n = 1$?

- () O elétron tem carga negativa.
- () O elétron é atraído pelo núcleo.
- () A energia do elétron está em seu mínimo.
- () Energia é liberada durante o processo exotérmico.

Intenção: avaliar se os estudantes conseguem compreender as informações de um diagrama de energia. Cada alternativa apresenta alguma afirmação que justifique o valor negativo para a energia, contudo apenas uma está correta.

Os estudantes que deixaram em branco, receberam 1. Os estudantes que marcaram “o elétron têm carga negativa” e “energia é liberada durante o processo exotérmico”, receberam o valor 1. Os estudantes que escolheram “o elétron são atraídos pelo núcleo”, receberam o valor 2. Os estudantes que responderam corretamente escolhendo a alternativa “a energia do elétron está em seu mínimo”, receberam 4.

7 – A figura abaixo (**Figura 3**) mostra quatro representações para o átomo de hélio. Use-a para responder às questões a) e b) a seguir.

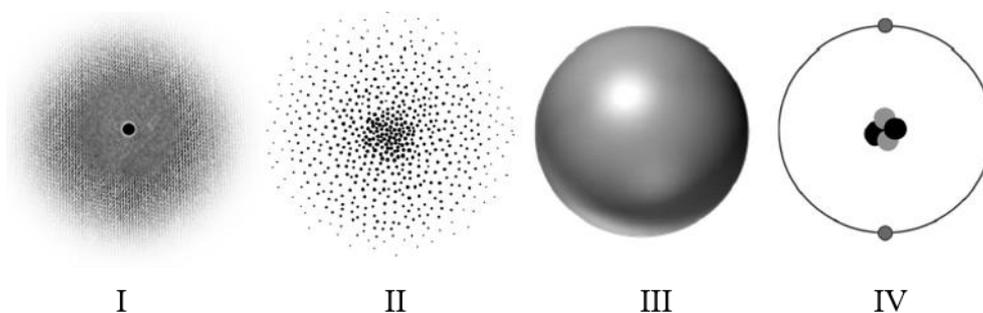


Figura 3. Diferentes representações para o átomo de hélio²¹

a) Qual representação na figura você imagina em sua mente quando pensa no átomo de hélio?

Intenção: compreender como os estudantes imaginam um átomo a partir de modelos estudados por eles.

Os participantes que deixaram em branco, receberam o valor 1. Os estudantes que escolheram I ou II, receberam 4. Para quem marcou III, recebeu o valor 1 e quem respondeu a alternativa IV, ficou com o valor 3.

b) Qual representação na figura é o modelo mais apurado para o átomo de hélio?

Intenção: comparar se o modelo que eles imaginam é o mesmo do que eles entendem por mais correto.

Foi adotado o mesmo critério da pergunta **7a**.

8 – A figura abaixo (**Figura 4**) representa um modelo bidimensional de orbitais moleculares. As ilustrações A e B representam os orbitais de uma molécula diatômica. Cada ilustração se refere a um orbital molecular diferente. Explique a ilustração da figura respondendo às questões a-c a seguir:

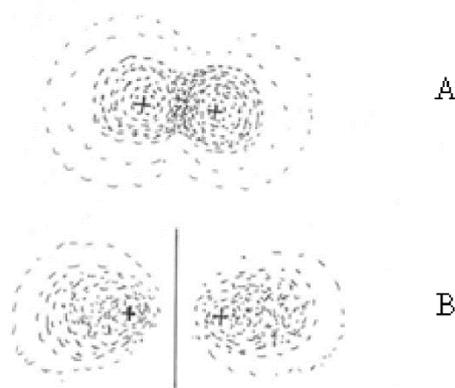


Figura 4. Modelo bidimensional de orbitais moleculares⁴⁸

a) O que os símbolos "+" representam?

Intenção: verificar o que os estudantes compreendem a partir de uma figura.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Afirmar que são cargas.
3	Responder que são regiões do átomo com cargas positivas.
4	Responder que representam núcleos ou prótons.

b) Qual o significado da linha vertical na ilustração B?

Intenção: avaliar se os estudantes compreendem que a linha vertical é apenas algo que representa probabilidade nula.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Relacionar com orbital antiligante.
3	Responder algo intermediário entre os valores 2 e 3.
4	Responder que é um local com densidade eletrônica nula.

c) O que os pontos nas ilustrações representam?

Intenção: verificar se os estudantes compreendem que os pontos representam probabilidade, densidade ou nuvem eletrônica. Novamente, os estudantes são indagados sobre a localização do elétron.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Afirmar que são elétrons, camadas ou níveis de energia.
3	Responder que representam orbitais.
4	Responder que representam a nuvem eletrônica, densidade eletrônica.

Para as definições, “não responder” refere-se ao ato do estudante responder algo não relacionado ao que foi perguntado.

As questões do Q1 são distribuídas da seguinte maneira nas duas categorias mencionadas anteriormente, sendo “R” a categoria Representação e “Q” a categoria Quântica:

Questão	1	2a	2b	2c	2d	3	4	5	6	7a	7b	8a	8b	8c
Categoria	Q	R	R	R	R	Q	Q	Q	Q	R	R	Q	Q	Q

4.1.2. Etapa 2 – Aplicação do Questionário 2

A segunda etapa também foi realizada com a aplicação de um questionário, o Questionário 2 (Q2). A versão final do Q2 encontra-se disponível nos Anexos. Dessa vez, procurava-se avaliar como os estudantes desenvolveram os conceitos trabalhados desde

o início do semestre e se ocorreu aprendizagem significativa dos conceitos abordados nos questionários.

O questionário foi aplicado entre o final de novembro e metade de dezembro ainda do semestre 2019/2, período que compreendeu as duas últimas semanas de aulas, desconsiderando as semanas de avaliações e exames. Dessa vez, o tempo hábil para aplicação do questionário diminuiu, visto que as provas finais das disciplinas estudadas começaram a acontecer. Por conta disso, a turma de Química Inorgânica III não pôde responder às questões. Todos os estudantes que responderam o Q2 aceitaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. Novamente, foi sugerido que o questionário fosse preenchido à caneta, principalmente porque em duas questões os discentes deveriam recorrer à recursos gráficos para completar a resposta. Cada aluno recebeu as folhas das perguntas separadamente, isto é, pergunta **1** em uma folha, pergunta **2** em outra (essas duas que necessitavam de mais espaço para resposta por causa da instrução de representar a resposta graficamente) e perguntas **3**, **4** e **5** em uma terceira folha. Escolheu-se essa forma para organizar as questões para que uma pergunta não interferisse em outra. Dessa forma os estudantes não poderiam corrigir algo que lembraram devido às perguntas subsequentes. Todas as questões do Q2 são do tipo aberta⁷⁷.

Para cada questão foi atribuído um valor de 1 até 4 conforme o desempenho dos estudantes, sendo o mínimo 1 e o máximo 4. A figura do Q2 não foi apresentada com legenda para os estudantes participantes. Abaixo é apresentado cada questão e o que era esperado para cada valor:

1 – Faça uma ilustração de como você imagina um átomo neutro de lítio (número atômico 3). Comente e/ou identifique na ilustração partes que considerar relevante:

Intenção: avaliar como os estudantes imaginam o átomo. Escolheu-se o lítio por apresentar dois elétrons em *1s* e o terceiro elétron em *2s*. A ideia foi conduzir os estudantes a pensarem na distribuição eletrônica.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder; Desenhar apenas uma esfera sólida ou uma esfera positiva com os elétrons incrustados.
2	Fazer uma ilustração do átomo com o núcleo e os elétrons ao redor, porém não considerar diferentes níveis e subníveis.

3	Construir o átomo com o núcleo e os elétrons em níveis e subníveis.
4	Representar o átomo como uma nuvem ou densidade eletrônica, logo, com a deslocalização dos elétrons.

2 – Represente, em termos de energia, a ilustração feita na questão 1:

Intenção: como a energia é uma característica importante, buscou-se avaliar se os estudantes relacionam o átomo com um diagrama de energia.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Desenhar um diagrama de orbital molecular.
3	Ilustração de um diagrama genérico, com algumas informações pertencentes aos orbitais moleculares e algumas aos níveis de energia.
4	Fazer uma ilustração de um diagrama de energia contendo dois patamares.

3 – Observe a **Figura 5**:

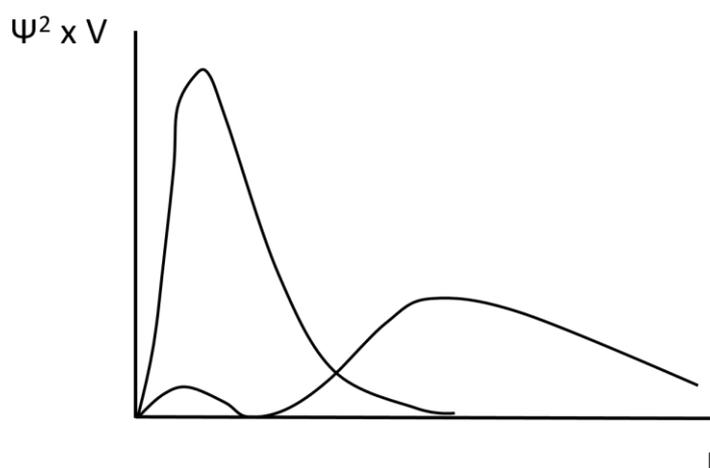


Figura 5. Gráfico do quadrado das funções de onda multiplicados pelo volume da região⁵²

a) O que a figura acima representa?

Intenção: verificar se os estudantes conseguem interpretar o gráfico. A figura foi retirada de um dos principais livros de química inorgânica⁵² usado pelos professores de Química Inorgânica I da UFRGS.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder; Interpretar o gráfico como energia.
2	Responder que a figura representa uma função de onda de forma simples; Relacionar com camada ou níveis de energia.
3	Identificar os orbitais, mas relacionar o gráfico com função de onda de forma muito simples.
4	Descrever como orbitais ou algo relacionado com probabilidade.

b) A figura pode ser relacionada com as ilustrações feitas nas questões 1 e 2? Explique.

Intenção: analisar se os estudantes conseguem relacionar as duas curvas da figura com os dois orbitais desenhados nas questões 1 e 2.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder; Responder apenas “sim” ou “não”.
2	Responder sim, mas repetir a resposta da pergunta 2b.
3	Responder sim, mas relacionar parcialmente com os desenhos das questões 1 e 2.
4	Afirmar que representa os orbitais e níveis de energia, mesmo não tendo feito os orbitais e níveis de energia nas questões 1 e 2, respectivamente.

4 – O que você entende por função de onda?

Intenção: verificar o que os estudantes entendem por função de onda. Assim como orbital, função de onda é um termo muito usado nas aulas de química e perceber como os estudantes compreendem esse conceito é importante.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder; Relacionar com ondas da mecânica clássica ou energia.
2	Afirmar que é um elétron.
3	Relacionar com alguma propriedade de partícula-onda.
4	Afirmar que é a descrição completa de um estado na mecânica quântica.

5 – Se for possível, relacione a ilustração feita na questão 1 com alguma característica macroscópica.

Intenção: investigar se o átomo que os estudantes imaginam consegue explicar algo do mundo macroscópico.

Valor	Definição
1	Resposta em branco; Não responder.
2	Citar uma característica microscópica ou um modelo, por exemplo, ligação química.
3	Citar uma característica macroscópica, mas sem explicar a relação com a ilustração.
4	Descrever os recursos na ilustração que causam ou afetam uma propriedade macroscópica.

Para as definições, “não responder” refere-se ao ato do estudante responder algo não relacionado ao que foi perguntado.

As questões do Q2 são distribuídas da seguinte maneira nas duas categorias, sendo “R” a categoria Representação e “Q” a categoria Quântica:

Questão	1	2	3a	3b	4	5
Categoria	R	Q	Q	Q	Q	R

4.1.3. Etapa 3 – Análise de Conteúdo

Para descrever e interpretar as respostas dos estudantes⁷⁸, usou-se a análise de conteúdo seguindo a proposta de Bardin⁷⁹ para todas as questões abertas de ambos os questionários. A análise foi dividida em três etapas:

- Pré-análise: inicialmente foram separados os materiais para análise. A primeira separação foi entre os questionários 1 e 2. Cada questionário era composto de várias questões separadas em duas categorias: Quântica e Representação. Selecionou-se uma pergunta e analisou-se todas as respostas de cada turma. Dessa forma, foi possível identificar algumas tendências. Foram criadas categorias que continham determinadas respostas;
- Exploração do material: realizou-se a análise propriamente dita, ou seja, a verificação das interpretações de cada estudante de cada turma para uma determinada pergunta, o agrupamento de interpretações similares e a contagem da frequência. O mesmo processo foi realizado para as demais turmas para a mesma pergunta. Posteriormente, foi feito o mesmo para todas as questões abertas. Por fim, também foram analisadas as respostas de cada pergunta considerando todos os estudantes;

– Tratamento dos resultados e interpretação: foram apresentados os resultados em porcentagem das respostas mais frequentes e as possíveis interpretações dos resultados, tanto para cada turma, como para todos os estudantes.

4.2. Parte 2 – Intervenção na disciplina Química Quântica

Durante a pandemia do coronavírus, a UFRGS optou pelo Ensino Remoto Emergencial (ERE). Nessa modalidade, os estudantes teriam as aulas normais, mas adaptadas de forma *online* para contribuir com o distanciamento social. As atividades presenciais do semestre 2020/1 foram interrompidas em março de 2020 após apenas duas semanas e meia de aula, e as atividades de ensino, retomadas de maneira remota em 19 de agosto de 2020. No caso da disciplina de Química Quântica, as aulas foram propostas com o uso de estudos dirigidos. As aulas ocorreram duas vezes em cada semana e, para cada aula, o professor responsável enviou um material com os tópicos que os estudantes deveriam estudar com base no polígrafo da disciplina (esse material foi criado pelo professor da disciplina e já era utilizado antes da pandemia como a bibliografia básica essencial das aulas).

Como os estudantes não teriam nenhum contato com o conteúdo da disciplina de forma síncrona durante o semestre 2020/1, foi proposta a intervenção do autor com a finalidade de conduzir algumas aulas síncronas abordando conceitos da química quântica. A justificativa para essa intervenção foi a pesquisa realizada na etapa 1 deste trabalho com os estudantes do curso de química sobre conceitos da química quântica, em que foram constatados grandes equívocos dos estudantes com relação às ideias e conceitos quânticos.

Antes de ocorrer o ERE, a disciplina Química Quântica foi ministrada durante duas semanas e meia de forma presencial. O número de alunos matriculados nessa modalidade era de 20. Com o aumento do número de casos de COVID-19 e a declaração de pandemia, ocorreu a pausa nas atividades da UFRGS até a decisão de retomar as aulas na forma de ERE. Com o retorno, foi aberta novamente a oportunidade para a matrícula de estudantes. Ao final desse período, a disciplina de Química Quântica contava com 31 estudantes.

4.2.1. Etapa 1 – Descrição dos estudantes

Antes de iniciar as atividades na turma, foi realizado um levantamento de dados para conhecer os estudantes com a finalidade de elaborar aulas adequadas a sua realidade

e dificuldades⁷¹. Foi enviada uma mensagem para os alunos, através da plataforma *Moodle*, explicando a proposta de aulas usando metodologias ativas para discutir problemas e questões conceituais da química quântica baseado nas aulas e polígrafo do professor titular.

4.2.2. Etapa 2 – Aulas ministradas

Essa etapa foi dedicada às aulas. Antes de iniciar as aulas e, para avaliar as dúvidas dos estudantes, foi criado um documento no *Google Forms* para que os estudantes possam apresentar suas dúvidas sobre as aulas de forma anônima.

Todas as aulas foram realizadas pela plataforma institucional virtual MConf. As gravações das aulas foram disponibilizadas na plataforma *Moodle* da disciplina. O número de acesso das gravações é baseado no número de pessoas *online* durante a aula e também de pessoas que acessaram após a disponibilização da gravação da aula. Nesse caso, do valor de acesso foi descontada uma visualização referente ao ministrante das aulas. Outra possibilidade de acessar as gravações é através do *download* do vídeo, nesse caso não existe dados de quantas pessoas seguiram esse caminho.

4.2.3. Etapa 3 – Feedback das aulas ministradas

Para esta etapa, foi aplicado um questionário. O objetivo foi avaliar a opinião dos estudantes a respeito das aulas extras de química quântica e compreender os motivos da baixa adesão por parte dos estudantes.

4.2.4. Etapa 4 – Análise das provas

Esta etapa discute as quatro avaliações que os estudantes realizaram durante o semestre. As provas foram elaboradas e corrigidas pelo professor titular da disciplina. Cada estudante recebeu uma prova diferente via *e-mail*. As provas essencialmente abordavam problemas matemáticos, e, por isso, dividiu-se a análise em duas categorias: Química e Matemática. A categoria Química se refere ao uso correto de equações e das variáveis fornecidas pelos problemas. Enquanto que na categoria Matemática, avaliou-se apenas as operações matemáticas.

5. Resultados e Discussão

Os resultados são apresentados em duas partes, de acordo com as etapas de pesquisa descritas na metodologia.

5.1. Parte 1 – Panorama das concepções dos estudantes

Com base na análise dos planos de ensino das disciplinas abordadas no presente trabalho, tem-se o resumo da **Tabela 1**:

Tabela 1. Resumo dos planos de ensino das disciplinas dos cursos de Química, etapa aconselhada, objetivos e tópicos relacionados à química quântica

Curso	Etapa aconselhada (semestre)	Objetivos	Conteúdos quânticos
Química Inorgânica I	Entre 1 e 2	Apresentar e analisar as teorias de ligação química para diferentes compostos e suas aplicações à química inorgânica; apresentar os fundamentos do estudo do estado sólido e mineralogia.	Modelo atômico atual; números quânticos; simetria de orbitais; energia de orbitais; Princípio de Exclusão de Pauli; Regra de Hund; distribuição eletrônica; Teoria de Ligação de Valência; Teoria do Orbital Molecular.
Química Inorgânica III	Entre 3 e 6	Apresentar a ligação química em compostos com metais de transição e organometálicos.	Teoria de Ligação de Valência; Teoria do Campo Cristalino; Teoria do Orbital Molecular.
Química Quântica	Entre 4 e 6	Introdução a mecânica quântica visando as particularidades de sistemas químicos.	A disciplina aborda em sua totalidade os conteúdos da química quântica.

As disciplinas Química Inorgânica I e Química Inorgânica III são obrigatórias para os três cursos, enquanto a disciplina Química Quântica é obrigatória para os estudantes de Bacharelado em Química e Bacharelado em Química Industrial, mas pode ser cursada pelo curso de Licenciatura em Química.

A apresentação e discussão dos resultados foram divididas em duas partes. Na primeira parte será mostrado os resultados considerando as turmas em uma abordagem quantitativa dos resultados. Na segunda parte, será considerada a análise de conteúdo das respostas dos estudantes.

5.1.1. Abordagem quantitativa

Para o Questionário 1:

Os indivíduos que responderam o Q1 estão distribuídos em quatro turmas: duas turmas de Química Inorgânica I, uma turma de Química Inorgânica III e uma turma de Química Quântica. Os seguintes códigos representam cada turma:

- QI1A: para uma das turmas de Química Inorgânica I;
- QI1B: para a segunda turma de Química Inorgânica I;
- QI3: para a turma de Química Inorgânica III;
- QQ: para a turma de Química Quântica.

Usou-se “A” e “B” para diferenciar as duas turmas de Química Inorgânica I.

O Q1 foi respondido por 75 estudantes, a **Tabela 2** abaixo mostra a distribuição de estudantes nos cursos e nas disciplinas:

Tabela 2. Distribuição dos estudantes nos cursos e disciplinas (Q1)

Curso/Turma	Bacharelado em Química	Química Industrial	Licenciatura em Química
QI1A	5	10	7
QI1B	15	5	0
QI3	11	8	1
QQ	7	4	0

Um dos estudantes de QI1B não informou o curso e um estudante de QQ é do curso de Engenharia de Materiais. Cerca da metade dos estudantes que responderam o Q1 são do curso Bacharelado em Química.

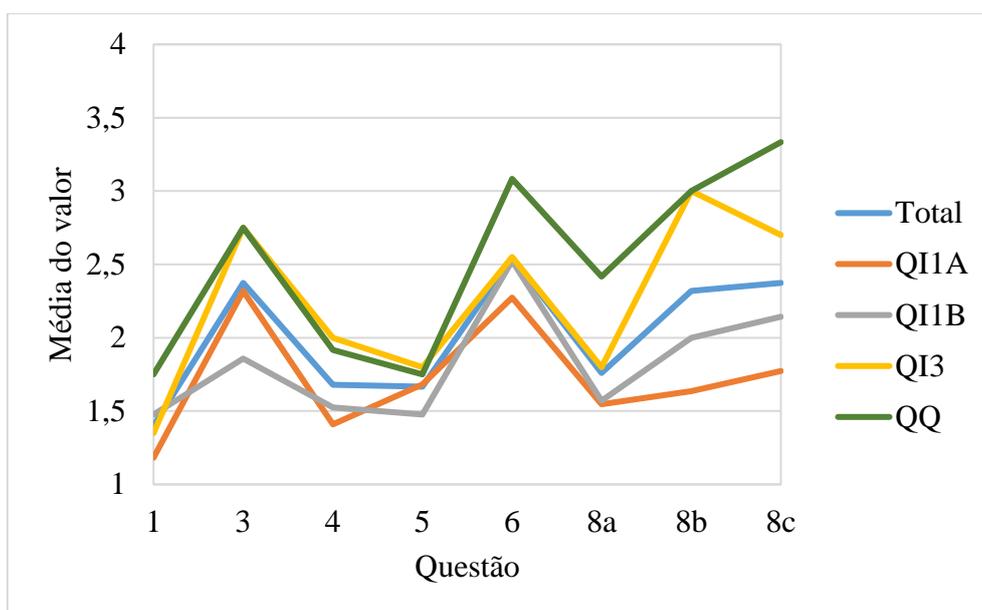
Categoria Quântica (CQ)

A média dos valores das respostas dos estudantes de cada turma para a CQ é apresentada na **Tabela 3** (os valores mínimo e máximo são 1 e 4, respectivamente). Conforme a tabela, é possível perceber que os estudantes tiveram um desempenho insatisfatório, visto que nenhuma das turmas recebeu uma média acima de 50% representado pelo valor 2,5. De maneira geral, houve um aumento nas médias obtidas pelos estudantes conforme avançam no curso.

Tabela 3. Média dos valores para cada turma para a CQ (Q1)

Turma	Média
QI1A	1,72
QI1B	1,82
QI3	2,24
QQ	2,50

O gráfico da **Figura 6** a seguir mostra o desempenho dos estudantes para cada questão.

**Figura 6.** Gráfico da média do valor para cada questão da CQ (Q1)

Como é possível perceber, as questões **3, 6, 8b** e **8c** apresentaram maiores índices de acertos, enquanto que as questões **1, 4, 5** e **8a** apresentaram os menores números de acertos. No geral, a questão **1** foi a que apresentou o pior desempenho, com uma média total de 1,40. A pergunta é: “O que você entende pelas propriedades de partícula e onda de prótons, nêutrons e elétrons?”. É interessante como uma questão que fala sobre conceitos básicos e iniciais da química quântica apresentou tanto problema.

A média total para todas as turmas para a CQ foi 2,06, lembrando que o valor correspondente à 50% é 2,5, portanto, a média total é inferior ao valor intermediário. Isso mostra que o desempenho dos estudantes com relação às questões envolvendo a química quântica está prejudicado de alguma forma. A maior nota obtida foi 3,38 (estudante de QQ), enquanto que a menor nota foi 1 (estudante de Química Inorgânica I). Note que a menor nota possível é 1.

O histograma da **Figura 7** abaixo mostra a frequência da soma dos valores para as questões da CQ, neste caso as notas mínima, intermediária e máxima são 8, 20 e 32, respectivamente.

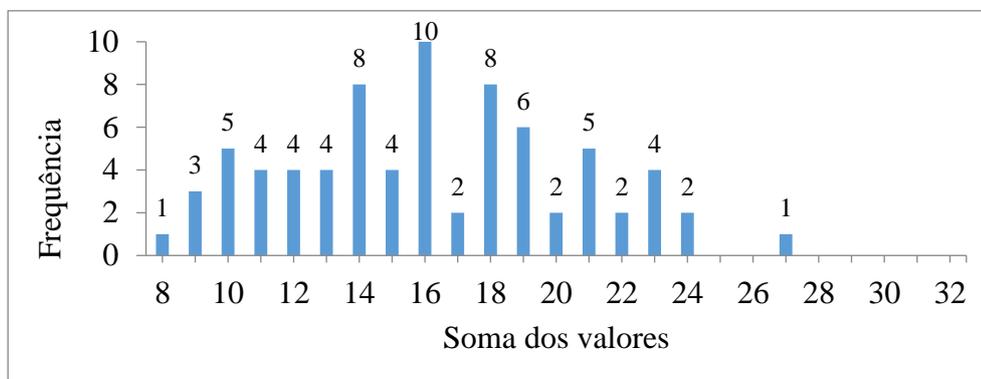


Figura 7. Histograma da soma dos valores para as questões da CQ (Q1)

Conforme o histograma, fica evidente o baixo desempenho dos estudantes, a grande parte deles não passou o valor 20. De acordo com a figura, 38,7% dos participantes obtiveram médias de acertos abaixo de 25%, enquanto 1,33%, acima de 75%. A grande maioria, 53,3%, obteve médias de acertos entre 25% e 50%.

Categoria Representação (CR)

A média das respostas dos estudantes de cada turma para a CR é apresentada na **Tabela 4** abaixo (os valores mínimo e máximo são 1 e 4, respectivamente).

Tabela 4. Média dos valores para cada turma para a CR (Q1)

Turma	Média
QI1A	2,72
QI1B	2,63
QI3	2,91
QQ	3,10

As turmas obtiveram médias maiores quando comparados com a CQ, indicando que os conceitos de química quântica são melhor compreendidos quando abordados de maneira representacional. Os resultados indicam que o processo de ensino de conceitos quânticos nessas disciplinas essencialmente emprega recursos representacionais. No entanto, mesmo que a aprendizagem de conceitos quânticos seja facilitada pelo uso de representações visuais, seu uso deve ser com inteligência para não desenvolver

concepções equivocadas⁸⁰, como as que ocorrem com o conceito de orbital em que alguns estudantes acreditam ser um local físico, possível de ser visualizado⁴¹. Como as médias de acertos de todas as turmas encontram-se em um intervalo entre 4,50 e 19,9% acima do valor intermediário de 2,5, percebe-se que a utilização de ferramentas representacionais no ensino de conceitos e interpretações quânticas foi deficiente e até falho nas turmas estudadas.

Observou-se uma relação entre o semestre recomendado para a disciplina e a média registrada para a turma: quanto mais avançado a disciplina, maior é a média de acertos. Todas as turmas apresentaram um desempenho acima do valor intermediário, destacando-se a turma de QQ que obteve um desempenho de 65%.

O gráfico da **Figura 8** a seguir mostra o desempenho dos estudantes para cada questão.

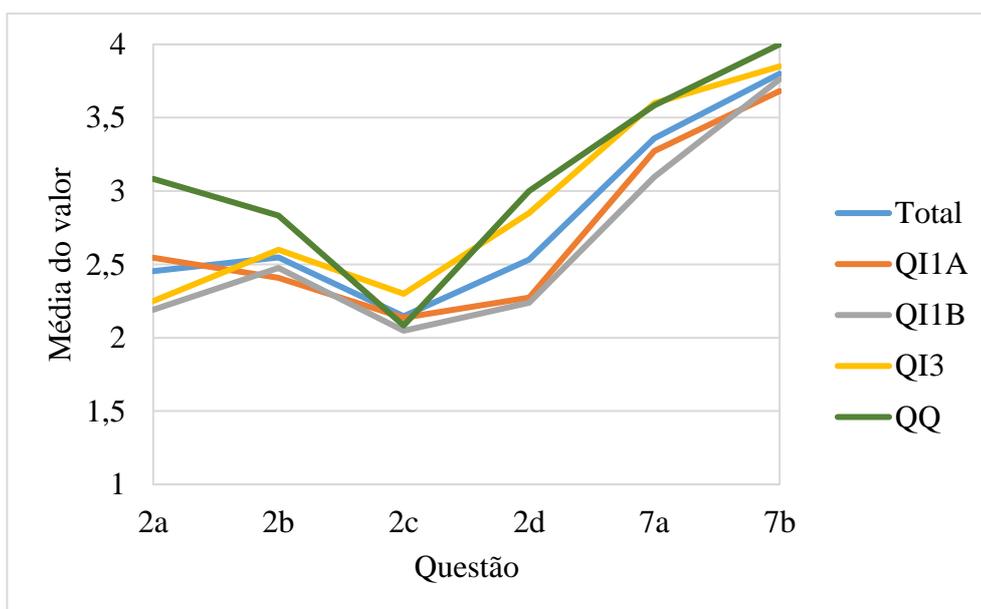


Figura 8. Gráfico da média do valor para cada questão da CR (Q1)

Para quase todas as questões nessa categoria, as turmas QQ e QI3 apresentaram um melhor desempenho. Entretanto, as médias dessas turmas foram menos distantes das outras turmas do que na CQ, inclusive para a questão **2c** o desempenho de QQ foi inferior à média total. Essa questão é sobre qual representação os alunos consideram correta entre representações do átomo que eles imaginam e as outras que eles conhecem.

Um ponto interessante no gráfico anterior é o alto desempenho relativo de todas as turmas para as questões **7a** e **7b**, com médias totais de 3,36 e 3,80, respectivamente.

Nessa pergunta, os estudantes deveriam escolher, entre quatro representações, quais eles imaginavam e qual era a mais apurada, respectivamente. A média superior em **7b** mostra que os estudantes conseguem reconhecer uma representação do átomo que seja mais aprimorada, contudo, quando foi pedido para eles que descrevessem tal representação, o desempenho foi baixo, como evidenciado pelas questões **2a**, **2b** e **2c** com médias totais 2,45, 2,55 e 2,15, respectivamente.

A média total para todas as turmas para as questões da CR foi 2,81, isto é, houve uma melhora significativa de 26,3% em relação à média geral das questões na CQ (2,02). Isso mostra que o conhecimento dos estudantes com relação às questões envolvendo as representações está mais aprofundado do que os conceitos quânticos. A maior nota encontrada foi 4,00, obtida por seis estudantes de turmas diferentes, enquanto que a menor nota foi 1,33 (estudante de Química Inorgânica I). Aqui, novamente, é possível notar como o desempenho dos estudantes na CR é melhor, já que alguns estudantes obtiveram a nota máxima e nenhum estudante teve a menor nota possível.

O histograma da **Figura 9** abaixo mostra a frequência da soma dos valores para as questões da CR, neste caso as notas mínima, intermediária e máxima são 6, 15 e 24, respectivamente.

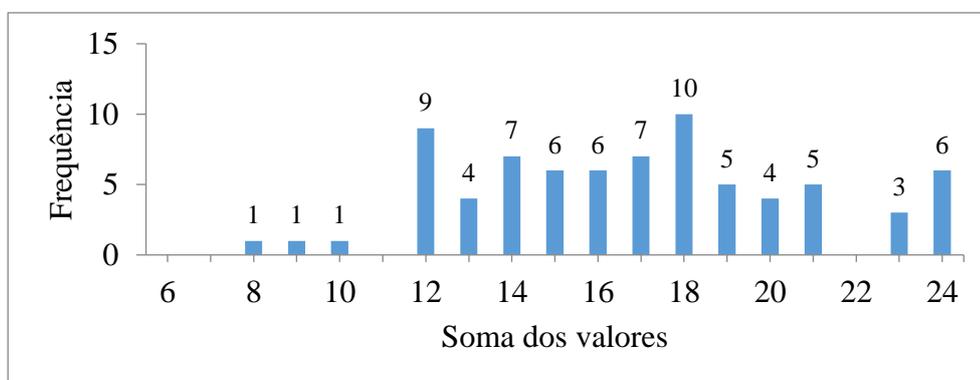


Figura 9. Histograma da soma dos valores para as questões da CR (Q1)

É possível notar a clara diferença entre os histogramas das duas categorias. Na CR a frequência em notas mais altas é maior quando comparada com a CQ. Conforme o histograma, 4,00% dos participantes obtiveram média de acertos abaixo de 25% (na CQ foi 38,7% dos estudantes), enquanto 24,0% ficaram acima de 75% (na CQ foi 1,33% dos estudantes). A grande maioria, 54,7%, obteve média de acertos ficou entre 40% e 75% de desempenho.

Para o Questionário 2:

Os estudantes que participaram do Q2 são de três turmas: duas turmas de Química Inorgânica I e uma turma de Química Quântica. A turma de Química Inorgânica III estava em semana de prova e não participou do Q2. Novamente, para facilitar, usa-se os códigos das turmas apresentado anteriormente.

O Q2 foi respondido por 46 estudantes. As turmas e estudantes participantes do Q2 são os mesmos do Q1, exceto aqueles estudantes que estavam ausentes no dia de um questionário, mas presente no outro questionário.

Categoria Quântica (CQ)

A média dos valores das respostas dos estudantes de cada turma para a CQ é apresentada na **Tabela 5** abaixo (os valores mínimo e máximo são 1 e 4, respectivamente).

Tabela 5. Média dos valores para cada turma para a CQ (Q2)

Turma	Média
Q1A	1,41
Q1B	1,65
QQ	2,00

Assim como no Q1, todos os grupos apresentaram médias de acertos baixas, entretanto no Q2 as médias ficaram ainda menores para essa categoria. Todas as turmas obtiveram uma média inferior ao valor intermediário 2,5. Assim como no questionário anterior, a turma com os estudantes mais avançados obteve uma média maior quando comparado com as outras duas turmas, contudo o desempenho ainda é considerado insatisfatório.

O gráfico da **Figura 10** a seguir mostra o desempenho dos estudantes para cada questão. Como é possível perceber, para todas as questões, os estudantes de QQ apresentaram uma pontuação média maior do que os demais estudantes das outras turmas. A questão 4 teve a menor média total (1,35). Também foi para essa questão que os estudantes mais avançados no curso de química não conseguiram ter um desempenho melhor. A questão pede que os estudantes digam o que entendem por função de onda. De acordo com a ementa da disciplina, os estudantes de QQ deveriam possuir o conhecimento prévio para conseguirem responder essa relação. Uma questão que todos os estudantes deveriam ter condições de responder corretamente é a questão **3a**. A questão

é para os estudantes relacionarem um gráfico, que mostra dois orbitais, com uma ilustração de como eles imaginam um átomo. Nota-se que todos eles estudam, em algum momento, o gráfico, além disso, a maneira como o gráfico é apresentado na questão foi retirada da mesma forma como é mostrado no principal livro-texto da disciplina Química Inorgânica I⁵², indicando um baixo nível de retenção do conhecimento aprendido durante o curso.

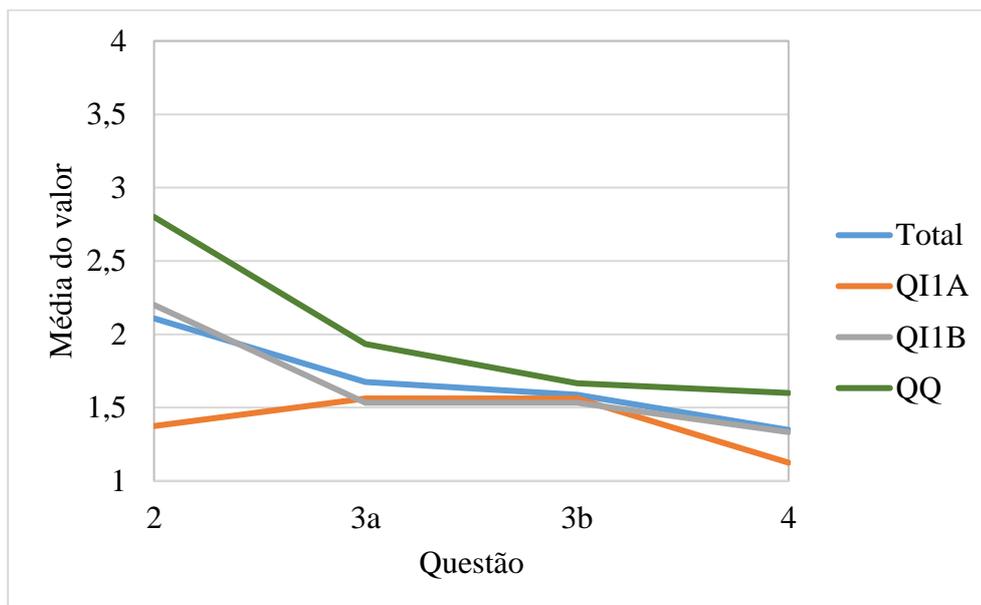


Figura 10. Gráfico da média do valor para cada questão da CQ (Q2)

A média total para todas as turmas para a CQ foi 1,68. Percebe-se que a média total é inferior à metade do valor máximo, concordando com os resultados encontrados para o Q1, quando esse indicou que a aprendizagem dos estudantes com relação às questões envolvendo a química quântica está prejudicada de alguma forma. Como comparação, para Q1 a média total foi 2,02. A maior nota encontrada para Q2 foi 3,50 (estudante de Química Quântica). Esse desempenho realça ainda mais a deficiência no ensino de conceitos da química quântica. A menor nota foi 1 (diversos estudantes).

O histograma da **Figura 11** mostra a frequência da soma dos valores para as questões da CQ. As notas mínima, intermediária e máxima são 4, 10 e 16, respectivamente. De acordo com o histograma, 67,4% dos estudantes ficaram com médias de acerto abaixo de 25%, enquanto que 2,17%, acima de 75%.

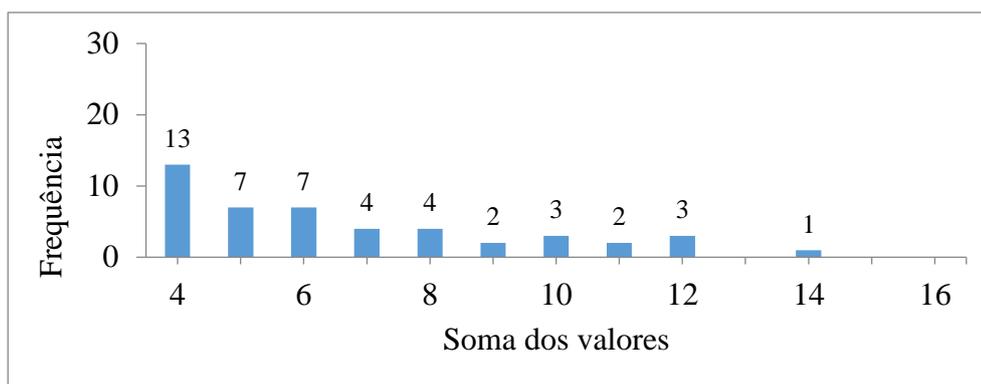


Figura 11. Histograma da soma dos valores para as questões da CQ (Q2)

Categoria Representação (CR)

A média das respostas dos estudantes de cada turma para a CR é apresentada na **Tabela 6** abaixo (os valores mínimo e máximo são 1 e 4, respectivamente):

Tabela 6. Média dos valores para cada turma para a CR (Q2)

Turma	Média
QI1A	1,56
QI1B	1,73
QQ	1,97

Nenhuma turma obteve uma média superior à 2,5. A turma de QQ obteve a maior média dentre as turmas. Da mesma forma que para Q1, as médias para a CR foram maiores do que para a CQ, exceto pela turma QQ que a média de acertos para a CQ foi 2,00.

O gráfico da **Figura 12** a seguir mostra o desempenho dos estudantes para as duas questões na CR do Q2. Os estudantes de QQ tiveram as maiores médias em ambas as questões da CR. Destaca-se a baixa média de acertos para a questão **5**, que aborda a relação da representação do átomo que os estudantes desenharam com alguma característica macroscópica. É possível notar a dificuldade que os estudantes têm de relacionar o átomo com algo observável, como a mudança de cor de uma chama, fogos de artifício, solubilidade, eletricidade, brilho em metais, diferentes densidades em materiais distintos, entre vários outros. Pode-se perceber que os estudantes não se apropriaram significativamente da representação do átomo imaginada por eles, pois eles deveriam ter uma melhor capacidade de aplicar essa representação em uma outra ideia⁵⁹. É imprescindível um entendimento macroscópico de situações do cotidiano para que as equações e conceitos quânticos façam sentido para os estudantes¹⁰.

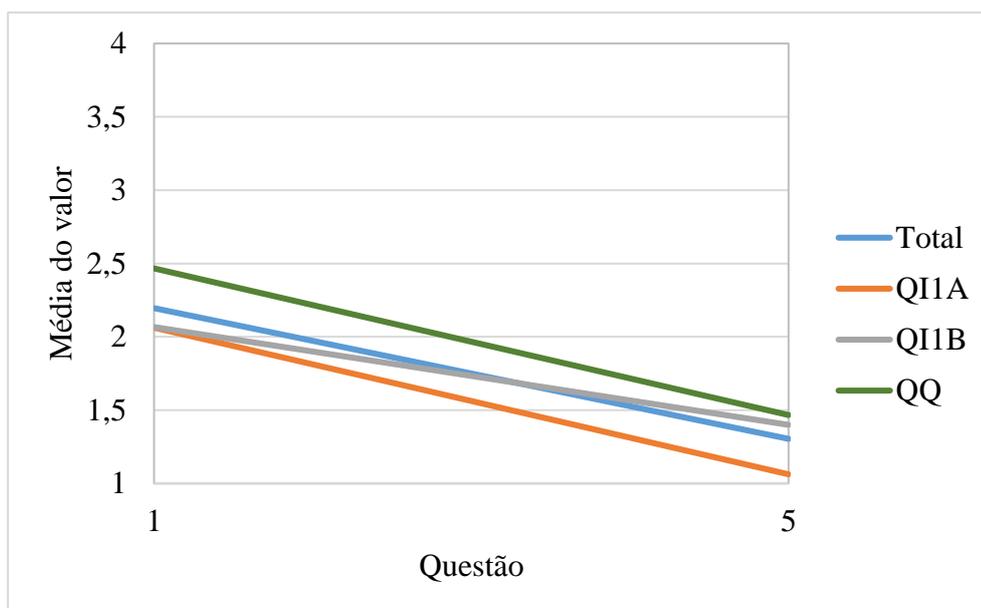


Figura 12. Gráfico da média do valor para cada questão da CR (Q2)

A média total para todas as turmas para a CR foi 1,75, isto é, a média está muito abaixo de um desempenho de 50%. Contudo a performance dos estudantes na CR é superior quando comparada com a CQ (1,68). A média para o Q1 na CR foi 2,81. O maior valor encontrado para o Q2 foi 3,50 (estudante Química Inorgânica I), enquanto que a menor nota foi 1 (diversos estudantes).

O histograma da **Figura 13** abaixo mostra a frequência da soma dos valores para as questões da CR, neste caso as notas mínima, intermediária e máxima são 2, 5 e 8, respectivamente.

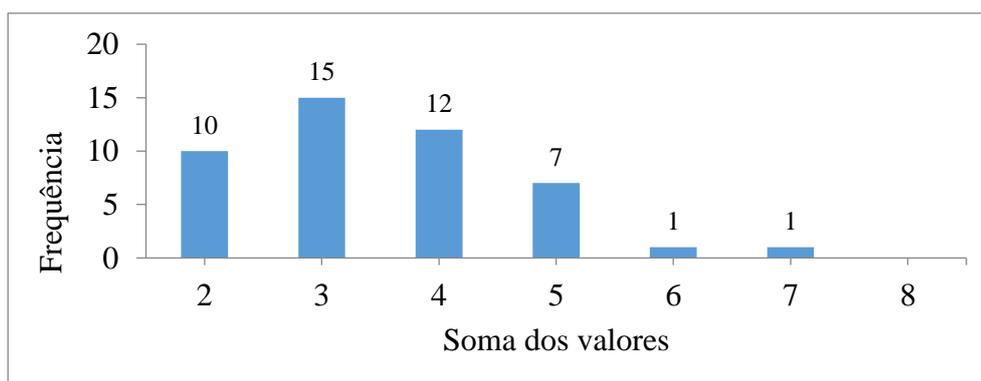


Figura 13. Histograma da soma dos valores para as questões da CR (Q2)

É possível notar a clara diferença entre os histogramas das duas categorias. Na CR a frequência em notas mais altas é maior e alguns estudantes obtiveram médias de acertos

de 50%. Na CR, 54,3% dos participantes obtiveram médias abaixo de 25% de desempenho (em oposição aos 63,4% na CQ), enquanto que 2,17%, acima de 75% (o mesmo para a CQ).

De forma geral, os participantes dos dois questionários apresentaram maior conhecimento dos conceitos através das questões envolvendo representações. No Q1, o desempenho em média de acertos dos estudantes foi 34,0 e 60,3% para as CQ e CR, respectivamente. Enquanto que para o Q2 os valores foram 22,7 e 25,0% para as CQ e QR, respectivamente. Nota-se uma piora de desempenho, o que é inesperado, visto que após estudar sobre o tema, espera-se uma maior compreensão sobre o assunto. Comparando os dois questionários é notável que, apesar de questões diferentes, as perguntas abordam os mesmos temas. A **Tabela 7** abaixo compara os temas abordados nos dois questionários:

Tabela 7. Semelhanças entre os dois questionários

Tema	Questão do Q1	Questão do Q2
Representação do átomo	2a, 2b, 2c, 7a e 7b	1
Conceito quântico: orbital	3, 5 e 8c	3a e 3b
Diagrama de energia	6	2
Dualismo partícula-onda	1	4

Os questionários diferem com relação às questões envolvendo princípio da incerteza de Heisenberg no Q1 e a questão abordando observáveis macroscópicas no Q2. Dessa forma, é possível afirmar que os dois questionários são equivalentes e do mesmo nível de dificuldade, logo o decréscimo no desempenho dos estudantes de um questionário para o outro pode ser devido à falta de compreensão dos estudantes sobre os temas.

5.1.2. Abordagem Qualitativa

A análise de conteúdo será apresentada para cada pergunta e cada turma. No final de cada pergunta, serão apresentados os resultados considerando todos os estudantes. Por fim, após todas as perguntas, será apresentado um resumo para a categoria.

Para o Questionário 1

O Q1 foi respondido por 75 estudantes divididos em quatro turmas.

Categoria Quântica (CQ)

1 – O que você entende pelas propriedades de partícula e onda de prótons, nêutrons e elétrons?

Resposta esperada: discutir que esta propriedade não é clássica, que é presente, significativamente, para todos objetos na escala atômica ou listar algumas características, tais como difração e conservação de momento.

QIIA

A média de acertos para essa questão foi 1,18 e 40,9% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Entre todas as turmas, a QIIA foi a com a menor média. Para essa turma:

- 31,8% dos estudantes utilizaram conceitos clássicos, por exemplo: *“os prótons são as cargas positivas localizadas no núcleo, os nêutrons sem carga, e os elétrons carregados negativamente”*;
- 18,2% dos estudantes basearam a resposta no enunciado da pergunta, por exemplo: *“que eles podem ser considerados partículas e ondas”*.

Nenhum estudante empregou conceitos de mecânica quântica para descrever a natureza dualista de partículas subatômicas.

QIIB

A média de acertos para a questão foi 1,48 e 52,4% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Segundo a análise das respostas:

- 23,8% dos estudantes responderam que partículas subatômicas têm comportamento de partícula e onda sem justificar ou discutir, por exemplo: *“propriedades partícula e onda referem-se às propriedades de partículas de se comportarem ora como partícula, ora como onda”*;
- 9,53% dos estudantes apresentaram respostas com características clássicas que não respondem à pergunta, como: *“não muita coisa. Nêutrons não possuem carga, elétrons têm cargas negativas e prótons, positivas”*.

Apenas um estudante respondeu usando ideias quânticas: *“A nível quântico existe uma interpolação dessas propriedades, conhecida como dualidade onda-partícula”*.

QI3

A média para essa questão foi 1,35 e 15,0% dos estudantes não responderam. Conforme as repostas:

- 40,0% dos estudantes caracterizaram as partículas subatômicas através de argumentos clássicos, mas sem responder à pergunta, como por exemplo: “*prótons e nêutrons no núcleo do átomo e os elétrons na ‘volta’*”;
- 20,0% dos alunos basearam a resposta no enunciado, como: “*que são ondas e partículas ao mesmo tempo*”.

Nenhum estudante respondeu à questão de forma adequada.

QQ

A média para essa turma foi 1,75 e 16,7% dos estudantes não responderam à questão. Para a QQ:

- 33,3% dos participantes responderam à questão com base no enunciado, por exemplo: “*propriedades dualistas. Comportamento tanto de onda como de partícula*”;

Nenhum estudante empregou conceitos quânticos.

É possível perceber que muitos estudantes das turmas QI1A e QI1B não responderam à questão, resultando em uma média baixa. Apenas um estudante respondeu corretamente à questão. Esperava-se que os estudantes das turmas QI3 e QQ, que são mais avançados no curso de química, respondessem de forma adequada.

Considerando todos os estudantes, a média de acertos foi 1,40, muito abaixo do valor intermediário 2,5. Considerando as duas categorias, essa foi a pior média. Em geral, os estudantes apresentaram pouco domínio sobre o assunto da pergunta. Cerca de 24,0% deles recorreram a ideias clássicas. É visível que, mesmo que a questão pergunte especificamente sobre uma característica quântica (dualidade partícula-onda), os estudantes respondem com definições clássicas, como “*próton é positivo e elétron é negativo*”. O baixo desempenho evidencia as lacunas dos alunos na compreensão de conceitos fundamentais da química quântica e a confusão de conceitos clássicos com os quânticos, como observado no estudo de Dangur *et al.*⁴⁸. Outro ponto interessante é que 4,00% dos estudantes relacionaram o comportamento dualista como relacionado apenas ao elétron, como: “*elétrons sofrem interações construtivas e destrutivas (caráter de*

onda) e podem ser acelerados e colidir com outras partículas (caráter de partícula). Prótons e nêutrons são partículas”.

3 – O que você entende por orbital?

Resposta esperada: discutir que é uma região do espaço onde exista maior probabilidade de encontrar elétrons. O estudante deve transmitir a ideia matemática de probabilidade, ou seja, que o elétron se encontra deslocalizado. Outra possível resposta é relacionar com uma função de onda espacial para um ou dois elétrons.

Q11A

A média para essa pergunta foi 2,32. Apenas 4,54% dos estudantes não sabiam responder à questão. De acordo com as respostas:

- 27,3% dos estudantes consideram o orbital como uma região em que existe a possibilidade de encontrar elétrons. Apesar de os estudantes considerarem a deslocalização dos elétrons, eles não usaram termos mais corretos, como probabilidade. Um exemplo de resposta é: *“espaço onde o elétron pode ser encontrado”*;
- 27,3% dos participantes responderam que o orbital é a região em que o elétron está. Note que os alunos não consideraram a deslocalização dos elétrons, por exemplo: *“onde se encontram os elétrons”*.
- 18,2% dos estudantes compreendem o orbital como sinônimo de camada ou nível, como: *“os vários níveis de energia que compõem a eletrosfera”*;
- 9,09% dos estudantes responderam corretamente. Por exemplo: *“região do espaço com maior probabilidade de encontrar um elétron”*.

Q11B

A média da turma foi 1,86 e 9,52% dos estudantes não responderam à questão.

Para essa pergunta:

- 38,1% dos estudantes responderam que orbital é a forma ou o próprio elétron, como *“orbital é o próprio elétron, é a forma que ele ocupa no espaço”*;
- 28,6% dos alunos relacionaram o orbital com uma região espacial com maior possibilidade de encontrar elétrons. Por exemplo: *“região no espaço com possibilidade de encontrar o elétron”*. A resposta está parcialmente correta, contudo, os estudantes não usaram o termo probabilidade que é mais adequado.

Apenas um estudante (4,76%) respondeu corretamente: “*orbitais são espaços ocupados pelos elétrons, onde têm maior probabilidade de encontrar algum*”.

QI3

A média de acertos obtida pela turma foi 2,75 e todos os estudantes responderam à questão. De acordo com as respostas:

- 35,0% dos estudantes afirmaram que o orbital é a região mais provável de encontrar elétrons;
- 25,0% dos alunos responderam adequadamente, como: “*zona de alta probabilidade de se encontrar um elétron*”. Note que para essas respostas, os estudantes empregam o termo probabilidade, enquanto que, para as respostas anteriores, usaram termos como possibilidade, provável ou possível;
- 20,0% dos participantes responderam que o orbital é uma região em que o elétron está localizado explicitamente. Por exemplo: “*local onde estão localizados os elétrons*”.

QQ

Assim como a turma QI3, a QQ obteve a média 2,75. Apenas 8,33% dos estudantes não responderam à questão. Considerando as respostas dos estudantes:

- 33,3% delas relacionaram orbital adequadamente com uma região em que existe a probabilidade de se encontrar elétrons. Por exemplo: “*região espacial com maior probabilidade de se encontrar o elétron*”;
- 16,7% delas definiram o orbital como camada ou nível, como: “*nível de energia*”.

Como esperado, as turmas mais avançadas no curso de química alcançaram as maiores médias. Uma parte considerável da turma QQ respondeu adequadamente à pergunta. É importante diferenciar as respostas que consideram os elétrons deslocalizados, mas que não usam termos adequados como probabilidade, das respostas que empregam esse termo. Com essa pergunta, foi possível perceber a dificuldade que alguns estudantes tem com o conceito orbital. A média total para essa questão foi 2,37, menor do que o valor intermediário 2,5. Considerando todos os estudantes, 26,7% deles afirmaram que o orbital é uma região espacial do átomo em que é mais provável de se encontrar elétrons, concordando com os resultados relatados por Lima e Silva³⁵. O principal erro cometido por 17,3% dos estudantes foi descrever o orbital como uma localização física, ao redor do núcleo, onde o elétron está localizado. Essa interpretação

para o orbital também foi relatada por Sunyono *et al.*⁸⁴, em que os alunos descrevem o orbital como uma órbita circular em torno do núcleo. Outras respostas, de 13,3% dos alunos, definiram o orbital como o próprio elétron. Nesse sentido, Autschbach⁸⁵ enfatiza a importância de alunos compreenderem que orbitais não são objetos materiais e que sejam capazes de diferenciar elétrons de orbitais. Além disso, 12,0% dos estudantes usaram os termos camada ou nível como sinônimo de orbital, assim como nos trabalhos de Taber³⁰ e Nicoll³⁴.

4 – O que você entende pelo princípio da incerteza de Heisenberg?

Resposta esperada: relacionar a impossibilidade de se determinar simultaneamente e com precisão o momento e a posição de uma partícula.

QI1A

A média para essa questão foi 1,41 e 31,8% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Com base na análise:

- 45,4% dos estudantes relacionaram o princípio com características de orbital, por exemplo: *“onde podemos determinar a localidade dos elétrons”* e *“nunca sabemos onde o elétron está, mas sim uma probabilidade”*. Ambas as respostas remetem ao conceito de orbital, isto é, o orbital é uma região em que se pode determinar (a probabilidade) de encontrar elétrons, apesar de que alguns estudantes tenham se expressado de forma errada, como no primeiro exemplo em que o estudante acredita que o princípio está relacionado com determinar o local do elétron. Com respeito à probabilidade, justamente, é ela que transmite o sentido de incerteza.

Apenas um estudante respondeu corretamente: *“que não se pode determinar com precisão o momento e a posição do elétron”*.

QI1B

A média foi 1,52 e 42,8% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Para a turma:

- 19,0% dos estudantes relacionaram o princípio com a incapacidade de determinar a posição e a energia ou velocidade de uma partícula. Por exemplo: *“o elétron não pode ter sua velocidade e posição determinadas ao mesmo tempo”*;

- 19,0% dos estudantes responderam que o princípio é a imprecisão na determinação da posição do elétron. Por exemplo: *“somente que não pode se determinar a posição exata do elétron”*.

Nenhum estudante relacionou o princípio com a impossibilidade de se determinar o momento e a posição de uma partícula ao mesmo tempo.

QI3

A média para o grupo foi 2,00 e apenas 5,00% dos estudantes não responderam à questão. Considerando as respostas:

- 45,0% dos estudantes relacionaram o princípio com características de orbital, por exemplo: *“é uma equação que se refere ao provável local de se encontrar um elétron”*;
- 35,0% dos estudantes afirmaram que o princípio é a incerteza de se determinar posição e velocidade ou energia, simultaneamente, como os exemplos: *“não se pode determinar, simultaneamente, a posição e a velocidade de um elétron”* e *“que calculando onde o elétron se encontra não conseguimos calcular sua energia e vice-versa”*.

Nenhum estudante relacionou o princípio com momento e posição.

QQ

A média para a turma QQ foi 1,92 e 25,0% dos estudantes não responderam à questão. Segundo as respostas:

- 41,7% dos estudantes relacionaram o princípio com a impossibilidade de determinar a posição e velocidade ou energia de uma partícula ao mesmo tempo. Por exemplo: *“princípio que demonstra matematicamente que é impossível descrever ao mesmo tempo a posição e a energia do elétron”*;
- 25,0% dos estudantes afirmaram que o princípio está relacionado com a probabilidade de se encontrar elétrons, como: *“que nunca se pode saber exatamente onde o elétron se encontra, apenas onde há maior probabilidade”*.

Novamente, nenhum estudante relacionou momento e posição.

A média de acertos total foi 1,68. De modo geral, os estudantes parecem não ter uma ideia clara da diferença entre orbital e o princípio da incerteza de Heisenberg, visto que 34,7% deles relacionaram o princípio da incerteza com alguma característica de orbital, como: *“não é certo que ali estará o elétron, mas que haverá maior probabilidade de o encontrar”*. É importante destacar que os estudantes não apresentam a definição de

orbital, mas eles transmitem a ideia de orbital. Além disso, 22,7% dos estudantes responderam que o princípio é a incapacidade de se determinar, ao mesmo tempo, velocidade (ou energia) e posição. É relevante observar que esses erros foram cometidos por todos os participantes, mesmo com os alunos de níveis mais avançados como são as turmas QI3 e QQ. Apenas um estudante relacionou o princípio com posição e momento. Percebe-se que os alunos relacionam o princípio da incerteza de Heisenberg apenas com o elétron, e não como um fundamento epistemológico que diferencia a mecânica clássica da quântica.

5 – De acordo com as suas respostas às questões 3 e 4, haveria uma conexão entre a definição de orbital e o princípio da incerteza de Heisenberg?

Resposta esperada: afirmar que sim e discutir a impossibilidade de determinar a posição exata do elétron em um orbital, sendo que esse orbital tem a energia quantizada e representa a densidade de probabilidade eletrônica.

QI1A

A média encontrada para turma foi 1,68 e 59,1% dos estudantes não responderam ou responderam apenas “sim” ou “não”, impedindo a análise das respostas. Conforme as respostas:

- 18,2% dos estudantes apresentaram respostas relacionadas ou com características de orbital, por exemplo: “*sim, como o orbital é uma nuvem não estacionária, o elétron não se encontra em determinado ponto, mas sim em um provável ponto*”.

Nenhum estudante conseguiu relacionar as duas questões.

QI1B

A média foi 1,48 e 85,7% dos estudantes não responderam à questão ou responderam apenas “sim” ou “não”. Considerando as respostas, 9,52% dos estudantes associaram com características de orbital. Por exemplo: “*sim, o orbital mostra a probabilidade de encontrar o elétron*”.

Nenhum estudante relacionou as duas questões.

QI3

A média obtida foi 1,80 e 45,0% dos estudantes não responderam ou apenas responderam “sim” ou “não”. De acordo com a análise:

- 50,0% dos estudantes relacionaram a resposta com orbital ou características de orbital, como os exemplos: “*sim, orbital é onde o elétron pode estar*” e “*sim, são complementares, sabemos que o elétron está em certa região da eletrosfera, mas não temos precisão*”.

Apenas um estudante relacionou parcialmente as duas questões: “*sim, já que o orbital é uma região com a probabilidade de se encontrar o elétron. O princípio de Heisenberg também dá essa incerteza*”.

QQ

A média foi 1,75 e 75,0% dos estudantes não respondeu ou apenas respondeu “sim” ou “não”. Segundo a avaliação das respostas:

- 25,0% dos estudantes relacionaram, assim como as outras turmas, a resposta com orbital. Por exemplo: “*sim pois toda a ideia do ‘onde fica o elétron’ é limitada por uma incerteza, ou seja, toda a ideia de probabilidade*”.

Através das respostas às questões **4** e **5**, é possível entender que os estudantes confundem o conceito de orbital e o princípio da incerteza de Heisenberg, dessa forma não conseguem expressar a conexão entre os dois conceitos. O principal erro observado foi que 25,3% dos estudantes confundem os conceitos de princípio da incerteza e orbital. Essa pergunta teve a segunda menor média total (1,67). Dez estudantes receberam os valores 3 ou 4 para as questões **3** e **4** e 90% não conseguiu responder.

6 – A respeito da interpretação do diagrama de níveis de energia para o átomo de hidrogênio (**Figura 14**), representado abaixo, responda à questão.

Resposta esperada: a energia do elétron está em seu mínimo. As alternativas “o elétron é atraído pelo núcleo” e “o elétron tem carga negativa” são erradas, contudo, considerou-se ligeiramente mais corretas do que “a energia é liberada durante o processo exotérmico”, porque os processos exotérmicos, normalmente, envolvem reações ou mudanças que ocorrem ao longo do tempo. O enunciado da pergunta deixa implícito que o diagrama de energia é estacionário.

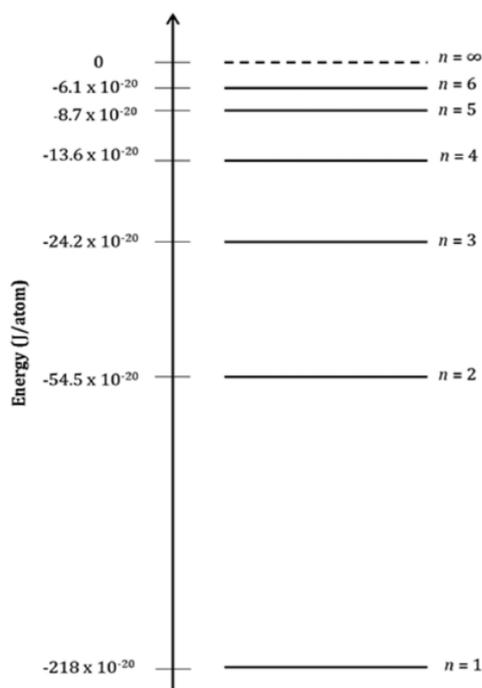


Figura 14. Diagrama de energia para o átomo de hidrogênio⁷⁵

Qual destas afirmações melhor explica porque o valor da energia nesta figura é muito negativo quando $n = 1$?

O elétron tem carga negativa.

O elétron é atraído pelo núcleo.

A energia do elétron está em seu mínimo.

Energia é liberada durante o processo exotérmico.

Como a questão é objetiva, os resultados são apresentados na **Tabela 8**:

Tabela 8. Distribuição das respostas para cada turma

Afirmação	Porcentagem				
	QI1A	QI1B	QI3	QQ	Total
O elétron tem carga negativa	4,54	4,76	9,10	0	5,19
O elétron é atraído pelo núcleo	36,4	38,1	36,4	33,3	36,4
A energia do elétron está em seu mínimo	27,3	38,1	40,9	58,3	39,0
Energia é liberada durante o processo exotérmico	27,3	0	13,6	8,33	13,0
Estudantes que não responderam	4,54	19,0	0	0	6,49

Um estudante da turma QI3 selecionou três alternativas e cada uma das alternativas escolhida por ele foi considerada como uma resposta.

Conforme a **Tabela 8**, a resposta correta foi selecionada por 39,0% dos estudantes. Esse valor é pequeno quando se compara com os 54,6% de estudantes que responderam de forma errada. Esta questão foi adaptada de Allred e Bretz⁷⁵, que observaram resultados semelhantes para alunos de primeiro ano dos cursos de química com ênfase em físico-química e biofísica química de uma universidade americana. É importante comentar que, assim como os estudantes de turmas iniciais de química, os estudantes das turmas QI3 e QQ exibiram o mesmo comportamento. Com base nos dados, é possível afirmar que os estudantes não conseguem interpretar e compreender um diagrama de energia.

8 – A figura abaixo (**Figura 15**) representa um modelo bidimensional de orbitais moleculares. As ilustrações A e B representam os orbitais de uma molécula diatômica. Cada ilustração se refere a um orbital molecular diferente. Explique a ilustração da figura respondendo às questões a-c a seguir:

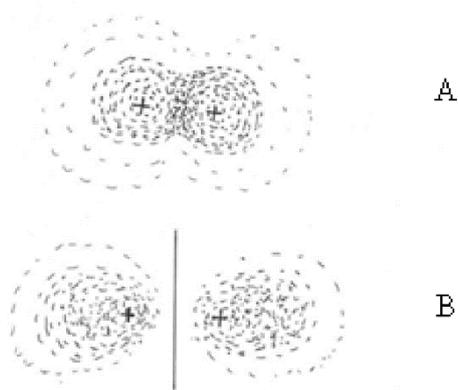


Figura 15. Modelo bidimensional de orbitais moleculares⁴⁸

8a – O que os símbolos "+" representam?

Resposta esperada: os símbolos representam o núcleo dos átomos, que é positivo devido ao próton.

QI1A

A média calculada para essa turma foi 1,54 e 36,4% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Em relação às respostas:

- 18,2% dos estudantes responderam, de forma muito simples, que os símbolos são cargas positivas, por exemplo: "*cargas positivas*". Essa resposta é simples porque não fica claro

que o símbolo se refere às partículas subatômicas. Subtende-se que, no centro do átomo existe apenas uma ou mais cargas;

- 13,6% dos estudantes relacionaram os símbolos com elétrons, como: “a carga do elétron” ou “a carga positiva do elétron no nível de valência”. É possível que, no último exemplo, o participante tenha se confundido elétron com próton, contudo, a expressão “nível de valência” usada está relacionada ao elétron. Esse erro é resultado de uma ausência de apropriação de conceitos básicos de química.

- 13,6% dos estudantes responderam que os símbolos são regiões ou polos positivos dos átomos, por exemplo: “polo positivo do átomo”. Essas respostas poderiam ser mais completas caso os estudantes comentassem sobre a origem da carga positiva, isto é, os prótons localizados no núcleo.

QI1B

A turma obteve a média 1,57 e 28,6% dos alunos não responderam ou não sabiam responder à questão. De acordo com a análise:

- 23,8% dos estudantes relacionaram os símbolos com termos matemáticos associados aos orbitais. Por exemplo: “orbitais carregados positivamente”, “densidade eletrônica” ou “a fase da função de onda”. Essas respostas usam termos mais complexos do que a resposta esperada: próton. É evidente que os estudantes não compreendem os termos orbital, função de onda e densidade eletrônica.

- 19,0% dos estudantes afirmaram que os símbolos são cargas positivas, cometendo o mesmo engano comentado para a turma QI1A. Por exemplo: “carga”.

QI3

A média calculada foi 1,80 e 10,0% dos estudantes não responderam à questão. Considerando as respostas:

- 35,0% dos estudantes relacionaram os símbolos com termos matemáticos associados aos orbitais. Por exemplo: “uma interação construtiva entre os orbitais; uma região que o elétron pode ocupar”, “lado positivo do orbital” e “funções de onda”.

- 20,0% dos participantes responderam corretamente. Por exemplo: “núcleo do átomo” e “o núcleo de prótons, que é positivo”.

QQ

A média de acertos foi 2,42. Todos os estudantes responderam à questão, sendo que:

- 41,7% dos estudantes respondeu que os símbolos são apenas cargas positiva, como: “*cargas positivas*”. Como comentado anteriormente, essas respostas são muito simples. Além disso, alguns estudantes usaram o termo “densidade” para indicar o símbolo, como: “*densidade positiva*” ou “*densidade eletrônica positiva*”, mostrando que os estudantes têm dificuldades em se expressar, pois esses termos são empregados para elétrons e não prótons (ou núcleo);
- 33,3% dos estudantes responderam corretamente: “*núcleos atômicos*”;
- 25,0% dos participantes relacionaram, assim como as turmas anteriores, os símbolos com orbital, como: “*regiões com mais probabilidade de achar os elétrons*” e “*orbitais 1s*”.

Considerando todos os estudantes, 22,7% deles relacionaram os símbolos “+” presentes na **Figura 15** com termos matemáticos associado com orbital. Novamente, essa pergunta possibilitou, indiretamente, identificar a dificuldade que os estudantes apresentam na compreensão do conceito de orbital. Uma possível explicação para esse comportamento é que em alguns livros usados pelos estudantes existem figuras representando orbitais com os símbolos “+” e “-”^{28,29,52,81-83}. O contexto das figuras nesses livros é a discussão sobre orbitais atômicos ou orbitais moleculares. Por outro lado, 21,3% dos estudantes relacionaram o símbolo com carga positiva ou apenas carga, contudo, essas respostas não transmitem a ideia de partícula, isto é, essas respostas indicam apenas que existe uma carga.

Nota-se a dificuldade dos estudantes com o aspecto representacional expresso pelo símbolo “+”¹⁰. A média para essa questão foi 1,76, ou seja, muito baixa.

8b – Qual o significado da linha vertical na ilustração B?

Resposta esperada: a linha vertical representa um nó, ou seja, um local com densidade eletrônica nula.

Q11A

A média de acertos para essa questão foi 1,64 e 54,5% dos estudantes não responderam à questão. Com base na análise:

- 18,2% dos estudantes identificaram, adequadamente, a linha vertical como um nó, como: “*existência de um nó*”. Desses estudantes, 25% responderam usando um argumento mais correto, por exemplo: “*nó. Região com nula probabilidade de se encontrar um elétron*”;
- 13,6% dos estudantes relacionaram a linha com a presença ou a ausência de uma ligação, como nos exemplos: “*indica a posição da ligação*” e “*quando não há ligação/contato*”. Essas respostas estão erradas.

Q11B

A média de acertos para essa questão foi 2,00 e 38,1% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Conforme as respostas:

- 28,6% dos estudantes responderam que a linha é um nó. Desses estudantes, nenhum empregou termos como “probabilidade” ou “densidade eletrônica”;
- 14,3% dos estudantes relacionaram a linha vertical com orbitais antiligantes, contudo, de forma errada, por exemplo: “*repulsão (orbitais antiligantes)*” e “*para identificar os orbitais antiligantes*”. Para essas respostas serem consideradas corretas, os estudantes deveriam comentar que, na região do orbital antiligante, a probabilidade de encontrar elétrons representada pela linha, é nula.

Q13

A média obtida pela turma foi 3,00 e 10,0% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. A média foi ligeiramente superior ao valor intermediário. Segundo as respostas:

- 65,0% dos estudantes identificaram a linha vertical como um nó. Desses estudantes, apenas 7,69% apresentou uma resposta mais completa, como: “*plano nodal (não pode haver elétrons)*”.

QQ

A média de acertos da turma foi 3,00 e 25,0% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Assim como a turma Q13, a QQ obteve uma média

satisfatória mesmo com uma quantidade maior de estudantes que não responderam.

Conforma as respostas:

- 66,7% dos estudantes relacionou a linha vertical com um nó. Desses estudantes, apenas 12,5% respondeu com termos mais adequados, como: “*nó ou nodo, não há densidade eletrônica nessa região do espaço*”.

A média de acertos total foi 2,32. As turmas QI3 e QQ apresentaram médias superiores às das turmas QI1A e QI1B. Considerando todos os estudantes, 41,3% dos estudantes conseguiram relacionar a linha vertical com um nó, isto é, uma região em que a probabilidade de encontrar elétrons é nula. Contudo, apenas 9,68% desses estudantes responderam usando termos como “probabilidade”, “densidade eletrônica” e “ausência de elétrons”. Apesar de respostas como “*um nó*” estarem corretas, elas são simples. Os erros mais comuns dos estudantes foram relacionar a linha com orbital antiligante (8,00%) ou afirmar que a linha indica apenas uma separação (8,00%).

8c – O que os pontos nas ilustrações representam?

Respostas esperada: os pontos representam a densidade de probabilidade ou nuvem eletrônica. Quanto mais pontos, maior a probabilidade de os elétrons estarem naquela região.

QI1A

A média de acertos que a turma recebeu foi 1,77 e 54,5% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Conforme a análise das respostas:

- 13,6% dos estudantes relacionaram corretamente os pontos como uma representação da nuvem eletrônica, por exemplo: “*a nuvem eletrônica*”.

-13,6% dos estudantes respondeu que os pontos representam orbitais, como: “*os orbitais*”. Essas respostas estão parcialmente corretas, visto que o conjunto dos pontos representam orbitais. Outros 4,54% dos estudantes relacionaram com “*camadas*”. Como discutido na questão 3, alguns estudantes usam nível e camada como sinônimos de orbital.

QI1B

A média obtida pela turma foi 2,14 e 28,6% dos estudantes não responderam à questão. De acordo com as respostas:

- 28,6% dos estudantes responderam corretamente: “*representa a nuvem de elétrons*”;
- 19,0% dos estudantes relacionaram os pontos com os elétrons, por exemplo: “*representam o caminho dos elétrons*” e “*elétrons*”. Essas respostas indicam a ideia errada de elétrons localizados.

QI3

A média calculada foi 2,70 e 10,0% dos estudantes não responderam à questão.

Segunda as respostas:

- 35,0% dos estudantes responderam corretamente: “*regiões com maior probabilidade de haver elétrons*”;
- 30,0% dos estudantes relacionaram os pontos com orbital, como: “*orbitais ligantes e antiligantes, respectivamente*”.

QQ

A média de acertos foi 3,33. Todos os estudantes responderam à questão, sendo que:

- 66,7% dos estudantes responderam adequadamente, por exemplo: “*regiões com probabilidade de encontrar elétrons*”, “*densidade eletrônica*”, e “*nuvem eletrônica*”.

As turmas QI3 e QQ obtiveram médias altas, enquanto que as turmas QI1A e QI1B ficaram com médias inferiores ao valor 2,5. Considerando todos os estudantes, 32,0% deles responderam corretamente, relacionando os pontos com densidade eletrônica, nuvem eletrônica ou a probabilidade de encontrar elétrons. O principal erro foi interpretar os pontos de maneira clássica, ou seja, os pontos representam elétrons localizados. A média de acertos total foi 2,37.

Para a CQ é possível concluir que as principais dificuldades apresentadas pelos estudantes foram relacionadas com os conceitos de partícula-onda e princípio da incerteza de Heisenberg. Também foi possível notar grande dificuldade na interpretação do sinal positivo na questão 8a. A média de acertos para essa categoria foi 2,02.

Para resumir e facilitar a apresentação dos resultados, dividiu-se os dados em tópicos de interesse.

Partícula-onda

O primeiro tópico é sobre as propriedades de partícula e onda de prótons, elétrons e nêutrons. Cerca de 28,0% dos estudantes preferiram não responder sobre esse assunto. Por outro lado, 24,0% dos estudantes relacionaram essas propriedades com características clássicas dos átomos, como: próton é positivo e elétron é negativo. Por fim, 22,7% dos participantes responderam de forma muito simples, baseando a resposta no enunciado, como: “*que estes podem se comportar de ambas as formas*”. Dos 75 estudantes que participaram do Q1, apenas um respondeu de forma adequada.

Orbital

O segundo tópico envolve o conceito de orbital. Considerando todos os estudantes, 42,7% deles compreendem o orbital como uma região espacial no átomo em que a probabilidade de se encontrar um ou dois elétrons é maior. Desses estudantes, 62,5% não empregaram termos mais corretos, como densidade eletrônica ou probabilidade. Em contraponto, 17,3% dos 75 participantes pensam no orbital como um local físico (como uma caixa) em que o elétron está localizado, isto é, os estudantes concebem o orbital de forma clássica. Resultados semelhantes já foram relatados^{30,33}. Outra interpretação relatada pelos estudantes é de que o orbital é o próprio elétron, como foi possível perceber pelas afirmações de 13,3% dos estudantes. Alguns estudantes mostraram dificuldades em compreender a relação entre orbital e a forma como ele é representado, contudo, 32,0% dos estudantes entendem que um orbital é uma região em que os elétrons estão deslocalizados. Contudo, 12,0% dos estudantes pensam que orbital é sinônimo de camada ou nível de energia. Essa concepção errada também foi relatada por Taber³⁰, Nakiblogu³³ e Nicoll³⁴.

Princípio da incerteza de Heisenberg

O terceiro tópico aborda o princípio da incerteza de Heisenberg e qual relação pode ser feita com orbital. Para esse tópico, 22,7% dos participantes compreendem de forma adequada o que é o princípio, entretanto, 34,7% dos participantes confundem o princípio da incerteza com orbital ao explicar o que eles entendem pelo princípio da incerteza de Heisenberg.

Apenas 1,33% dos alunos conseguiu expressar uma relação entre o princípio da incerteza e orbital, o que faz sentido visto que foi possível identificar alguns equívocos nas respostas dos estudantes quando eles pensam nesses dois conceitos de forma separada.

Diagrama de Energia

Os participantes mostraram falhas no entendimento e interpretação do diagrama de energia, pois 54,5% deles escolheram respostas incorretas para a questão 6. Como destaque, a alternativa “o elétron é atraído pelo núcleo” foi selecionada como correta por 36,4% dos estudantes. Novamente, é possível identificar que os estudantes recorrem a ideias clássicas para explicar um conhecimento quântico, sugerindo que os estudantes pensam de acordo com a FMT⁵⁰, isto é, avaliam à questão através de regras como “cargas de sinais oposto se atraem” do que o conceito de quantização de energia, que é um conceito mais abstrato.

Categoria Representação (CR)

2 – A sentença a seguir refere-se às questões a-d: "Livros-texto de Química muitas vezes oferecem múltiplas representações do átomo."

Para as questões a seguir, muitos estudantes não explicaram ou descreveram a representação do átomo, apenas citaram o nome do cientista ao qual determinado modelo é atribuído, como Bohr. As características desses modelos foram retiradas de livros que os estudantes tem acesso^{28,52,82}:

- Dalton: esfera maciça, sem cargas e indivisível (bola de bilhar);
- Thomson: esfera positiva com elétrons incrustados (pudim de passas);
- Rutherford: núcleo positivo e eletrosfera com elétrons (sistema solar);
- Bohr ou Rutherford-Bohr: núcleo positivo e elétrons distribuídos em camadas ou níveis de energia.

2a) – Qual representação de átomo vem primeiro a sua mente?

Resposta esperada: respostas que considerem o núcleo, como uma região pequena e com carga positiva, e os elétrons deslocalizados em uma região. Para abordar os elétrons, espera-se que os estudantes usem termos como: probabilidade, densidade eletrônica, nuvem eletrônica ou orbital.

Q11A

A média de acertos para a turma foi 2,54 e 4,54% dos estudantes não responderam à questão. A média da turma foi ligeiramente acima do valor intermediário. Conforme as respostas:

- 59,1% dos estudantes citaram o modelo de Rutherford (31,8%) ou Bohr (27,3%). Por exemplo: “*Rutherford, modelo planetário*” e “*Bohr*”. Apesar de que o modelo de Bohr é mais completo, os dois modelos são semelhantes e usam ideais clássicas;
- 22,7% dos estudantes imaginam o átomo com argumentos quânticos, como: “*nuvem eletrônica*”, “*representação por orbitais*” ou “*a representação de Bohr, núcleo com prótons e nêutrons e os orbitais com elétrons*”. O último exemplo cita Bohr, contudo a expressão “*orbitais com elétrons*” implica em deslocalização dos elétrons, além disso, não foi empregado os termos nível ou camada.

Q11B

A média de acertos calculada foi 2,19 e 14,3% dos estudantes não responderam à questão. Segundo análise:

- 47,6% dos estudantes responderam com os modelos de Bohr (28,6%) e Rutherford (19,0%);
- 19,0% afirmaram que imaginam o átomo segundo os modelos de Dalton (4,76%) ou Thomson (14,3%). Por exemplo: “*modelo bola de bilhar*” e “*uma esfera com próton, nêutron e elétron*”. A última resposta não cita Thomson, contudo, a descrição do estudante remete ao modelo de Thomson. Ambos os modelos são clássicos e muito simples, porém são mais concretos do que outros modelos;
- 14,3% dos estudantes citaram ideias quânticas, como: “*a representação que vem em primeiro é sobre uma nuvem de elétrons*”.

Q13

A média obtida pela turma foi 2,25 e 10,0% dos estudantes não responderam à questão. Considerando as respostas:

- 60,0% dos estudantes citaram os modelos de Rutherford (30,0%) ou Bohr (30,0%), como: “*planetário (apenas porque é mais bonito visualmente)*” e “*Rutherford-Bohr (níveis de energia)*”. O exemplo mostrado para o modelo de Rutherford indica que os estudantes exibem a preferência de modelos clássicos por serem representados de forma

mais simples, com ideias concretas, sem os conceitos abstratos de probabilidade ou deslocalização de elétrons;

- 15,0% dos estudantes citaram o modelo da Dalton, como: “*partícula indivisível*”. É curioso que alguns estudantes da turma QI3, que é mais avançada no curso de química, ainda imaginam o átomo dessa forma;
- 15,0% dos estudantes responderam corretamente, contudo, as respostas continham pequenos erros, por exemplo: “*TOM, nuvem de elétrons ao redor do núcleo*”. É possível perceber que o estudante pensou na Teoria do Orbital Molecular (TOM) para a representação de um átomo, o que está errado. A TOM é usada em moléculas. A dificuldade de estudantes universitários de diferenciar orbitais atômicos e orbitais moleculares foi relatada por Taber^{30,31} e Tsapalis³².

QQ

A média de acertos obtida pelo grupo foi 3,08. Todos os estudantes responderam à questão. Conforme a análise de conteúdo:

- 50,0% dos estudantes responderam corretamente, como: “*como uma ‘nuvem’, onde a densidade eletrônica é maior perto do núcleo*” e “*núcleo com prótons e nêutrons, e elétrons ao redor nos orbitais. Modelos atômicos iniciais*”;
- 41,7% dos estudantes citaram os modelos de Rutherford (16,7%) e Bohr (25,0%). Por exemplo: “*núcleo esférico e elétrons orbitando ao redor, sei que é errado*” e “*a representação do átomo de Bohr*”. Note que o estudante, que citou Rutherford no exemplo, comentou que sabe que o modelo está errado, então, por que ele continua imaginando o átomo dessa forma?

A média total para essa pergunta foi 2,45. Todas as turmas exibiram médias superiores ao valor 2. As respostas dos estudantes podem ser divididas em três representações: 28,0% dos participantes descreveram o modelo de Bohr com elétrons em camadas circulares ao redor do núcleo. Este resultado é semelhante ao encontrado por Sunyono⁸⁴ e Allred e Bretz²¹; 25,3% dos estudantes responderam com o modelo de Rutherford com elétrons orbitando o núcleo de forma semelhante ao sistema solar; 22,7% dos estudantes imaginam o átomo através de conceitos quânticos com elétrons deslocalizados, representados pela probabilidade de se encontrar os elétrons. A maioria dos estudantes (66,7%) imaginam o átomo de forma clássica, isso pode estar relacionado com a grande abstração de modelos quânticos. Dessa forma, os estudantes preferem

modelos mais concretos⁸⁶. Uma forma possível de superar essa barreira de aprendizagem é introduzindo aplicações de conceitos quânticos em situações reais, motivando os alunos e explicando as vantagens e desvantagens de cada modelo³⁹.

2b – Que outras representações do átomo você conhece?

Resposta esperada: representações do átomo como os modelos de Dalton, Thomson, Rutherford e Bohr.

Como essa questão possibilitou que os estudantes respondessem com diferentes representações, contou-se o número total de respostas. Não responder também foi considerado uma resposta.

Q11A

A média de acertos obtida foi 2,41. Para essa turma, foram 34 respostas. Cinco estudantes não responderam, o que corresponde a 14,7% das respostas. De acordo com a análise:

- 29,4% das respostas citam o modelo de Thomson;
- 17,3% das respostas consideram o modelo de Dalton;
- 17,3% das respostas mencionam o modelo de Bohr.

Modelos com alguma característica quântica apareceram em 2,94% das respostas, como: “*ideia de núcleo por força de energia com nuvem circundando seu exterior*”. Observe que a resposta é confusa, pois considera o núcleo “*por força de energia*”. Além disso, 5,88% das respostas eram muito simples, como “*modelo atual*” ou “*Heisenberg*”, dificultando a categorização.

É importante notar a facilidade que os estudantes têm de lembrarem de modelos clássicos e concretos (76,5% das respostas), quando comparados aos modelos quânticos (2,94%).

Q11B

A média de acertos para a turma foi 2,48. Ao total, foram 46 respostas. Três estudantes não responderam, o que corresponde à 6,52% das respostas. Conforme a análise:

- 23,9% das respostas citam o modelo de Thomson;

- 21,7% das respostas consideram o modelo de Dalton;
- 19,6% das respostas mencionam o modelo de Rutherford.

Modelos com características quânticas ocorreram em 4,34% das respostas, como “*nuvem de energia que ‘delimitam’ os orbitais*”. É provável que o estudante queria ter usado “elétrons” no lugar de “energia”. Ainda, 10,9% das respostas são confusas por não apresentarem um modelo claro, como: “*modelo atual*”, “*partícula onda*” ou “*Schrödinger*”.

A quantidade de respostas com modelos clássicos (76,1%) é muito superior às respostas com modelos quânticos (4,35%).

QI3

A média de acertos foi 2,60. Para essa turma, foram 46 respostas. Três estudantes não responderam, o que corresponde a 6,52% das respostas. Segundo os estudantes:

- 28,3% das respostas citam o modelo de Thomson;
- 26,1% das respostas mencionam o modelo de Dalton.

Modelos com características quânticas apareceram em 6,52% das respostas, como “*a ‘nuvem eletrônica’ de Sommerfeld e Schrödinger*”. Além disso, 13,0% das respostas são confusas, como “*aglomerado de elétrons*”.

A quantidade de respostas com modelos clássicos (71,7%) é maior do que às respostas com modelos com características quânticas (6,52%).

QQ

A média de acertos foi 2,80. Para essa turma, foram 21 respostas. Três estudantes não responderam, o que corresponde a 14,3% das respostas. Conforme a análise:

- 23,8% das respostas citam o modelo de Thomson;
- 23,8% das respostas mencionam o modelo de Rutherford;
- 19,0% das respostas consideram o modelo de Bohr.

Modelos com características quânticas apareceram em 4,76% das respostas, como “*modelos mais avançados em que o elétron possui a forma do orbital em que ocupa*”. É possível identificar uma confusão no conceito de orbital com essa resposta. Além disso, 4,76% das respostas são simples, como “*Schrödinger*”, dificultando a análise. A quantidade de respostas com modelos clássicos (76,2%) é maior do que às respostas com modelos com características quânticas (4,76%).

A média total de acertos para essa pergunta foi 2,55. Cerca de 74,8% das respostas remetem aos modelos clássicos de Dalton, Thomson, Rutherford e Bohr. Entre esses, o modelo de Thomson foi o mais mencionado, com 26,5% das respostas. Contudo, 4,76% das respostas envolviam características quânticas, conforme os exemplos citados anteriormente. É possível verificar que os estudantes lembram mais de modelos clássicos do que quânticos. Analisando as questões **2a** e **2b** e considerando apenas os estudantes que mencionaram modelos quânticos em pelo menos uma das duas questões, percebeu-se que 33,3% deles sabem que existem modelos quânticos, contudo, imaginam o átomo de forma clássica.

2c – Qual dessas representações você diria estar correta?

Resposta esperada: a representação mais correta é aquela que considera características quânticas, isto é, elétrons deslocalizados (nuvem eletrônica, densidade eletrônica, orbital).

Infelizmente para essa pergunta pode ter acontecido um engano. Alguns estudantes podem ter interpretado mal a questão, respondendo à **2c** com base nas representações citadas na questão **2b** e não nas representações mencionadas nas questões **2a** e **2b**. Uma análise completa das respostas dos alunos indica que aproximadamente 41,3% de todos os alunos podem ter interpretado mal a questão **2c**.

Q11A

A média de acertos para a turma foi 2,14 e 27,3% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. De acordo com a análise:

- 22,7% dos estudantes responderam que a representação mais correta é a do modelo quântico;
- 18,2% dos estudantes afirmaram que o modelo de Rutherford é o mais correto. É interessante observar que o modelo de Rutherford foi mais citado do que o modelo de Bohr;
- 13,6% dos estudantes responderam que o modelo de Bohr é o mais correto.

QI1B

A média de acertos calculada foi 2,05 e 19,0% dos estudantes não responderam à questão. Conforme as respostas:

- 33,3% dos estudantes responderam que a representação mais correta é do modelo quântico;

Com 9,52% cada, ficaram as quatro repostas: modelo de Thomson, o modelo atual, o modelo de partícula-onda e nenhum modelo é o mais correto.

QI3

A média obtida pela turma foi 2,30 e 10,0% dos estudantes não responderam à questão. Segundo as respostas:

- 35,0% dos estudantes afirmaram que o modelo quântico é o mais correto;

- 15,0% dos estudantes responderam que o modelo de Bohr é o mais correto.

QQ

A média da turma foi 2,08 e 16,7% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Conforme a análise:

- 25,0% dos estudantes consideram o modelo quântico mais correto;

- 16,7% dos estudantes responderam que o modelo de Bohr é o mais correto;

- 16,7% dos estudantes afirmaram que o modelo de Rutherford é o mais correto.

Considerando todos os estudantes, a média para essa questão foi 2,15. Para 29,3% dos estudantes, o modelo quântico é o mais correto. Essa resposta está correta. Contudo, os modelos de Rutherford e de Bohr foram considerados mais corretos por 10,7 e 12,0% dos estudantes, respectivamente. É importante notar que mesmo a frequência de representações quânticas sendo maior, ainda é pequena. Como comentado anteriormente, essa pergunta pode ter sido interpretada de forma errada pelos estudantes devido ao enunciado da questão, portando, os resultados também podem estar comprometidos.

2d – Ao responder à questão c), o que você entende por correto?

Resposta esperada: correto é algo provado experimentalmente; aceito por convenção; mais próximo da realidade; tem uma base teórica robusta capaz de explicar fenômenos.

Q11A

A média de acertos para essa turma foi 2,27 e 36,4% dos estudantes não responderam à questão. Conforme a análise de conteúdo:

- 45,4% dos estudantes responderam corretamente, como: “*entendo como uma convenção daquilo que mais representa uma determinada coisa*”;
- 18,2% dos estudantes não compreenderam à pergunta, visto que as respostas não são coerentes com a pergunta, como “*não sabemos se está correto, mas sim que muita coisa desenvolvida até hoje em cima desse modelo deu certo*” ou “*o elétron está em volta de um núcleo que concentra toda a massa*”. Possivelmente, os estudantes responderam o que seria correto na representação escolhida por eles na questão **2c**.

Q11B

A média calculada para a turma foi 2,24 e 33,3% dos estudantes não responderam à questão. Segundo as respostas:

- 42,8% dos estudantes responderam de forma correta, por exemplo: “*entendo por correto o que é mais aceito na comunidade acadêmica*” e “*cientificamente comprovado como real ou aproximado da realidade*”;
- 14,3% dos estudantes interpretaram de outra forma a pergunta, como: “*que existem vários elétrons flutuando entre si*”.

Q13

A média calculada para a turma foi 2,85 e 20,0% dos estudantes não responderam à questão. De acordo com as respostas:

- 60,0% dos estudantes responderam corretamente, por exemplo: “*mais adequado ao que se observa, calcula, testa, mede, etc.*” e “*que foi testado, não refutado e/ou discordado*”;
- 10,0% dos estudantes interpretaram que é o mais atual: “*o mais atualmente utilizado para explicar os fenômenos estudados*”.

QQ

A média de acertos para essa turma foi 3,00 e 16,7% dos estudantes não responderam à questão. Conforme as respostas:

- 66,7% dos estudantes responderam corretamente, como: “*o que é mais aceito atualmente e que representa melhor a realidade*”;

- 8,33% dos estudantes comentaram que o modelo atual, como: “*a representação correta é a mais atualizada, mais sofisticada e complexa*”. Essa resposta está apenas parcialmente correta, porque algo correto não precisa ser necessariamente mais sofisticado ou complexo;

- 8,33% dos estudantes interpretaram de forma diferente a pergunta, por exemplo: “*Bohr pois sugere a ideia que os elétrons se movem em torno do núcleo*”.

Considerando todos os estudantes, a média de acertos para essa pergunta foi 2,53. Cerca de 39,0% dos estudantes responderam satisfatoriamente à pergunta. Contudo, 10,0% deles interpretaram de forma diferente a pergunta. Os estudantes possivelmente entenderam que a pergunta **2d** estava se referindo ao motivo de eles terem escolhido aquela representação como correta para a resposta da questão **2c**. Infelizmente o enunciado da questão prejudicou os resultados.

7 – A figura abaixo (**Figura 16**) mostra quatro representações para o átomo de hélio. Use-a para responder às questões a) e b) a seguir.

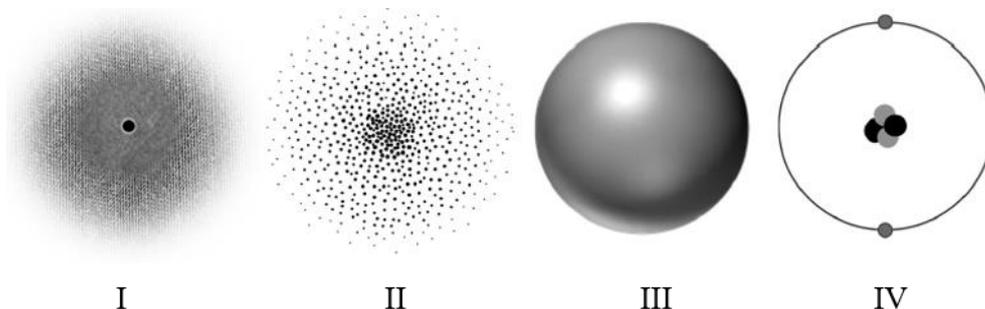


Figura 16. Diferentes representações para o átomo de hélio²¹

7a – Qual representação na figura você imagina em sua mente quando pensa no átomo de hélio?

Resposta esperada: os modelos I e II.

Como a questão é objetiva, os resultados são apresentados na **Tabela 9**.

Tabela 9. Distribuição das respostas para cada turma (questão 2a)

Representação	Porcentagem				
	Q11A	Q11B	Q13	QQ	Total
I	27,3	23,8	45,0	50,0	34,7
II	9,10	23,8	15,0	8,33	14,7
III	4,54	9,52	0	0	4,00
IV	59,1	33,3	40,0	41,7	44,0
Estudantes que não responderam	0	9,53	0	0	2,67

A média de acertos total foi 3,36, contrastando com a média da questão **2a** (2,45). As representações mais preferidas foram IV e I, enquanto que a menos preferida foi III. Allred e Bretz²¹ apresentaram resultados similares para a mesma questão, entretanto a primeira e segunda representações mais preferidas foram I e IV, respectivamente. A representação IV é clássica, apresentando os dois elétrons do hélio de forma concreta. Essa é uma maneira recorrente dos estudantes de imaginarem os elétrons²². Essa questão permite reforçar a ideia de que os estudantes pensam no átomo de forma clássica. Analisando a concordância para as perguntas **7a** e **2a**, tem-se que 55,5% das respostas são semelhantes, entretanto, 33,3% dos estudantes responderam de forma diferente para uma das duas perguntas, sendo que, para a questão **7a**, eles selecionaram uma representação mais correta. Por outro lado, 11,1% dos participantes optaram por representações menos corretas para a questão **7a**. Para relacionar e analisar a concordância das duas questões, foram desconsiderados os estudantes que não responderam pelo menos uma das questões. Nesse sentido, é possível afirmar que os estudantes apresentam mais facilidade para questões que tenham as representações no enunciado do que as questões que eles devem descrever as representações.

7b – Qual representação na figura é o modelo mais apurado para o átomo de hélio?

Resposta esperada: os modelos I e II.

Como a questão é objetiva, os resultados são apresentados na **Tabela 10**.

Tabela 10. Distribuição das respostas para cada turma (questão 2b)

Representação	Porcentagem				
	Q11A	Q11B	Q13	QQ	Total
I	54,4	61,9	70,0	66,7	62,7
II	22,7	23,8	15,0	33,3	22,7
III	0	0	0	0	0
IV	18,2	9,52	15,0	0	12,0
Estudantes que não responderam	4,54	4,76	0	0	2,67

Para essa pergunta, a média de acertos foi 3,80. Considerando todos os estudantes, a representação considerada mais acurada foi I. A representação III não foi selecionada por nenhum participante. Aqui é possível perceber que os estudantes reconhecem um modelo quântico como mais correto do que um clássico, contudo eles continuam imaginando o átomo de forma clássica. A forma como os estudantes imaginam o átomo pode ser independente do conhecimento de conceitos quânticos⁷⁵.

De maneira geral, os grupos apresentaram um desempenho melhor para a CR. As médias para as CR e CQ são 2,81 e 2,01, respectivamente. A diferença entre as duas médias sugere que os estudantes tem maior capacidade de explicar sua compreensão por meio de representações, ilustrações e modelos, do que por meio de abordagens matemáticas ou puramente conceituais. O principal erro dos estudantes é imaginarem o átomo de forma clássica, principalmente através do modelo de Bohr. Segundo Greca e Freire Jr³⁹, os estudantes apresentam dificuldades em conseguir substituir o modelo de Bohr. Os autores sugerem, inicialmente, abordar a quântica de forma simples, trabalhando o conceito de probabilidade. Além disso, é preciso mostrar para os estudantes as vantagens da mecânica quântica em relação ao modelo de Bohr.

Com as respostas dos estudantes, foi possível perceber algumas dificuldades:

- Compreender que a Teoria do Orbital Molecular (TOM) se refere às moléculas;
- O elétron não assume o formato de orbital;
- Orbital não é uma região física no espaço, como uma caixa;
- A representação de nuvem eletrônica mostra a densidade de probabilidade. Os pontos não são elétrons propriamente ditos.

Para o Questionário 2

O Q2 foi respondido por 46 estudantes divididos em quatro três. A turma Q13 não pode participar do Q2.

Categoria Quântica (CQ)

2 – Represente, em termos de energia, a ilustração feita na questão 1.

A questão 1 pedia para que os estudantes desenhassem como eles imaginavam um átomo de lítio.

Resposta esperada: fazer uma ilustração de um diagrama de energia contendo dois patamares, representando os dois orbitais ($1s$ e $2s$).

QI1A

A média de certos da turma foi 1,38 e 43,8% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. De acordo com a análise de conteúdo:

- 18,8% dos alunos desenharam um átomo. Essa resposta está errada. A ilustração (I) da **Figura 17** é um exemplo;
- 18,8% dos estudantes desenharam um diagrama de energia com alguns erros (12,5%) ou corretamente (6,25%), como nos exemplos (II) e (III) da **Figura 17**, respectivamente.

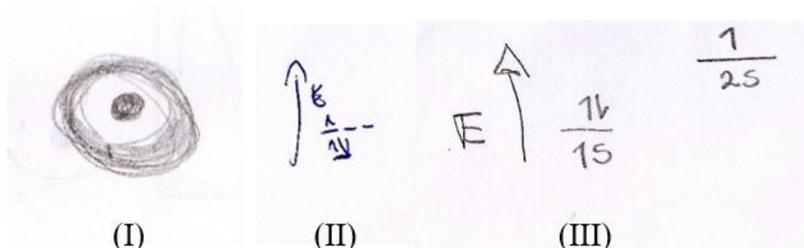


Figura 17. Exemplos de respostas para a questão 2 (QI1A)

Conforme a **Figura 17**, a resposta (II) está incorreta porque o estudante usou orbitais $2p$ no lugar de um orbital $2s$.

QI1B

A média de certos da turma foi 2,20 e 26,7% dos estudantes não responderam à questão. Segundo as respostas:

- 40,0% dos estudantes desenharam um diagrama de energia corretamente (33,3%) ou com alguns erros (6,67%), como nos exemplos (I) e (II) da **Figura 18**, respectivamente;

- 26,7% dos estudantes desenharam um diagrama de orbital molecular, como no exemplo (III) da **Figura 18**.

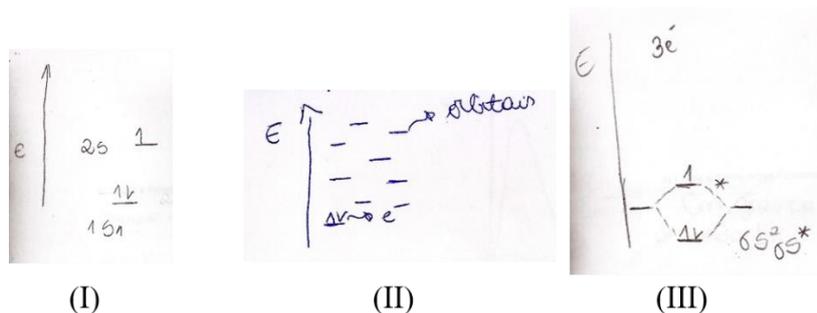


Figura 18. Exemplos de respostas para a questão 2 (Q11B)

QQ

A média de certos da turma foi 2,80 e 6,67% dos estudantes não responderam à questão. Conforme a análise:

- 66,7% dos estudantes desenharam um diagrama de energia corretamente (20,0%) ou com alguns erros (46,7%). Os erros foram semelhantes ao erro do exemplo (II) da **Figura 17**.

- 26,7% dos desenharam um diagrama de orbital molecular.

A média de acertos para essa questão foi 2,11. Para o Q1, a média para a questão envolvendo o mesmo tópico foi 2,55. É importante diferenciar que enquanto no Q1 a questão era objetiva e com quatro alternativas, no Q2 o estudante deve construir um diagrama. Considerando todos os estudantes, 21,7% deles desenharam um diagrama com pequenos erros, como comentado anteriormente, 19,6% desenharam um diagrama corretamente e, por fim, 19,6% desenharam um diagrama de orbital molecular. É possível perceber que os estudantes confundiram orbital molecular com orbital atômico e não houve evidência de retenção do conhecimento aprendido.

3 – Observe a **Figura 19**:

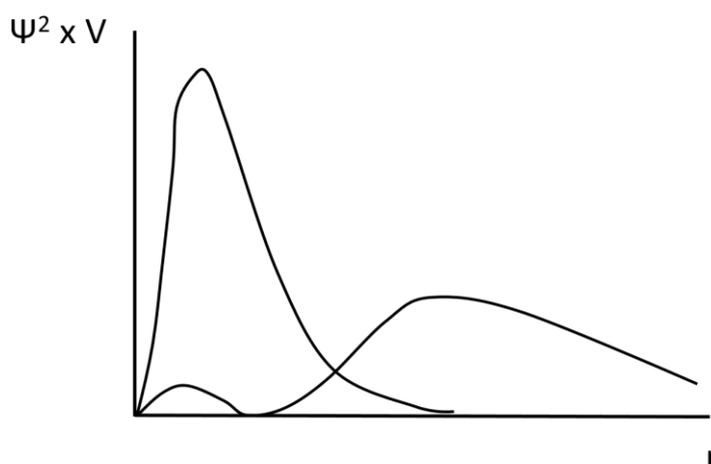


Figura 19. Gráfico do quadrado das funções de onda multiplicados pelo volume da região⁵²

3a – O que a figura acima representa?

Resposta esperada: a figura representa dois orbitais (*1s* e *2s*). Como pode ser visto por ψ^2 , o gráfico está relacionado com a densidade de probabilidade eletrônica.

Q11A

A média de acertos obtida pelo grupo foi 1,67 e 31,2% dos estudantes não responderam à questão. Segundo a análise de conteúdo:

- 18,8% dos estudantes relacionaram a figura com função de onda, mas de uma forma simples, como: “*função de onda dos orbitais*”. Essas respostas estão parcialmente corretas, mas é nítido que não existe uma compreensão claro de função de onda e orbital;
- 18,8% dos estudantes responderam de forma errada, por exemplo: “*dois átomos de diferentes raios e estruturas*”.

Cerca de 12,5% dos estudantes responderam corretamente, como: “*orbitais 1s e 2s (função de onda)*”. A resposta é correta, pois o estudante identifica que o gráfico representa orbitais e cita os orbitais.

Q11B

A média de acertos do grupo foi 1,53 e 40,0% dos estudantes não responderam à questão. De acordo com as respostas:

- 20,0% dos estudantes relacionaram a figura com função de onda, como: “*função de onda pelo raio*”. Novamente, esse tipo de respostas é muito simples, pois envolve a leitura dos eixos do gráfico.

- 20,0% dos estudantes responderam de forma correta, por exemplo: “*Função de onda dos orbitais 1s e 2s (densidades)*”. No trecho em que o estudante escreve “*função de onda dos orbitais*”, pode aparentar ligeiramente errado, porque um orbital é definido matematicamente como uma função de onda espacial de um elétron em um átomo, isto é, a resposta do estudante fica: o gráfico é uma função de onda de uma função de onda.

A diferença dessas respostas para as anteriores, é que para essas os estudantes indicaram os orbitais.

QQ

A média de acertos obtida pelo grupo foi 1,93 e 6,67% dos estudantes não responderam à questão. Conforme as respostas:

- 33,3% dos estudantes relacionaram a figura com função de onda, como: “*a função de onda em função da distância radial*”. Essas respostas são muito simples, visto que apenas evidenciam uma leitura dos eixos do gráfico apresentado;

- 26,7% dos estudantes relacionaram a figura com energia, como “*a energia dos orbitais*” e “*energia potencial em função da distância interatômica*”. Essas respostas estão erradas.

- 20,0% dos estudantes conseguiram relacionar o gráfico com os orbitais, contudo descreveram o orbital 2p no lugar do 2s, como: “*representa as funções de onda dos elétrons dos orbitais s e p*”.

A média total para essa pergunta foi 1,67. Considerando todos os estudantes, 23,9% deles relacionaram a figura com função de onda. Essas respostas precisam de um complemento para ficarem mais adequadas. Como no gráfico aparece a letra grega Ψ (Ψ), que é usada para função de onda, os estudantes provavelmente tentaram incluir tal termo em suas respostas. Por outro lado, 17,4% dos participantes responderam adequadamente, relacionando a figura com os dois orbitais do átomo de lítio. Por fim, 17,4% dos alunos relacionaram a figura com energia. É interessante que na figura não há nenhuma informação de energia, apenas volume, raio e densidade de probabilidade.

A figura da questão é apresentada no livro didático usado para as aulas das turmas de Química Inorgânica I⁵², ou seja, é muito provável que todos os participantes já a estudaram em algum momento do curso. Além disso, a turma de QQ também estuda o assunto em suas aulas.

3b – A figura pode ser relacionada com as ilustrações feitas nas questões 1 e 2? Explique.

Resposta esperada: as duas curvas da figura representam os orbitais atômicos $1s$ e $2s$ do lítio.

QIIA

A média obtida pela turma foi 1,56 e 37,5% dos estudantes não responderam à questão. De acordo com a análise:

- 25,0% dos estudantes responderam de forma errada ou confusa. Por exemplo: “*sim, representa em um momento o que foi pedido anteriormente, porém outra curva não faz sentido*” e “*para que o raio de um átomo de lítio diminua seria necessário perda da nuvem eletrônica*”;
- 18,8% dos estudantes responderam corretamente, como: “*sim, pois o lítio possui elétrons nesses dois orbitais ($1s$ e $2s$)*”.

QIIB

A média obtida pela turma foi 1,53 e 53,3% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Segundo as respostas:

- 13,3% dos estudantes responderam corretamente, como: “*sim, pois o lítio tem os orbitais $1s$ e $2s$* ”;
- 13,3% dos estudantes relacionaram a figura parcialmente com as questões 1 e 2. Por exemplo: “*sim, pois é a energia dos orbitais do Li* ”. Para essas respostas, faltou uma maior clareza, visto que na questão **1** os estudantes desenharam o átomo (e, provavelmente, os orbitais), enquanto que na questão **2** eles desenharam um diagrama de energia.

QQ

A média obtida pela turma foi 1,67 e 6,67% dos estudantes não responderam à questão. Conforme a análise:

- 40,0% dos estudantes responderam de forma errada ou confusa. Por exemplo: “*a função s não contém nós. A função p contém um nó. Considerando unidades atômicas, a função p tem maior energia*” e “*como a distância radial do centro da molécula definindo a energia*”;

- 26,7% dos estudantes responderam parcialmente certo, por exemplo: “*sim, tem relação com energia e orbitais atômicos*”.

A média para essa pergunta foi 1,59. Considerando todos os estudantes, 23,9% deles responderam de forma errada. Essas respostas não apresentam tendências. Por outro lado, 13,0% dos participantes responderam corretamente e outros 13,0% responderam de forma parcialmente correto. Apenas um estudante (2,17%) respondeu “não” e justificou: “*não, pois o lítio só possui orbitais s preenchidos. A curva 1 representa um orbital s (sem nós), já a curva 2 representa um orbital p (com nó) pois tem um mínimo de energia*”.

4 – O que você entende por função de onda?

Resposta esperada: função de onda é a descrição completa de um estado na mecânica quântica.

Q11A

A média de acertos para a turma foi 1,35 e 50,0% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Conforme a análise de conteúdo:

- 31,2% dos estudantes relacionaram função de onda com ondas da mecânica clássica. Por exemplo: “*a função de uma onda que se propaga em algum meio*” e “*energia que se propaga em determinada frequência e comprimento de onda*”. Com essas respostas, é possível afirmar que os estudantes não compreendem o conceito de função de onda.

Cerca de 6,25% dos estudantes responderam parcialmente certo: “*é a representação quântica do movimento dos elétrons*”. O termo “*movimento*” é perigoso, pois pode ser interpretado como um movimento clássico, isto é, pode ser um obstáculo de aprendizagem.

Q11B

A média de acertos calculada foi 1,12 e 53,3% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Segundo as respostas:

- 20,0% dos alunos relacionaram função de onda com probabilidade, como: “*número de estados em que um elétron pode se encontrar*” e “*probabilidade de onde a densidade do elétron pode estar*”. Essas respostas estão erradas. Existe uma relação entre uma função de onda e densidade de probabilidade, mas envolve a integral do módulo da função de onda ao quadrado em um determinado intervalo de posição²⁹.
- 13,3% dos estudantes relacionaram erroneamente com energia, como: “*função de onda é energia*”;
- 13,3% dos estudantes responderam corretamente: “*descreve o estado quântico das partículas*”.

QQ

A média de acertos para a turma foi 1,60 e 13,3% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Para essa turma:

- 26,7% dos estudantes relacionaram função de onda com ondas da mecânica clássica. Por exemplo: “*função de onda é quando a partícula apresenta características e respeita conceitos da parte de ondulatória*” e “*que é uma função que se repete ao longo do tempo. Tomei como exemplo $\sin x$ e $\cos x$* ”.
- 20,0% dos participantes responderam corretamente, como: “*a função de onda descreve o comportamento dualístico do elétron*”.

A média total para a pergunta foi 1,35. Considerando todos os estudantes, aproximadamente 19,6% deles entendem a função de onda sob a perspectiva da mecânica clássica de ondas. Nesse caso, os alunos pensam em uma função de onda como uma onda em uma corda, por exemplo. Por outro lado, 13,0% dos alunos conseguiram definir a função de onda corretamente. Outros 13,0% dos participantes apresentaram a ideia de que a função de onda é a probabilidade de encontrar o elétron. Esses resultados sugerem uma confusão sobre a relação entre o conceito de dualidade partícula-onda e função de onda. Formalmente, uma função de onda é a descrição matemática dessa dualidade²⁹, mas os alunos não foram capazes de fazer essa relação.

De forma geral, os estudantes apresentaram grandes dificuldades com a CQ. A média total para a categoria foi 1,68. Como comparação, no Q1 para a CQ, a média total foi 2,02, isto é, os estudantes apresentaram um desempenho ligeiramente pior no Q2.

Novamente, para facilitar a apresentação dos resultados, dividiu-se em tópicos de interesse.

Partícula-Onda

Esse tópico teve o objetivo de investigar o que os estudantes que participaram do Q2 entendiam por função de onda. Grande parte dos estudantes consideram a função de onda de forma clássica. Não é possível notar melhora entre os dois questionários para esse tópico. Função de onda é algo que os estudantes encontram com muita frequência quando estudam química quântica, logo, a dificuldade apresentada pelos estudantes é preocupante. Os conceitos que são fundamentais e visto constantemente devem ser compreendidos pelos estudantes.

Orbital

Os estudantes apresentaram dificuldades em relacionar o módulo da função de onda ao quadrado com a densidade de probabilidade e, conseqüentemente, com orbital. Novamente, não foi possível perceber melhora nesse tópico quando se comparam os dois questionários. De forma semelhante, Dick-Perez *et al.*⁸⁷ relatam uma diminuição de desempenho com os estudantes de graduação de cursos avançados de físico-química quando o pré-teste e o pós-teste são comparados. Além disso, notou-se que os estudantes têm dificuldade em diferenciar os orbitais atômicos de orbitais moleculares.

Diagrama de Energia

Grande parte dos estudantes conseguiu montar um diagrama de energia para o lítio de forma adequada ou contendo pequenos erros. Os estudantes não apresentaram melhoras no entendimento do diagrama de energia em relação aos dois questionários.

Categoria Representação (CR)

1 – Faça uma ilustração de como você imagina um átomo neutro de lítio (número atômico 3). Comente e/ou identifique na ilustração partes que considerar relevante.

Resposta esperada: átomo com um núcleo pequeno e, ao redor, uma nuvem eletrônica. (semelhantes às representações I e II da **Figura 16** **Erro! Fonte de referência não encontrada.**, mas considerando dois orbitais s).

A média calculada para a turma foi 2,06 e 6,25% dos estudantes não responderam. De acordo com a análise das respostas:

- 37,5% dos estudantes desenharam modelos quânticos, sendo 25,0% representações corretas e 12,5% representações com alguns erros. Os exemplos (I) e (II) da **Figura 20** mostram um modelo correto e um modelo com algum erro, respectivamente;
- 25,0% dos estudantes imaginam o modelo de Bohr, como o exemplo (III) da **Figura 20**.

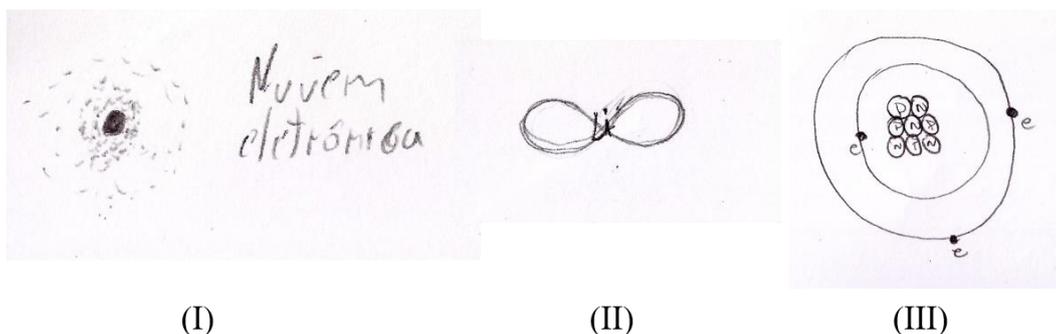


Figura 20. Exemplos de respostas para a questão 1 (Q11A)

Conforme o exemplo (II) da **Figura 20**, é possível identificar que o estudante não representou orbitais s , mas um orbital p . O correto seria representar dois orbitais s ($1s$ e $2s$).

Q11B

A média calculada para a turma foi 2,07 e 26,7% dos estudantes não responderam. Além disso, um estudante (6,67%) fez dois desenhos diferentes, impedindo a categorização. Para esse caso, preferiu-se classificar o estudante em uma categoria à parte e o ele recebeu o valor mínimo pela resposta. Conforme as respostas:

- 26,7% dos estudantes desenharam modelos quânticos, sendo 20,0% representações corretas e 6,67% representações contendo erros. Os exemplos (I) e (II) da **Figura 21** mostram um modelo correto e um modelo contendo erros, respectivamente;
- 20,0% dos estudantes imaginam o modelo de Rutherford, como o exemplo (III) da **Figura 21**.

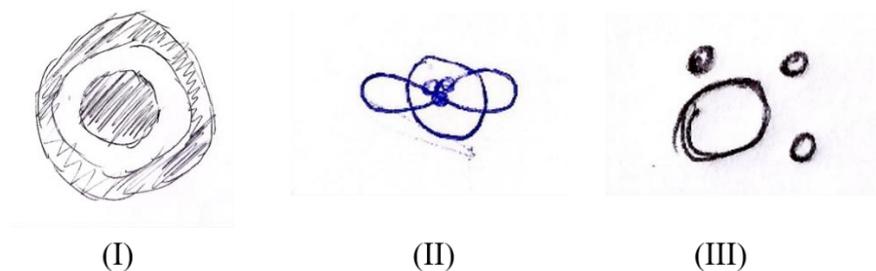


Figura 21. Exemplos de respostas para a questão 1 (Q11B)

O exemplo (I) da figura mostra um átomo com dois orbitais esféricos concêntricos ($1s$ e $2s$). O exemplo (II) é semelhante, contudo, o estudante trocou o orbital $2s$ por um $2p$. O exemplo (III) mostra um átomo com um núcleo muito grande (em relação ao átomo) e elétrons com a mesma distância ao núcleo, extremamente parecido com o sistema solar.

QQ

A média calculada para a turma foi 2,47. Todos os estudantes responderam à questão. Conforme a análise:

- 46,7% dos estudantes imaginam o modelo de Bohr, como o exemplo (I) da **Figura 22**;
- 33,3% dos estudantes desenharam modelos quânticos, sendo 20,0% representações corretas e 13,3% representações com falhas. Os exemplos (II) e (III) da **Figura 22** mostram um modelo correto e um modelo com falhas, respectivamente. No exemplo (II) o estudante representou a deslocalização dos elétrons nos dois orbitais s através de dois anéis pontilhados e concêntricos.

O exemplo (III) contém o mesmo erro do exemplo anterior, isto é, substituiu um orbital s por um orbital p .

A média de acertos para essa questão foi 2,20. Como comparação, a questão **2a** do Q1 perguntava “Qual representação de átomo vem primeiro a sua mente?” e a média de acertos foi 2,45. Um problema, que prejudicou no entendimento das ilustrações, foi a ausência de identificação das partes do átomo, pois dependendo da forma que o desenho é observado, um determinado círculo pode ser o núcleo ou a eletrosfera. No enunciado da questão foi inserido “Comente e/ou identifique na ilustração partes que considerar relevante” justamente para tentar evitar esse problema.

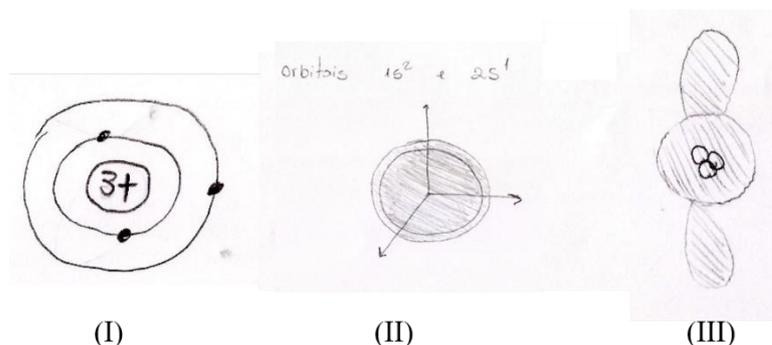


Figura 22. Exemplos de respostas para a questão 1 (QQ)

Considerando todos os estudantes, 32,6% deles fizeram representações quânticas, sendo que 10,9% continham alguns erros. O modelo de Bohr foi citado por 28,3% dos participantes. Comparando com o Q1, é possível perceber um aumento na quantidade de estudantes que imaginam o átomo com características quânticas. Para o Q1, 22,7 dos estudantes responderam com modelos quânticos e 28,0% com o modelo de Bohr. Com base nesses dados, é possível dizer que a quantidade de estudantes imaginando o átomo como o modelo de Bohr não foi alterada com o avanço no curso. Esse apego dos estudantes pelo modelo de Bohr pode ser devido a FMT, ou seja, os estudantes estão acostumados com esse modelo, já que é suficiente para responder muitos problemas em química e é mais simples que modelos quânticos⁵⁰. Tsapalis e Finlayson³⁸ sugerem que o modelo de Bohr seja evitado, pois os estudantes apresentam grandes dificuldades de superar esse modelo, gerando obstáculos de aprendizagem.

5 – Se for possível, relacione a ilustração feita na questão 1 com alguma característica macroscópica.

Resposta esperada: descrever os recursos na ilustração que causam ou afetam uma propriedade macroscópica, como:

- Modelo de Dalton: solubilidade, comportamento dos gases, mudanças de estado físico, diferentes densidades;
- Modelo de Thomson e Rutherford: o mesmo do anterior, eletricidade, corrente elétrica, atração/repulsão eletrostática;
- Modelo de Bohr: o mesmo dos anteriores, fogos de artifício, espectroscopia/espectrometria;

- Modelo quântico: o mesmo dos anteriores, efeito fotoelétrico, difração de partículas subatômicas, radioatividade (efeito túnel).

Como essa questão possibilitou que os estudantes respondessem com diferentes representações, contou-se o número total de respostas. Não responder também foi considerado uma resposta.

Q11A

A média de acertos para a turma foi 1,06 e 93,8% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Para a turma Q11A, foi obtida apenas uma resposta (6,25%) que considera uma característica microscópica e não macroscópica: “*Tamanho do átomo*”.

Q11B

A média de acertos para a turma foi 1,40 e 75,0% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. De acordo com a análise:

- 12,5% das respostas foram relacionando algo microscópico, como: “*ligação química das moléculas*”;
- 6,25% das respostas foram considerando algo macroscópico, mas sem uma explicação: “*densidade*”;
- 6,25% das respostas foram considerando uma característica macroscópica: “*a camada externa do átomo, por ter carga negativa, explica a terceira lei de Newton*”.

QQ

A média calculada foi 1,47 e 56,2% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à questão. Conforme a análise:

- 25,0% das respostas consideram características microscópicas, como: “*tem influência no raio das ligações, o que influencia na estabilidade do composto formado*”;
- 12,5% das respostas são confusas ou não relacionam com a resposta da questão 1. Por exemplo: “*podemos relacionar com ondas que se propagam em uma corda, estando ela fixa ou não*” e “*tamanho do núcleo tem relação com a massa*”. No primeiro exemplo, o estudante relaciona função de onda com uma onda em uma corda. No segundo exemplo, o tamanho do núcleo não afeta a massa macroscopicamente. Por exemplo, 1 kg de alumínio tem a mesma massa do que 1 kg de chumbo;

- 6,25% das respostas relacionam com algo macroscópico: “*Li tem só um elétron e é bem eletropositivo, assim, passa facilmente para o estado excitado - usado em fogos de artifício*”.

A média da questão foi 1,30. Cerca de 75,0% dos estudantes não responderam ou não sabiam responder à pergunta. Essa é questão menos respondida, resultando numa média baixa. Considerando todos os estudantes, 14,6% responderam, mas usando exemplos microscópicos. Apenas 4,17% dos estudantes responderam corretamente. Esses resultados mostram que os estudantes pensam apenas em características microscópicas quando imaginam um átomo e não na influência que aquelas características podem ter com o que se pode medir, ver ou sentir. Uma compreensão macroscópica das situações cotidianas é essencial para que as equações e os conceitos quânticos possam ter algum significado para os alunos¹⁰. Além disso, o átomo deve ser significativo e fazer sentido para o estudante. Para isso, ele deve ser relacionável com algo que já seja significativo para o estudante, como as situações cotidianas do aluno⁵⁹.

A média para a CR foi 1,75, ligeiramente superior à média da CQ, que foi 1,68. Como comparação, a média para a CR no Q1 foi 2,81. Nesse sentido, para a CR, as dificuldades dos estudantes ainda estão relacionadas com a dificuldade de pensar no átomo com características quânticas. Apesar de que ocorreu uma considerável melhoria desse ponto entre os dois questionários, é visível que o modelo de Bohr ainda é bastante considerado pelos estudantes. A outra dificuldade foi a relação do microscópico com o macroscópico. Johnstone¹¹⁻¹³ incentiva que os estudantes devem começar a aprender do macroscópico até o microscópico.

5.2. Parte 2 – Intervenção na disciplina Química Quântica

5.2.1. Etapa 1 – Descrição dos estudantes

Apesar da disciplina ter oficialmente 31 estudantes matriculados, apenas 27 deles responderam o documento no *Google Forms*. Esse documento contava com as seguintes questões.

Você gostaria de participar das aulas que abordarão partes conceituais da disciplina de Química Quântica?

A grande maioria (92,6%) respondeu que tinha interesse nas aulas.

Qual é seu curso?

- 59,3%: Bacharelado em Química Industrial;
- 37,0%: Bacharelado em Química;
- 3,70%: Licenciatura em Química.

Você tem acesso à internet?

96,3% dos estudantes tem acesso. Essa pergunta é importante visto que como as aulas foram *online*, fica implícito o acesso à internet para participar.

Qual dispositivo você usa para acessar à internet?

Computador/Notebook foi citado por 88,9% dos estudantes. O *smartphone* foi citado por 63,0% dos estudantes.

Qual o meio de comunicação você gostaria de usar?

O *e-mail* foi citado por 88,9% dos estudantes. O sistema de mensagens da plataforma *Moodle* foi citado por 55,6% dos estudantes.

Quais conceitos da química quântica você tem maior dificuldade?

- 85,2% dos estudantes citaram a Equação de Schrödinger;
- 55,6% dos estudantes citaram função de onda.

Com menos frequência: mecânica clássica vs. mecânica quântica; princípio da incerteza; partícula-onda; modelo atômico e orbitais.

O que você gostaria de aprender em química quântica?

- 81,5% dos estudantes mencionaram “aplicações”;
- 63,0% deles citaram “comprovações experimentais”;
- 44,4% deles escolheram “interpretações”.

Por fim, os estudantes poderiam deixar comentários. Alguns estudantes pediram uma revisão de conteúdo. Como alguns estudantes matricularam-se após as duas semanas e meia de aulas presenciais e também porque os estudantes ficaram alguns meses sem

aulas, foi marcada uma aula de revisão. As aulas aconteceram no horário original da disciplina: quinta-feira às 20h30 até 21h30.

5.2.2. Etapa 2 – Aulas ministradas

Semana 1

Aula 1

A aula teve a participação de 24 estudantes e a gravação da aula teve 42 visualizações. O objetivo dessa aula foi discutir como os estudantes imaginam um átomo, relacionando essa representação com a química clássica e quântica. A ideia era tentar afastar modelos clássicos de modelos quânticos para o átomo. Antes do início da aula propriamente dita, foi feita uma breve apresentação do professor auxiliar, o tema da pesquisa de mestrado, a justificativa para as aulas e como as aulas ocorreriam.

A metodologia usada foi uma adaptação de *think-pair-share*. Inicialmente os estudantes foram incentivados a pensarem sobre as questões abaixo e responderem de forma individual. As respostas para essas perguntas foram fornecidas através do *Google Forms* em até 5 minutos:

- 1 – Descreva como você imagina um átomo neutro de Lítio ($Z=3$).
- 2 – Essa representação é a mais correta do átomo?
- 3 – O que você entende por correto?

Após esse intervalo, os estudantes compartilharam suas ideias com outros estudantes em sete pequenos grupos. As respostas dos grupos foram fornecidas via *chat* privado do MConf e, subsequentemente, cada grupo compartilhou com a turma as suas respostas verbalmente. Com base nas respostas dos estudantes, é possível separá-las em individuais e em grupo.

- 1 – Descreva como você imagina um átomo neutro de Lítio ($Z=3$).

Dentre as respostas, as mais frequentes foram:

Individual:

- 40,7% das respostas foram clássicas. Dessas, 90,9% são respostas considerando um núcleo com prótons e nêutrons, em que ao redor estão os elétrons em órbitas/camadas/eletrosfera, como: “*Um núcleo composto por prótons e nêutrons, e em volta a eletrosfera, com os elétrons, em camadas*”. Nenhum dos estudantes considerou a deslocalização dos elétrons;

- 37,0% das respostas foram quânticas. Dessas, 90,0% consideram o núcleo com prótons e nêutrons e com os elétrons em uma nuvem eletrônica/orbitais, como: *“um átomo pequeno, com uma nuvem eletrônica espalhada com os elétrons”*. Com base nas respostas, fica subentendida a deslocalização dos elétrons.

Grupo:

Apenas um grupo dos sete apresentou uma resposta considerando características clássicas. Contudo, todos os grupos mencionaram respostas com aspectos quânticos para o átomo de lítio, por exemplo: *“O átomo de lítio é composto por um núcleo envolvido por uma nuvem eletrônica, a qual tem a carga oposta a carga total do núcleo, que é constituído por prótons e nêutrons, sendo então um átomo neutro”*. É possível perceber que, após a discussão entre os integrantes dos grupos, os estudantes concordaram mais com características quânticas, visto que nas respostas individuais a maioria descreveu o átomo de forma clássica.

2 – Essa representação é a mais correta do átomo?

As repostas mais frequentes foram:

Individual:

- 37,0% dos estudantes disseram não;
- 18,5% dos alunos disseram sim.

Grupo:

Quatro respostas dizendo não. Duas respostas dizendo sim. O outro grupo considerou que *“depende do que queira ser analisado”*.

3 – O que você entende por correto?

As repostas mais frequentes foram:

Individual:

- 51,8% das respostas foram coerentes (mais aceito, comprovado, adequado à realidade);
- 22,2% das respostas foram inadequadas, como *“que a ‘nuvem eletrônica’ é na verdade as posições probabilísticas dos elétrons”*.

Grupo:

Seis dos sete grupos responderam adequadamente. Após a discussão, as repostas dos estudantes convergiram para afirmações mais corretas, como “*O que mais se aproxima da verdade, explicando com mais exatidão o que ocorre naturalmente*”. As repostas fornecidas verbalmente pelos grupos para a turma foram exatamente as mesmas enviadas para o professor auxiliar. Apenas um grupo não se manifestou sobre suas respostas. Esse grupo apresentou respostas muito discrepantes do que estava sendo perguntado e, provavelmente, perceberam essa discrepância conforme os outros grupos falavam. Um exemplo de resposta desse grupo para a pergunta 3: “*acreditamos que a definição de um átomo neutro de Lítio ($Z=3$) depende do modelo atômico utilizado, porém, de forma mais simples e objetiva, pode dizer que o correto é um núcleo massivo com 3 prótons e 3 nêutrons, com 3 elétrons orbitando em orbitais 's' de formato esférico*”.

Com base nas respostas dos estudantes, o professor auxiliar fez mais alguns questionamentos para os estudantes com o objetivo de gerar mais discussões, por exemplo:

– O modelo proposto pelos estudantes consegue explicar algo do dia-a-dia (algo que podemos ver, medir, sentir)?

Nenhum estudante se manifestou.

– Com base na segunda pergunta, se a representação imaginada pelos estudantes não é a mais correta, qual é o motivo deles imaginarem daquela forma?

As respostas foram: por falta de estudo; são mais fáceis de imaginar; por ser o primeiro contato no ensino fundamental e médio; porque existem conceitos que ainda não foram aprendidos.

Também foram feitas algumas correções das respostas dos estudantes, como por exemplo, o lítio neutro no estado fundamental não tem elétrons em orbitais p .

O único problema durante a aula foi no momento de separar os estudantes em pequenos grupos. O MConf possui uma ferramenta de criação de sala. A ideia foi deixar os estudantes escolherem seus grupos e isso usou muito tempo de aula. Isso poderia ser evitado se fosse utilizado a opção de separar os estudantes nas salas de forma aleatória.

Semana 2

Aula de Revisão

A aula contou com a participação de 20 estudantes e a gravação da aula teve 28 acessos. O objetivo dessa aula foi apresentar os conteúdos de química quântica ministrados de forma presencial antes da pandemia, de forma que todos alunos matriculados na turma obtivessem o mesmo conhecimento prévio. Foram abordados os seguintes conteúdos: efeito fotoelétrico, dualismo partícula-onda, equação de Schrödinger, equações de valores próprios e função de onda. A metodologia empregada foi a tradicional com a apresentação dos conteúdos através de deduções matemáticas.

Aula 2

Dos 31 estudantes matriculados na disciplina, apenas quatro participaram dessa aula. A gravação da aula teve 14 acessos. Os objetivos dessa aula foram finalizar as discussões da Aula 1, com base na análise das respostas, e trazer outros questionamentos de conceitos importantes usados pelos estudantes e que estão no polígrafo da disciplina. A metodologia usada foi a *think-pair-share*.

Inicialmente foram apresentados os resultados das respostas da turma para os três questionamentos da Aula 1. Após isso, foram expostas algumas representações de densidade de probabilidade de alguns orbitais para evidenciar que o orbital $2s$ apresenta um nó entre as duas esferas concêntricas de densidade de probabilidade. Em seguida, foram mostradas algumas representações de modelos atômicos e quais relações são possíveis de fazer com características macroscópicas.

Em seguida, foi realizada outra atividade, em que os estudantes deveriam pensar sobre as questões abaixo e respondê-las de forma individual:

1 – O que você entende pelas propriedades de partícula e onda de prótons, nêutrons e elétrons?

2 – O que você entende por nuvem eletrônica?

3 – Com base no que você sabe, por que não ocorre o colapso entre os elétrons e os prótons (núcleo)?

As respostas para essas perguntas foram fornecidas através do *Google Forms* em até 5 minutos. Logo após, os estudantes compartilharam suas ideias com outros estudantes em dois grupos. As respostas dos alunos foram enviadas via *chat* privado do MConf e cada grupo compartilhou com a turma suas respostas de forma verbal.

Novamente, as respostas são divididas em individuais e em grupo:

1 – O que você entende pelas propriedades de partícula e onda de prótons, nêutrons e elétrons?

Individual:

Três estudantes concordam que os prótons, nêutrons e elétrons são explicados/têm comportamento/tem característica de partícula e onda. O outro estudante respondeu que apenas os elétrons apresentam esse comportamento e isso depende do observador.

Grupo:

Grupo 1: separação do comportamento partícula/onda de nêutrons, prótons e elétrons. Para os estudantes, apenas os elétrons têm o comportamento dualístico, enquanto que os prótons e nêutrons são entendidos como partículas.

Grupo 2: os prótons, nêutrons e elétrons apresentam o comportamento de partícula e onda, contudo, o comportamento depende do fenômeno e da condição que são estudados.

É possível perceber que, após a discussão, o consenso a que o Grupo 1 chegou considera que apenas o elétron tem o comportamento de partícula e onda, apesar de um estudante pensar dessa forma de forma individual, o que significa que esse estudante convenceu sua dupla do grupo.

2 – O que você entende por nuvem eletrônica?

Individual:

Três dos quatro estudantes responderam que a nuvem eletrônica é uma região em que a probabilidade de encontrar os elétrons é maior. O outro estudante respondeu algo semelhante, mas usando apenas conceitos clássicos, ou seja, sem mencionar probabilidade: “*eletrosfera. Região externa ao átomo, onde se localizam os elétrons*”

Grupo:

Grupo 1: “*a nuvem eletrônica é uma região de probabilidade na eletrosfera onde se localizam os elétrons*”.

Grupo 2: “*regiões do átomo com uma probabilidade de encontrar elétrons*”.

Ambos os grupos convergiram para uma resposta mais adequada, ou seja, considerando a probabilidade para descrever a nuvem eletrônica. Essa é uma ideia quântica que se distancia da concepção determinista de modelos clássicos.

3 – Com base no que você sabe, por que não ocorre o colapso entre os elétrons e os prótons (núcleo)?

Individual:

Dois estudantes responderam corretamente. Um deles considerou os níveis de energia e que níveis de energia muito próximos do núcleo são proibidos. O outro respondeu que não existe probabilidade de encontrar elétrons no núcleo devido às características da função de onda. Entretanto, os outros dois estudantes apresentaram respostas incorretas: um deles pensou que o elétron não sofre atração eletrostática devido à dualidade partícula-onda. O outro estudante mencionou a força de coesão do núcleo que é de sentido contrário à força eletromagnética.

Grupo:

Grupo 1: no contexto atômico, o elétron age como onda, assim não sofre a força eletrostática.

Grupo 2: a área mais próxima do núcleo seria uma região proibida, os elétrons orbitam com uma quantidade fixa de energia. Apenas o Grupo 2 conseguiu expressar uma resposta adequada.

De forma geral os estudantes conseguiram trocar ideias, mas como a quantidade de estudantes era pequena, não foi possível perceber uma melhora entre as respostas individuais e em grupo.

Por fim, o professor auxiliar fez alguns comentários sobre pequenos equívocos:

- A característica partícula-onda não ocorre apenas com os elétrons e esse conceito é dualístico, ou seja, o sistema apresenta ambos os comportamentos;
- A nuvem eletrônica representa a densidade de probabilidade, isto é, os elétrons estão espalhados na nuvem. Os pontos, em uma representação de densidade de probabilidade, identificam a probabilidade. Se a probabilidade de o elétron estar em um determinado local é maior, a quantidade de pontos também é maior;

– A ideia de colapso do elétron com o núcleo surge de falhas de modelos clássicos.

Também foram levantadas algumas questões pelo professor auxiliar:

- A nuvem eletrônica é apenas uma casca de uma esfera ou preenche toda o volume de uma esfera?
- Como os prótons e nêutrons se mantêm unidos no núcleo?

Infelizmente não ocorreu uma discussão entre os estudantes, mas ao final da aula alguns estudantes comentaram que a aula com menos pessoas é mais organizada e possibilita que possam se expressar melhor. De forma geral, a aula ocorreu como planejada. A pequena quantidade de estudantes por um lado prejudica a troca de ideias e a discussão entre os estudantes, mas também incentiva os estudantes mais introvertidos a participarem da aula. É interessante também que como são poucos estudantes, são poucas também as respostas, dessa forma o professor pode analisar as concepções dos alunos e encaminhar a aula de uma forma mais eficiente.

Semana 3

Como a quantidade de alunos na Aula 2 diminuiu, o professor auxiliar optou por uma aula mais tradicional com a finalidade de atrair mais estudantes que, eventualmente, estivessem resistentes a uma mudança de metodologia. Nesse sentido, foi enviado um segundo questionário para os estudantes com o objetivo de obter um *feedback* das aulas. A ideia do questionário foi tentar compreender como os estudantes gostariam que as aulas fossem conduzidas. As respostas ao questionário indicaram uma preferência dos alunos por metodologias tradicionais de ensino.

Dos 31 alunos, apenas 14 responderam. O documento continha as seguintes questões:

O dia (quinta-feira) dos encontros é adequado?

A grande maioria (11 alunos) concordou que o dia era adequado.

O horário (20h30) dos encontros é adequado?

Nove estudantes responderam que concordam ou concordam parcialmente. Por outro lado, três estudantes marcaram “discordo” ou “discordo parcialmente”.

É importante salientar que os estudantes, quando se matriculam, estão de acordo com os dias e horários das aulas. Nesse sentido, as duas primeiras perguntas do questionário não deveriam apresentar discordância, isto é, o problema da baixa participação não deveria ser em razão do dia ou horário das aulas.

A discussão da parte conceitual ajuda no entendimento da química quântica? Selecione "Não se aplica" caso não tenha participado ou assistido às aulas.

Cinco estudantes marcaram “não se aplica”. Outros cinco concordam ou concordam parcialmente. Dois estudantes discordaram ou discordaram parcialmente.

A metodologia aplicada nos encontros é adequada para trabalhar conceitos de química quântica? Selecione "Não se aplica" caso não tenha participado ou assistido às aulas.

Quatro estudantes marcaram “não se aplica”. Para essa questão, cinco estudantes discordam ou discordam parcialmente. Três estudantes concordam parcialmente. A metodologia ativa usada na Aula 1 e Aula 2 é uma forma não-convencional de abordar conceitos de determinados assuntos, contudo os estudantes têm pouco ou quase nenhum contato com esse tipo de metodologia durante a graduação, dificultando a aplicação de métodos ativos.

Os experimentos apresentados nos encontros ajudam no entendimento da química quântica? Selecione "Não se aplica" caso não tenha participado ou assistido às aulas.

Quatro estudantes marcaram “não se aplica”. Sete estudantes concordam ou concordam parcialmente. Três estudantes discordam ou discordam parcialmente. Apesar dos experimentos serem apresentados através de *slides*, espera-se que o uso de uma abordagem que contextualiza a teoria com o experimento contribua com o entendimento dos conceitos.

Em que dia os encontros poderiam acontecer? Você pode selecionar mais de um.

Para essa pergunta, todos os estudantes responderam quinta-feira, ou seja, o dia em que estavam acontecendo as aulas.

Em que horário os encontros poderiam acontecer? Você pode selecionar mais de um.

Assim como na pergunta anterior, a grande maioria respondeu que o horário mais adequado seria o horário em que as aulas já estavam acontecendo. Com isso é possível

concluir que tanto o dia como o horário já estabelecidos estão de acordo com a preferência dos estudantes.

O que você gostaria que fosse abordado nos encontros?

Para essa pergunta, apareceu em oito respostas que as aulas deveriam abordar os conteúdos do polígrafo da disciplina ou então os documentos do estudo dirigido enviados pelo professor titular. Esses documentos guiam os estudantes para os temas que devem estudar no polígrafo. A abordagem de conceitos e fenômenos da química foram citados quatro vezes. Por fim, exercícios e a resolução de exercícios foram citados três vezes.

O polígrafo da disciplina conta com uma lista com exercícios de cada parte do conteúdo e todos os exercícios possuem as respectivas soluções.

Com base na sua resposta anterior: como você gostaria que fosse abordado?

A resposta mais frequente apareceu cinco vezes. Os estudantes gostariam que as aulas fossem de forma tradicional e matemática, assim como ocorreu com a Aula de Revisão e a Aula 3. As outras respostas não apresentaram uma convergência, mas entre elas estão o uso de *slides* e atividades rápidas e diretas.

Foi disponibilizada no documento uma caixa para comentários: dois estudantes pediram que as aulas fossem gravadas, que seria melhor para participar das aulas. Todas as aulas foram gravadas e disponibilizadas para *download* ou *streaming*. Um estudante comentou que iria participar das aulas se os conteúdos do polígrafo fossem abordados. Outro estudante comentou de problemas com a conexão, que é algo muito importante para o ERE. Por fim um estudante comentou que acredita que a baixa participação dos estudantes se deve ao acúmulo de muitas outras tarefas e como as aulas são extras, não são a prioridade.

Com base nesses dados, os encontros foram modificados para atender melhor os estudantes. Dessa forma, as aulas seriam baseadas nos documentos de estudo dirigido do professor titular e concentradas no método tradicional. Para evitar o cansaço dos estudantes, pretendeu-se a duração máxima de 1 hora por aula. O dia e o horário seriam mantidos. Como método ativo, foi usado o *Peer Instruction* durante algumas aulas.

Aula 3

Apenas três estudantes assistiram a aula de forma síncrona. A gravação da aula teve cinco acessos. A aula ocorreu de forma tradicional. Os objetivos dessa aula foram explicar o efeito túnel e apresentar um experimento que mostra a dualidade partícula-onda. Para falar sobre o efeito túnel, primeiro foi apresentado o modelo de partícula na caixa. Com isso, discutiu-se com os estudantes sobre quais informações podem ser obtidas da energia de uma partícula na caixa, como: a existência de uma energia mínima; a relação do comprimento da caixa com a estabilidade de moléculas com ligações π conjugadas. Para exemplificar o efeito túnel, usou-se a emissão de radiação alfa. Por fim, apresentou-se para os estudantes o experimento com o Interferômetro de Mach-Zender.

Semana 4

Aula 4

A gravação dessa aula teve 12 acessos, mas apenas quatro desses estudantes participaram da aula de forma síncrona. O objetivo dessa aula foi abordar aspectos de espectroscopia e densidade de probabilidade utilizando o modelo da partícula na caixa. Também foi ampliada a discussão da partícula na caixa para três dimensões, ou seja, a partícula em um cubo. A aula ocorreu de forma tradicional, com o conteúdo totalmente baseado no polígrafo da disciplina. Como em algumas aulas seria usada a metodologia ativa *peer instruction*, na Aula 4 optou-se por trazer, pela primeira vez, o uso do recurso de enquete, para que os alunos dessem sua contribuição com as perguntas do professor. Dessa forma eles estariam mais preparados para a dinâmica da *peer instruction*.

Semana 5

Aula 5

Para essa aula, a gravação teve quatro acessos, sendo que dois estudantes estavam no momento da gravação da aula. Os objetivos da aula foram apresentar aos estudantes o modelo do oscilador harmônico e discutir alguns dos postulados da mecânica quântica. A aula foi conduzida de forma tradicional, usando apenas *slides*.

Semana 6

Aula 6

A gravação da aula teve três acessos e apenas dois alunos participaram da aula síncrona. Os objetivos dessa aula foram iniciar a discussão do rotor rígido e revisar

conceitos prévios utilizando a metodologia *peer instruction*. Para a aplicação da *peer instruction*, foram elaboradas três questões objetivas com suas respectivas alternativas.

A atividade foi realizada da seguinte forma:

- Inicialmente foi explicado como seria a dinâmica. Após a concordância dos estudantes, o professor deu início à atividade;
- A questão 1 foi projetada e junto dela foi criada uma enquete com as letras de cada alternativa;
- Os alunos deveriam ler, pensar e selecionar a alternativa que julgavam correta de forma individual;
- O professor desligou o áudio para que os alunos pudessem conversar sobre a questão entre eles;
- Após a sinalização que os estudantes já haviam decidido, foi aberta novamente uma enquete em que cada aluno respondeu individualmente;
- O professor apenas mostrou qual era a alternativa correta;
- Ocorreu o mesmo processo para a questão 2 e 3;
- Ao final, ocorreu uma discussão das questões e alternativas com base nas respostas dos estudantes.

Para essa dinâmica, a gravação da aula foi interrompida para que os estudantes não se sentissem constrangidos.

É possível separar as respostas da atividade *peer instruction* em antes e depois da interação entre os estudantes, lembrando que apenas dois estudantes participaram da atividade:

1 – O que se pode dizer da equação de Schrödinger?

- (A) Com ela, obtém-se a probabilidade de encontrar um sistema quântico.
- (B) A solução fornece informações do hamiltoniano, como momento linear.
- (C) A solução fornece a função de onda.
- (D) Não sei.

Antes da interação:

Foram escolhidas as alternativas (A), “Com ela, obtém-se a probabilidade de encontrar um sistema quântico”, e (C), “A solução fornece a função de onda”. A alternativa correta é (C). A alternativa (A) foi criada com base nas repostas dos estudantes da Parte 1 deste trabalho.

Depois da interação:

A discussão dos estudantes demorou cerca de dois minutos e meio. Ambos escolheram a alternativa (C). Como eles já conheciam a pergunta, as alternativas e acreditavam que uma das alternativas era a correta, o tempo de conversa deve ter sido usado para cada aluno falar um pouco sobre seu ponto de vista. Ao final da interação, os estudantes chegaram em uma conclusão, nesse caso, um convenceu o outro que a alternativa correta era a (C).

2 – O que é função de onda?

- (A) Probabilidade de encontrar um sistema quântico.
- (B) Descreve a energia do sistema quântico.
- (C) Descreve completamente o sistema quântico.
- (D) Descreve um orbital.
- (E) Não sei.

Antes da interação:

Foram escolhidas as alternativas (A), “Probabilidade de encontrar um sistema quântico”, e (B), “Descreve a energia do sistema quântico”. A alternativa correta é (C) “Descreve completamente o sistema quântico”. Nesse caso, ambos os estudantes escolheram alternativas incorretas.

Depois da interação:

Novamente os estudantes discutiram durante cerca de dois minutos e meio. Após a discussão, a alternativa escolhida por ambos foi (E), “Não sei”. Essa resposta é coerente, visto que nenhum dos dois estudantes conseguiram responder de forma correta individualmente, indicando que eles não sabiam a resposta. As alternativas incorretas para essa pergunta também foram retiradas das respostas da Parte 1 deste trabalho.

3 – Para os operadores momento linear e posição:

$$\hat{p} = -i \hbar \frac{d}{dx} \quad \hat{x} = x$$

- (A) Comutam.
- (B) Não comutam.
- (C) Não sei.

Para a questão 3, havia na projeção algumas equações para ajudar os estudantes a realizarem os cálculos para verificar a comutação.

Antes da interação:

Para essa questão, ambos os estudantes escolheram a alternativa (A) “Comutam”. Contudo, a alternativa correta é (B) “Não comutam”.

Depois da interação:

A discussão entre os estudantes durou três minutos. A conclusão foi a escolha da alternativa correta, ou seja, (B).

Após a atividade, cada questão foi discutida com a finalidade de resolver dúvidas. A questão 1 não apresentou problemas, visto que após a dinâmica os estudantes escolheram a alternativa correta. Contudo, ocorreram questionamentos pelos estudantes sobre a probabilidade e a relação do operador hamiltoniano com observáveis. A questão 2 mostrou algo um pouco perturbante, visto que a função de onda foi algo trabalhado em praticamente todas as aulas. A ideia de fazer esse questionamento foi exatamente verificar se os estudantes compreendem o que é função de onda. Segundo os próprios estudantes, eles estavam em dúvida de qual alternativa seria a correta e por isso preferiram selecionar a alternativa (E), “Não sei”. Essa questão possibilitou também a oportunidade de falar melhor da relação entre função de onda e orbital, porém essa discussão só foi feita, de forma mais completa, após a apresentação do átomo de hidrogênio em que a função de onda era para um elétron. A questão 3 foi respondida com base no cálculo de comutação. Entretanto, a ideia dessa questão era pensar no princípio da incerteza. Dessa forma foi discutido um pouco sobre o princípio.

Semana 7

Aula 7

A aula síncrona não foi gravada, por isso não é possível saber quantas pessoas assistiram. Contudo, uma gravação da aula foi disponibilizada para que os outros estudantes que não estavam na aula pudessem assistir. O número de acessos para essa gravação foi zero. O objetivo dessa aula foi continuar a discussão do rotor rígido e relacionar com a espectroscopia rotacional. A aula foi realizada de forma tradicional.

Semana 8

Aula 8

A aula foi realizada de forma síncrona, contudo, nenhum estudante assistiu. A gravação da aula teve quatro acessos. A aula foi realizada de forma tradicional. O objetivo da aula foi iniciar a discussão do átomo de hidrogênio.

Semana 9

Aula 9

A aula foi realizada apenas de forma assíncrona, isto é, para a Aula 9 os estudantes tiveram acesso apenas à gravação. A gravação teve apenas um acesso. Os objetivos da aula foram discutir de forma mais efetiva a relação entre orbital e função de onda. Também foram apresentados dois métodos aproximativos (Método Variacional e Teoria de Perturbação). A aula foi realizada de forma tradicional.

Semana 10

Aula 10

A gravação da aula teve três acessos e apenas dois estudantes assistiram de forma síncrona. O objetivo dessa aula foi apresentar o átomo de hélio. A aula foi realizada de forma tradicional.

Semana 11

Aula 11

O objetivo da aula foi discutir átomos multieletrônicos. Uma atividade utilizando a metodologia *peer instruction* havia sido planejada. Nenhum estudante assistiu à aula síncrona ou assíncrona. Dessa forma, não foi possível aplicar a atividade que estava planejada. A aula foi realizada de forma tradicional.

Semana 12

Aula 12

O objetivo da aula foi continuar a discussão de átomos multieletrônicos, utilizando a metodologia *peer instruction*, como planejado para a aula anterior. Nenhum estudante assistiu à aula, impedindo a aplicação da atividade. A gravação da aula teve apenas um acesso. A aula foi realizada de forma tradicional.

Semana 13

Aula 13

O objetivo da aula foi discutir a ligação química. Os estudantes tiveram acesso apenas à gravação. A gravação não teve acessos dos estudantes. A aula foi realizada de forma tradicional.

Semana 14

Nessa semana ocorreu a quarta prova dos estudantes no mesmo dia da aula, com isso, era esperado que nenhum estudante comparecesse à aula. Contudo, mesmo assim, o professor auxiliar preferiu deixar a gravação caso algum estudante precisasse estudar para a prova de recuperação.

Aula 14

O objetivo da aula foi discutir a Teoria do Orbital Molecular. O número de acessos da gravação foi zero. A aula foi realizada de forma tradicional.

Considerando todas as aulas, poucos estudantes fizeram questionamentos durante as aulas, mesmo com o professor auxiliar incentivando a participação e deixando claro que eles poderiam fazer perguntas. Quanto ao uso das metodologias ativas, os estudantes não se adaptaram ao método *think-pair-share*. Por outro lado, a *peer instruction* foi efetiva para discutir conceitos pontuais. Devido ao baixo número de participantes, não é possível avaliar se os estudantes apresentaram melhorias na aprendizagem devido ao uso desse método.

Conforme pode ser visto pelo relato de cada aula, a quantidade de estudantes foi muito pequena, mesmo após a adequação das aulas conforme a preferência dos estudantes. Em média, cada aula contou com dois estudantes assistindo de forma síncrona. Assim, foi aplicado um terceiro questionário para tentar entender os motivos da baixa adesão.

5.2.3. Etapa 3 – Feedback das aulas ministradas

O Questionário 3 foi aplicado ao final do semestre. Um estudante havia cancelado sua matrícula na disciplina e a turma ficou com 30 estudantes. Apenas 15 deles

responderam ao questionário. As perguntas e respostas do Questionário 3 são apresentadas abaixo.

1 – Você acredita que assistiu quantas aulas (incluindo as gravações)? Foram 14 aulas e uma Revisão.

Segundo os estudantes, a quantidade média de aulas assistidas foi entre cinco e seis. Isso mostra que muitos estudantes preferiram fazer download das gravações a acessar às gravações pela própria plataforma.

2 – Você acredita que as aulas ajudaram no entendimento da química quântica? Selecione "Não se aplica" caso não tenha participado ou assistido às aulas.

Cinco estudantes responderam que “não se aplica”, nove concordam e um não tem opinião formada. Relacionando com a pergunta anterior, seis estudantes assistiram até três aulas ou gravações, isto é, de forma síncrona ou assíncrona, o mesmo número de estudantes que responderam “não se aplica” e “não tenho opinião formada” para a Questão 2.

3 – Por que você não participou ou assistiu às aulas?

Os motivos mais frequentes foram:

- “Tinha outras prioridades”, que apareceu seis vezes;
- “Eu assisti às aulas”, também com seis citações;
- “Estava sem tempo”, aparecendo quatro vezes.

É importante comentar que em dois comentários os estudantes selecionaram “As aulas não estavam ajudando”. Alguns estudantes comentaram o problema do horário, mas deixaram claro que assistiram as gravações das aulas. Apenas um estudante respondeu que teve problemas com a conexão.

4 – O que você gostaria de modificar para melhorar as aulas?

Entre as respostas dos estudantes, as mais frequentes foram:

- Elogios pelas aulas;
- Acrescentar resoluções de exercícios.

Algumas outras respostas interessantes foram aquelas considerando que a forma como a disciplina foi conduzida, através de estudo dirigido, foi insuficiente, já que a leitura do polígrafo foi difícil e, com isso, o primeiro contato de alguns estudantes foi

através das aulas extras. Também é possível comentar uma resposta que considerou as aulas insuficientes, visto que foi gasto muito tempo em deduções. A ideia do estudante foi resumir as deduções e orientar os alunos sobre como resolver e deixar que eles façam isso em outro momento.

Espaço para comentários:

Alguns estudantes comentaram que as aulas ajudaram no entendimento do conteúdo. O ajuste para um modelo mais tradicional, que ocorreu durante a terceira semana, foi adequado. Um dos estudantes comentou que deveria ter demonstrações dos exercícios para ajudar a entender o conteúdo.

Em resumo, as aulas extras foram adequadas após a modificação da metodologia empregada. Como o uso do estudo dirigido através do polígrafo da disciplina foi considerado complicado, alguns estudantes dependeram das aulas extras para ter contato com o conteúdo. Contudo, alguns conteúdos do polígrafo não foram apresentados nas aulas extras e, também, foram resolvidos poucos exercícios em aula. Isso ocorreu porque a quantidade de aulas (uma vez por semana) e o tempo de cada aula (máximo uma hora) foram pequenos. Mesmo com o horário reduzido, os motivos mais frequentes para a pequena quantidade de participantes nas atividades síncronas foram que os estudantes tinham outras prioridades e estavam sem tempo. Como uma futura modificação, o uso de estudo dirigido deve ser reconsiderado, enquanto que as aulas síncronas podem ser o foco.

5.2.4. Etapa 4 – Análise das provas

Os resultados para cada prova, o número de estudantes que fizeram as provas, os temas e a distribuição de acertos são apresentados na **Tabela 11**. Todas as provas continham três questões. Os termos “Não”, “Acertos Quím.” E “Acertos Mat.”, referem-se, respectivamente, à porcentagem de estudantes que não responderam, que acertaram para a categoria Química e que acertaram para a categoria Matemática.

A partir dos dados expostos, é possível verificar que os estudantes não apresentaram muito erros nas provas, contudo muitos alunos não responderam a algumas questões. De modo geral, 31,2% das questões não foram respondidas e 63% das questões foram respondidas corretamente para ambas as categorias. Desconsiderando as questões que não foram respondidas, 91 e 92% das questões foram respondidas corretamente para as categorias, Química e Matemática. É importante salientar que as questões das provas eram semelhantes à algumas questões de exercícios do polígrafo e que continham

resolução, ou seja, os estudantes eram capazes de fazer todas as questões das provas apenas consultando as resoluções dos exercícios.

Tabela 11. Resultados das provas dos estudantes de Química Quântica

Prova	Número de estudantes	Temas	Porcentagem		
			Não	Acertos Quím.	Acertos Mat.
P1	30	Normalização.	3,33	93,3	90,0
		Função própria.	50,0	50,0	46,7
		Valor médio; Probabilidade.	46,7	46,7	50,0
P2	30	Espectroscopia.	40,0	56,7	56,7
		Comutador; Oscilador harmônico.	26,7	73,3	63,3
		Átomo de hidrogênio.	20,0	68,3	63,3
P3	29	Método variacional.	86,2	13,8	13,8
		Energia corrigida.	6,90	82,8	89,6
		Determinante de Slater.	3,45	93,1	93,1
P4	25	Energia de sistemas π .	24,0	40,0	64,0
		Símbolos de termo.	60,0	40,0	40,0
		Estabilidade de moléculas.	4,00	88,0	92,0

6. Conclusões e considerações finais

Neste estudo, a compreensão dos conceitos quânticos por estudantes universitários foi investigada por meio de questionários compostos por questões representacionais e conceituais. Os dados foram coletados por meio de dois questionários, um no início e outro no final do semestre. Para todas as turmas, Química Quântica, Química Inorgânica I (duas turmas) e Química Inorgânica III, não foi possível notar melhoria na compreensão dos alunos quanto à estrutura eletrônica do átomo. Como esperado, os alunos matriculados em cursos mais avançados alcançaram médias mais altas. Em geral, os alunos tiveram melhor desempenho com questões representacionais quando comparados com questões conceituais em ambos os questionários. Foi possível perceber um aumento no número de alunos que concebem um modelo mental do átomo baseado em conceitos quânticos, porém o número de alunos que imaginam o átomo segundo o modelo de Bohr não mudou. Outros obstáculos apresentados pelos alunos foram observados: diferenciar conceitos quânticos e clássicos, especialmente relacionados a orbital, dualidade partícula-onda e função de onda; relacionar o conceito de orbital com o princípio da incerteza de Heisenberg; representar orbitais como um diagrama de energia; e associar um modelo mental do átomo com características macroscópicas.

De uma forma geral, os alunos obtiveram médias superiores nas questões do Q1. No início do semestre, 1,33% dos alunos alcançaram médias de acertos acima de 75%, em contraste com nenhum aluno no final do semestre. Além disso, a porcentagem de alunos com médias abaixo de 25% aumentou de 16,0% para 56,5%. As médias de acertos para os Q1 e Q2 foram 45,0 e 23,3%, respectivamente. Conforme discutido, esses resultados podem estar parcialmente relacionados à diferença na forma das sentenças apresentadas nos dois questionários, embora os questionários sejam equivalentes em conteúdo. Outras limitações podem incluir o fato de que a turma QI3 não foi capaz de participar do Q2 devido ao calendário de exames finais. No entanto, esses resultados sugerem um processo de aprendizagem mecânica de conceitos relacionados à química quântica, opostos à aprendizagem significativa.

Com relação à intervenção na disciplina de Química Quântica, os estudantes têm preferência em aprender o conteúdo de forma matemática, com deduções de equações e resolução de exercícios. Contudo, foi possível perceber que os estudantes têm concepções conceituais erradas, como pensar na estrutura atômica de forma clássica. Além disso, as

aulas ministradas não apresentaram adesão dos estudantes, limitando a aplicação das metodologias ativas. Como consequência, não foi possível avaliar a efetividade de tais metodologias. A ausência dos estudantes nas aulas ocorreu porque os estudantes tinham outros compromissos ou estavam sem tempo. Os resultados das provas dos estudantes revelam que, em média, 31,2% das questões não foram respondidas. Por outro lado, 63% das questões foram respondidas corretamente, isto é, os estudantes, em geral, exibiram um desempenho regular. Os estudantes apresentaram dificuldade nos seguintes conteúdos das provas: função própria, probabilidade e espectroscopia.

Como os conceitos investigados neste estudo constituem conhecimentos básicos essenciais para cursos mais avançados, um processo de aprendizagem integrativa fica comprometido. É de extrema importância encontrar meios de melhorar o aprendizado dos alunos de tópicos relacionados à química quântica em cursos de química. Algumas alternativas incluem metodologias ativas de aprendizagem para aumentar a motivação dos alunos, evitar o uso de argumentos por analogias, especialmente por meio de recursos visuais incompletos e enganosos, como desenhos de átomos e orbitais; ensinar por meio de uma abordagem transdisciplinar, relacionando a química quântica a outras áreas, como a ressonância na química orgânica; e integrar teorias, representações e fenômenos, contextualizando o conhecimento químico.

Referências

- (1) Melo, M.; Neto, E. Dificuldades de ensino e aprendizagem dos modelos atômicos em química. *Química Nova na Escola*, **2013**, 35, 112.
- (2) Papageorgiou, G.; Markos, A.; Zarkadis, N. Students' representations of the atomic structure – the effect of some individual differences in particular task contexts. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2016**, 17, 209.
- (3) Bouayad, A.; Kaddari, F.; Lachkar, M.; Elachqar, A. Quantum model of chemical bonding: barriers and learning difficulties. *Procedia - Social and Behavioral Sciences*, **2014**, 116, 4612.
- (4) Leal, R.; Neto, J.; Lima, F.; Feitosa, C. A química quântica na compreensão de teorias de química orgânica. *Quim. Nova*, **2010**, 33, 1211.
- (5) Magedanz, A.; Herber, J.; Silva, M. Propostas de abordagens por meio de metodologias ativas no ensino superior. *Destques Acadêmicos*, **2016**, 8, 8.
- (6) Schnetzler, R. Pesquisa em ensino de química no Brasil: conquistas e perspectivas. *Quim. Nova*, **2002**, 25, 14.
- (7) Francisco, C.; Queiroz, S. A produção do conhecimento sobre o ensino de química nas Reuniões Anuais da Sociedade Brasileira de Química: uma revisão. *Quim. Nova*, **2008**, 31, 2100.
- (8) Santos, W.; Porto, P. A pesquisa em ensino de química como área estratégica para o desenvolvimento da química. *Quim. Nova*, **2013**, 36, 1570.
- (9) Geglio, P.; Moreira, D. O Enade como instrumento de avaliação do conhecimento de estudantes dos cursos de química no Brasil. *Meta: Avaliação*, **2020**, 12, 414.
- (10) Mortimer, E.; Machado, A.; Romanelli, L. A proposta curricular de química do Estado de Minas Gerais: fundamentos e pressupostos. *Quim. Nova*, **2000**, 23, 273.
- (11) Johnstone, A. Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *Journal of Computer Assisted Learning*, **1991**, 7, 75.
- (12) Johnstone, A. Chemical education research in Glasgow in perspective. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2006**, 7, 49.
- (13) Johnstone, A. You can't get there from here. *J. Chem. Educ.*, **2010**, 87, 22.
- (14) Sakurai, J. Modern quantum mechanics; Addison-Wesley: San Francisco, 1994, p 1.
- (15) Dirac, P. The principles of quantum mechanics; Oxford University Press: Great Clarendon Street, 1958, p 1.

- (16) Dias, J. Química quântica: fundamentos e métodos; Fundação Calouste Gulbenkian: Lisboa, 1980, p 5.
- (17) Harrison, A.; Treagust, D. Secondary students' mental models of atoms and molecules: implications for teaching Chemistry. *Science Education*, **1996**, 80, 509.
- (18) Tsaparlis, G.; Papaphotis, G. High-school students' conceptual difficulties and attempts at conceptual change: the case of basic quantum chemical concepts. *International Journal of Science Education*, **2009**, 31, 895.
- (19) Park, E.; Light, G. Identifying atomic structure as a threshold concept: student mental models and troublesomeness. *International Journal of Science Education*, **2009**, 31, 233.
- (20) Tsaparlis, G.; Papaphotis, G. Quantum-chemical concepts: are they suitable for secondary students? . *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2002**, 3, 129.
- (21) Allred, Z.; Bretz, S. University chemistry students' interpretations of multiple representations of the helium atom. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2019**, 20, 358.
- (22) Muniz, M.; Crickmore, C.; Kirsch, J; Beck, J. Upper-division chemistry students' navigation and use of quantum chemical models. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2018**, 19, 767.
- (23) Mannila, K.; Koponen, I.; Niskanen, J. Building a picture of students' conceptions of wave- and particle-like properties of quantum entities. *Eur. J. Phys.*, **2002**, 23, 45.
- (24) Atkins, P.; Paula, J. Physical chemistry; W. H. Freeman and Company: New York, 2010, p 258, 259.
- (25) Halliday, D.; Resnick, R.; Walker, J. Fundamentals of physics; John Wiley & Sons, Inc: Hoboken, 2011, p 1068.
- (26) Chhabra, M; Das. R. Quantum mechanical wavefunction: visualization at undergraduate level. *Eur. J. Phys.*, **2017**, 38, 015404.
- (27) Bloch, F. Heisenberg and the early days of quantum mechanics. *Physics Today*, **1976**, 29, 23.
- (28) McQuarrie, D.; Simon, J. Physical chemistry: a molecular approach; University Science Books: Sausalito, 1997. (214)
- (29) Levine I. Quantum Chemistry; Pearson: Upper Saddle River, 2014, p 7, 9, 15, 129, 146.
- (30) Taber, K. Conceptualizing quanta: illuminating the ground state of student understanding of atomic orbitals. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2002**, 3, 145.

- (31) Taber, K. Compounding quanta: probing the frontiers of student understanding of molecular orbitals. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2002**, 3, 159.
- (32) Tsaparlis, G. Atomic orbitals, molecular orbitals and related concepts: conceptual difficulties among chemistry students. *Research in Science Education*, **1997**, 27, 271.
- (33) Nakiboglu, C. Instructional misconceptions of turkish prospective chemistry teachers about atomic orbitals and hybridization. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2003**, 4, 171.
- (34) Nicoll, G. A report of undergraduates' bonding misconceptions. *International Journal of Science Education*, **2001**, 23, 707.
- (35) Lima, M.; Silva, J. Orbital atômico: modos de conceituar e ensino. *Scientia Naturalis*, **2019**, 1, 10.
- (36) Ogilvie, J. Is a molecular orbital measurable by means of tomographic imaging? *Found. Chem.*, **2011**, 13, 87.
- (37) Jones, L.; Jordan, K.; Stillings, N. Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2005**, 6, 136.
- (38) Tsaparlis, G.; Finlayson, O. Physical chemistry education: its multiple facets and aspects. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2014**, 15, 257.
- (39) Greca, I.; Freire Jr., O. Teaching introductory quantum physics and chemistry: caveats from the history of Science and science teaching to the training of modern chemists. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2014**, 15, 286.
- (40) McKagan, S.; Perkins, K.; Wieman, C. Why we should teach the Bohr model and how to teach it effectively. *Phys. Rev. St. Phys. Educ. Res.*, **2008**, 4, 10103.
- (41) Barradas-Solas, F.; Gómez, P. Orbitals in chemical education. An analysis through their graphical representations. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2014**, 15, 311.
- (42) Akaygun, S. Is the oxygen atom static or dynamic? The effect of generating animations on students' mental models of atomic structure. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2016**, 17, 788.
- (43) Didiş, N. The analysis of analogy use in the teaching of introductory quantum theory. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2015**, 16, 355.
- (44) Tsaparlis G. In *Concepts of Matter in Science Education. Innovations in Science Education and Technology*; Tsaparlis G.; Sevian H. (Edt.); Springer: Dordrecht, 2013, p. 437.
- (45) Scerri, E. Have orbitals really been observed? *J. Chem. Educ.*, **2000**, 11, 1492.
- (46) Niaz, M.; Fernández, R. Understanding quantum numbers in general chemistry textbooks. *International Journal of Science Education*, **2008**, 30, 869.

- (47) Garritz, A. Teaching the philosophical interpretations of quantum mechanics and quantum chemistry through controversie. *Sci. & Educ.*, **2013**, 22, 1787.
- (48) Dangur, V.; Avargil, S.; Peskin, U.; Dori, Y. Learning quantum chemistry via a visualconceptual approach: students' bidirectional textual and visual understanding. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2014**, 15, 297.
- (49) Müller, R.; Wiesner, H. Teaching quantum mechanics on an introductory level. *Am. J. Phys.*, **2002**, 70, 200.
- (50) Gómez, P.; Martín, F. Quantum vs. "classical" chemistry in university chemistry education: a case study of the role of history in thinking the curriculum. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2003**, 4, 131.
- (51) Ramsey, J. Molecular shape, reduction, explanation and approximate concepts. *Synthese*, **1997**, 111, 233.
- (52) Benvenuto, E. Química inorgânica: átomos, moléculas, líquidos e sólidos; Editora da UFRGS: Porto Alegre, 2011, p. 42, 64, 69, 105.
- (53) deSouza, R.; Iyengar, S. Using quantum mechanics to facilitate the introduction of a broad range of chemical concepts to first-year undergraduate students. . *Chem. Educ.*, **2013**, 90, 717.
- (54) Lamoureux, G.; Ogilvie, J. Hybrid atomic orbitals in organic chemistry. part 1: critique of formal aspects. *Quim. Nova*, **2019**, 42, 812.
- (55) Lamoureux, G.; Ogilvie, J. Hybrid atomic orbitals in organic chemistry. part 2: critique of practical aspects. *Quim. Nova*, **2019**, 42, 817.
- (56) Taber, K. Learning quanta: barriers to stimulating transitions in student understanding of orbital ideas. *Sci. Ed.*, **2005**, 89, 94.
- (57) Didiş, N.; Eryılmaz, A.; Erkoç, Ş. Investigating students' mental models about the quantization of light, energy, and angular momentum. *Phys. Rev. St. Phys. Educ. Res.*, **2014**, 10, 020127.
- (58) Moreira, M. Teorias de aprendizagem; EPU: São Paulo, 1999, p 12, 151-163.
- (59) Ausubel D. The acquisition and retention of knowledge: a cognitive view; Springer: Dordrecht, 2000, p 67-96.
- (60) Moreira, M. A teoria de aprendizagem significativa e sua implementação em sala de aula; Editora Universidade de Brasília: Brasília, 2006, p 13-42.
- (61) Moran, J. In Metodologias ativas para uma educação inovadora: uma abordagem teórico-prática; Bacich, L.; Moran, J. (Edt.); Penso: Porto Alegre, 2018, p 42.

- (62) Debal, B. In *Metodologias ativas no ensino superior: o protagonismo do aluno*; Debal, B. (Edt.); Penso: Porto Alegre, 2020, p 15.
- (63) Freeman, S.; Eddy, S.; McDonough, M.; Smith, M.; Okoroafor, N.; Jordt, H. Active learning increases student performance in science, engineering, and mathematics. *PNAS*, **2014**, 111, 8410.
- (64) Partanen, L. Student-centred active learning approaches to teaching quantum chemistry and spectroscopy: quantitative results from a two-year action research study. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2018**, 19, 885.
- (65) Partanen, L. How student-centred teaching in quantum chemistry affects students' experiences of learning and motivation—a self-determination theory perspective. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2020**, 21, 79.
- (66) Lee, C.; Li, H.; Shahrill, M. Utilising the think-pair-share technique in the learning of probability. *IJEME*, **2018**, 2, 49.
- (67) Lyman, F. In *Mainstreaming digest: a collection of faculty and student papers*; Anderson, A. (Edt.); University of Maryland: College Park, 1981, p. 109.
- (68) Bamiro, A. Effects of guided discovery and think-pair-share strategies on secondary school students' achievement in Chemistry. *SAGE Open*, **2015**, 5, 1.
- (69) Mazur, E. *Peer instruction a user's manual*; Pearson: Upper Saddle River, 1997, p 9.
- (70) Vickrey, T.; Rosploch, K.; Rahmanian, R.; Pilarz, M. Research-based implementation of peer instruction: a literature review. *CBE Life Sci. Educ.*, **2015**, 14, 1.
- (71) Zhu, G.; Singh, C. Surveying students' understanding of quantum mechanics in one spatial dimension. *Am. J. Phys.*, **2012**, 80, 252.
- (72) Flick, U. *Introdução à metodologia de pesquisa: um guia para iniciantes*. Penso: Porto Alegre, 2013, p 110.
- (73) Gray, D. *Pesquisa no mundo real*. Penso: Porto Alegre, 2012, p 282, 361, 362.
- (74) Kaberman, Z.; Dori, Y. Metacognition in chemical education: question posing in the case-based computerized learning environment. *Instr. Sci.*, **2009**, 37, 403.
- (75) Allred, Z.; Bretz, S. Development of the quantization and probability representations inventory as a measure of students' understandings of particulate and symbolic representations of electron structure. *J. Chem. Educ.*, **2019**, 96, 1558.
- (76) Kalkanis, G.; Hadzidaki, P.; Stavrou, D. An instructional model for a radical conceptual change towards quantum mechanics concepts. *Sci. Ed.*, **2003**, 87, 257.

- (77) Gressler, L. Introdução à pesquisa: projetos e relatórios; Loyola: São Paulo, 2004, p 156.
- (78) Elo, S.; Kääriäinen, M.; Kanste, O.; Pölkki, T.; Utriainen, K.; Kyngäs, H. Qualitative content analysis: a focus on trustworthiness. *SAGE Open*, **2014**, 4, 1.
- (79) Bardin, L. Análise de conteúdo; Edições 70: São Paulo, 2010, p 121-166.
- (80) Tasker, R.; Dalton, R. Research into practice: visualisation of the molecular world using animations. *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2006**, 7, 141.
- (81) Huheey, J.; Keite, E.; Keite, R. Inorganic chemistry: principles of structure and reactivity; HarperCollins College: New York, 1993, p 158.
- (82) Atkins, P. Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente; Bookman: Porto Alegre, 2012, p 115.
- (83) Atkins, P.; Friedman, R. Molecular quantum mechanics; Oxford University Press: Great Clarendon Street, 2011, p 91.
- (84) Sunyono, S.; Tania, L.; Saputra, A. A Learning exercise using simple and real-time visualization tool to counter misconceptions about orbitals and quantum numbers. *Journal of Baltic Science Education*, **2016**, 15, 452.
- (85) Autschbach J. Orbitals: some fiction and some facts. *J. Chem. Educ.*, **2012**, 89, 1032.
- (86) Stefani, C.; Tsaparlis, G. Students' levels of explanations, models, and misconceptions in basic quantum chemistry: a phenomenographic study. *Journal of Research in Science Teaching*, **2009**, 46, 520.
- (87) Dick-Perez, M.; Luxford, C.; Windus, T.; Holme, T. a quantum chemistry concept inventory for physical chemistry classes. *J. Chem. Educ.*, **2016**, 93, 605.

Anexos

Os anexos deste trabalho são os dois questionários usados para a pesquisa.

Questionário 1

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Química
Departamento de Físico-Química

Química Quântica: conhecimentos dos/as alunos/as de química

Esta pesquisa tem por objetivo traçar um perfil dos estudantes dos cursos de Química (Bacharelado, Industrial e Licenciatura) acerca de seus conhecimentos sobre Química Quântica para o projeto de iniciação científica "Química quântica básica: transposição didática e métodos ativos de ensino". Sua participação é importante, portanto, tente responder a todas as questões. Todas as questões foram adaptadas de:

Allred Z. D. R., Bretz, S. L., (2019), Development of the quantization and probability representations inventory as a measure of students' understandings of particulate and symbolic representations of electron structure, *J. Chem. Educ.*, 96, 1558-1570;

Dangur, V., Avargil, S., Peskin, U., Dori, Y. J., (2014), Learning quantum chemistry via a visual-conceptual approach: students' bidirectional textual and visual understanding, *Chem. Educ. Res. Pract.*

Kalkanis J., Hadzidaki P. and Stavrou D., (2003), An instructional model for a radical conceptual change towards quantum mechanics concepts, *Sci. Educ.*, 87, 257–280.

Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

Concordo em participar da pesquisa “Química Quântica: conhecimentos dos alunos de química”, sob responsabilidade do graduando Diego de Vargas Dias e orientação da Profa. Dra. Lívia Streit, ambos vinculados à Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Declaro que estou ciente que as informações prestadas serão utilizadas na investigação e de que o anonimato será mantido.

() Sim () Não

Nível de ensino:

() Graduação () Mestrado () Doutorado () Outro: _____

Curso atual:

() Bacharelado em química () Química industrial () Licenciatura em química

1. O que você entende pelas propriedades de partícula e onda de prótons, nêutrons e elétrons?

2. A sentença a seguir refere-se às questões a-d: "Livros-texto de Química muitas vezes oferecem múltiplas representações do átomo."

a) Qual representação de átomo vem primeiro a sua mente?

b) Que outras representações do átomo você conhece?

c) Qual dessas representações você diria estar correta?

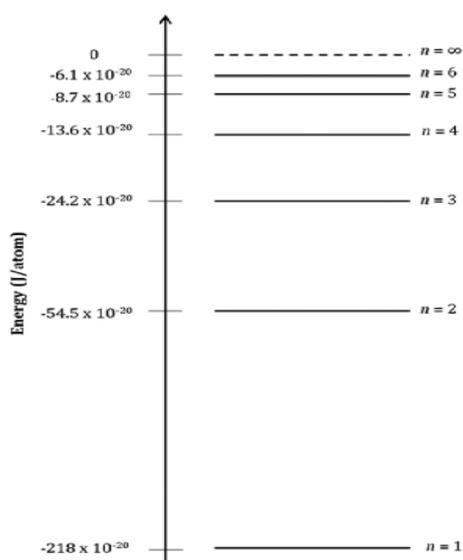
d) Ao responder à questão c), o que você entende por correto?

3. O que você entende por orbital?

4. O que você entende pelo Princípio da Incerteza de Heisenberg?

5. De acordo com as suas respostas às questões 3 e 4, haveria uma conexão entre a definição de orbital e o Princípio da Incerteza de Heisenberg?

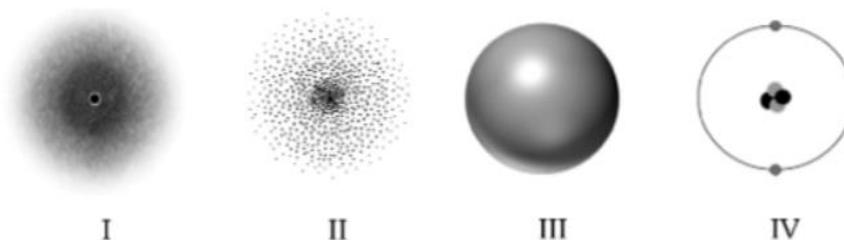
6. A respeito da interpretação do diagrama de níveis de energia para o átomo de hidrogênio, representado abaixo, responda à questão:



Qual destas afirmações melhor explica porque o valor da energia nesta figura é muito negativo quando $n = 1$?

- () O elétron tem carga negativa.
 () O elétron é atraído pelo núcleo.
 () A energia do elétron está em seu mínimo.
 () Energia é liberada durante o processo exotérmico.

7. A figura abaixo mostra quatro representações para o átomo de hélio. Use-a para responder às questões a) e b) a seguir.



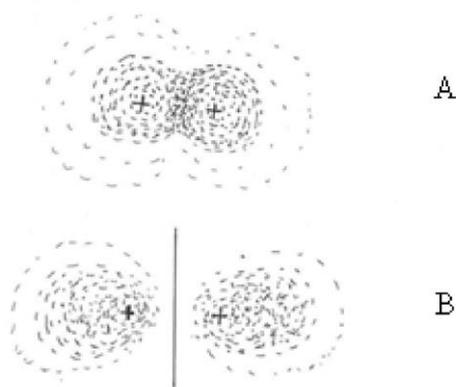
a) Qual representação na figura você imagina em sua mente quando pensa no átomo de hélio?

- () I () II () III () IV

b) Qual representação na figura é o modelo mais apurado para o átomo de hélio?

- () I () II () III () IV

8. A figura abaixo representa um modelo bidimensional de orbitais moleculares. As ilustrações A e B representam os orbitais de uma molécula diatômica. Cada ilustração se refere a um orbital molecular diferente. Explique a ilustração da figura respondendo às questões a-c a seguir:



a) O que os símbolos "+" representam?

b) Qual o significado da linha vertical na ilustração B?

c) O que os pontos nas ilustrações representam?

Você se disponibilizaria para uma nova pesquisa online e/ou presencial?

- () Somente online () Somente presencial () Ambas () Nenhuma das duas

Se quiser, deixe seu contato para futuras pesquisas.

Muito obrigado pela participação!

Questionário 2

**Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Química
Departamento de Físico-Química**

Química Quântica: conhecimento dos/as alunos/as de química

Esta pesquisa tem por objetivo traçar um perfil dos estudantes dos cursos de Química (Bacharelado, Industrial e Licenciatura) acerca de seus conhecimentos sobre Química Quântica para o projeto de pesquisa “Química quântica básica: transposição didática e métodos ativos de ensino”. Sua participação é importante, portanto, tente responder a todas as questões.

Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

Concordo em participar da pesquisa “Química Quântica: conhecimento dos/as alunos/as de química”, sob responsabilidade do graduando Diego de Vargas Dias e orientação da Profa. Dra. Lívia Streit, ambos vinculados à Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Declaro que estou ciente que as informações prestadas serão utilizadas na investigação e de que o anonimato será mantido.

Sim Não

Estudou o Ensino Médio:

Escola Pública Escola Particular Outro: _____.

Curso atual:

Bacharelado em Química Química Industrial Licenciatura em Química

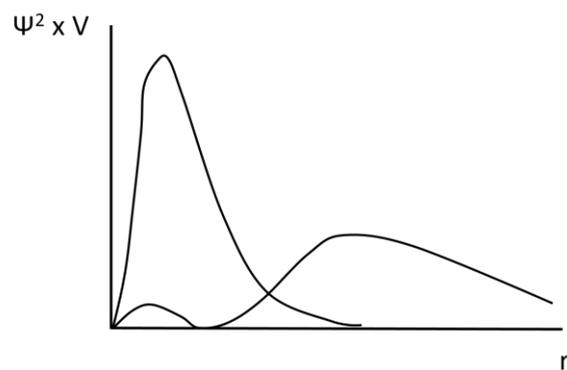
Tem algum outro curso concluído até agora?

Técnico Graduação Especialização Mestrado Doutorado Não tenho

1 - Faça uma ilustração de como você imagina um átomo neutro de lítio (número atômico 3). Comente e/ou identifique na ilustração partes que considerar relevante:

2 - Represente, em termos de energia, a ilustração feita na questão 1:

3 - Observe a figura:



a) O que a figura acima representa?

b) A figura pode ser relacionada com as ilustrações feitas nas questões 1 e 2? Explique:

4 - O que você entende por função de onda?

5 - Se for possível, relacione a ilustração feita na questão 1 com alguma característica macroscópica: