



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA
PROGRAMA DE PÓS- GRADUAÇÃO EM ENSINO, FILOSOFIA E
HISTÓRIA DAS CIÊNCIAS

MÁRCIO MATOS LIMA

**ORBITAL ATÔMICO: APRENDIZAGEM E DESENVOLVIMENTO DO
CONCEITO POR ESTUDANTES DE QUÍMICA**

SALVADOR

2018

MÁRCIO MATOS LIMA

**ORBITAL ATÔMICO: APRENDIZAGEM E DESENVOLVIMENTO DO
CONCEITO POR ESTUDANTES DE QUÍMICA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, Universidade Federal da Bahia, I para obtenção do grau de Mestre em Ensino, Filosofia e História das Ciências na área de concentração em Ensino de Ciência (Química).

Orientador: Prof. José Luis de Paula Barros da Silva

SALVADOR

2018

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Universitário de Bibliotecas (SIBI/UFBA),
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Lima, Márcio Matos
Orbital Atômico: Aprendizagem e desenvolvimento do
conceito por estudantes de química. / Márcio Matos
Lima. -- Salvador, 2018.
122 f. : il

Orientador: José Luis de Paula Barros Silva.
Dissertação (Mestrado - Mestrado) -- Universidade
Federal da Bahia, Instituto de Física., 2018.

1. Orbital atômico. 2. Vigotski. 3. sistema de
conceitos. 4. ensino do conceito. I. Silva, José Luis
de Paula Barros. II. Título.

MÁRCIO MATOS LIMA

**ORBITAL ATÔMICO: APRENDIZAGEM E DESENVOLVIMENTO DO
CONCEITO POR ESTUDANTES DE QUÍMICA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, como requisito para obtenção do grau de Mestre em Ensino, Filosofia e História das Ciências, Universidade Federal da Bahia e Universidade Estadual de Feira de Santana.

Aprovado em 17 de dezembro de 2018.

Banca Examinadora

José Luis de Paula Barros Silva - Orientador

Doutor em Química, Universidade Federal da Bahia, Brasil

Universidade Federal da Bahia

Artur José Santos Mascarenhas _____

Doutor em Química, Universidade Estadual de Campinas (2004), Brasil

Universidade Federal da Bahia

Abraão Felix da Penha _____

Doutor em Ensino, Filosofia e História das Ciências pela UFBA/ UEFS, Brasil.

Universidade Estadual da Bahia

AGRADECIMENTOS

A Paula Naiane, pelas correções no meu português e pelo apoio durante o mestrado. Ao Prof. José Luis de Paula Barros da Silva, mais que um orientador, um amigo que levo para vida, sempre atencioso, receptivo e sempre exigente com a qualidade do trabalho. Aos meus colegas e amigos Edvaldo, Lucilene, Juliel que embarcaram comigo nesse mundo quântico.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia (FAPESB), pelo apoio financeiro. A todos os estudantes do semestre de 2015.2 e 2016.1, por permitirem o uso dos materiais produzidos, sem os quais não seria possível esse trabalho.

Enfim, muito obrigado aos meus pais e minha irmã por me ouvirem nos momentos de aflição. Todos sem exceção me possibilitaram viver plenamente essa experiência enriquecedora e gratificante, tão importância para meu crescimento como ser humano e profissional.

LIMA, Márcio Matos. Orbital Atômico: Aprendizagem e desenvolvimento do conceito por estudantes de química. 122 f. il. 2018. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2018.

RESUMO

O conceito de orbital é de fundamental importância para o ensino de Química, pois a compreensão das teorias quânticas sobre a ligação química, dependem da compreensão do conceito de orbital. Porém, conceitos importantes para seu entendimento como: (a) quantum de uma grandeza; (b) natureza dual da matéria e da radiação; (c) átomo como estrutura; (d) movimento eletrônico sem trajetórias definidas; devem ser ensinados anteriormente. A literatura consultada aponta que os estudantes apresentam dificuldades em entender o conceito de orbital mesmo depois do seu ensino. Sendo assim, o objetivo deste trabalho é investigar como se dá o processo de formação do conceito de orbital nos estudantes de ensino superior em uma perspectiva histórico-cultural. A aula teve uma abordagem histórica do conceito de orbital atômico, pois Vigotski (2001) afirma que a análise histórica torna o conceito lógico. Além disso, os estudantes foram levados a resolverem exercícios, para que desta forma fosse observado o uso do conceito na solução de problemas. Esta investigação de natureza empírica, do tipo Ação-Pesquisada foi feita na turma de 2016.1, da disciplina QUIA49-Química Quântica I que conta com cerca de 35 alunos, entre estudantes de licenciatura e bacharelado em Química). A Análise de Conteúdo, será utilizada para análise dos dados obtidos com a sondagem, exercícios resolvidos, avaliações, observação e filmagem das aulas. Inicialmente, foi aplicada uma sondagem para perceber as concepções espontâneas dos estudantes a respeito do conceito de orbital atômico e da interpretação probabilística da função de onda e como resultado foi obtido que os estudantes em sua maioria utilizavam mais os termos referentes ao conceito de orbital como região do espaço e também para eles a interpretação probabilística pode ser interpretada como a densidade de probabilidade de se encontrar o sistema em dada região do espaço. Da análise do vídeo foi possível perceber o quanto importante é o trabalho do professor para que haja o desenvolvimento e, por conseguinte a aprendizagem do conceito, pois só alguém mais experiente é capaz de atuar na zona de desenvolvimento iminente e fazendo com que o estudante dê um salto cognitivo e tome consciência do conceito. As avaliações serviram como problemas nos quais os estudantes teriam que demonstrar que tomaram consciência do conceito de orbital. De acordo com os termos utilizados nas respostas dadas foi possível verificar que houve um desenvolvimento das funções superiores dos estudantes. Através dessa pesquisa foi possível perceber que um ensino no qual os alunos sejam incentivados a discutir, escrever e solucionar problemas, possibilita o desenvolvimento cognitivo desse estudante.

Palavras-Chaves: Orbital atômico, Vigotski, sistema de conceitos, ensino do conceito

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Distribuição de carga de p^+ e p_0 , com s para comparação (imagens feitas por Langer).	33
Figura 2: Equipamento utilizado por Langer para criar as imagens da densidade de probabilidade. Um dispositivo mecânico que quando colocado em movimento e fotografado representa a nuvem de elétrons para os vários estados dos átomos do tipo hidrogênio. O modelo mostrado na figura é para um elétron 3d.	34
Figura 3: O fator angular, P_θ , da densidade de probabilidade $\psi\psi^*$ plotado em coordenadas angulares. Acima e abaixo das distribuições de elétrons mecânicos quânticos, as órbitas de elétron clássicas correspondentes são mostradas orientadas em cada caso de acordo com o modelo l^* , s^* , j^* e m .	36
Figura 4: Projeções das nuvens eletrônicas em vários estados	37
Figura 5: Contornos de densidade de carga de orbitais moleculares para a molécula de oxigênio	38
Figura.6: Gráficos das funções polares $[\theta_{lm}(\vartheta)]^2$ para $m = \pm l$ and $l = 0, 1, 2, 3, 4, e 5$, mostrando a concentração da função sobre o plano xy com o aumento do l .	39
Fig.7. Função de função radial (R) e funções de distribuição radial para orbitais atômicos com n até três. As escalas verticais não são as mesmas para diferentes orbitais	41
Figura 8: Mapa Conceitual sobre os conceitos envolvidos no ensino do conceito de orbital	45
Figura 9: Mapa Conceitual referente ao sistema de conceitos de orbital	45
Figura 10; Imagens de densidade de carga por Zuo e colaboradores	66
Figura 11: Imagem do orbital dz^2	67
Figura 12: Superfícies harmônicas esféricas $Y(\theta, \varphi)$, $Y^2(\theta, \varphi)$ e superfície harmônicas em coordenadas cartesianas	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação das respostas dos estudantes ao teste de sondagem quanto ao tipo de conceito de orbital atômico	74
Tabela 2: Termos utilizados na conceituação do orbital atômico no teste de sondagem	81
Tabela 3 – Classificação das respostas dos estudantes ao teste de sondagem quanto a interpretação probabilística da função de onda	84
Tabela 4: Termos utilizados na conceituação da interpretação probabilística da função de onda	85
Tabela 5: Categorias utilizadas para análise das respostas dos estudantes na questão 1	93
Tabela 6: Termos empregados pelos estudantes na questão 1	94
Tabela 7: Categorias utilizadas para análise das respostas dos estudantes na questão 1.1	95
Tabela 8: Termos empregados pelos estudantes na questão 1.1	96
Tabela 9: Categorias de análise utilizadas para análise da questão 2	101
Tabela 10: Termos utilizados para calcular a probabilidade	102
Tabela 11: Limites de integração utilizados para calcular a probabilidade	102
Tabela 12: Expressões encontradas após a substituição pelo elemento de volume	104
Tabela 13: Valores de probabilidades encontradas pelos estudantes	106
Tabela 14 – Classificação das respostas dos estudantes quanto ao tipo de conceito	108
Tabela 15: Termos utilizados pelos estudantes na questão 3 com referência ao conceito de orbital e interpretação probabilística	109

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	12
1.2	PROBLEMA E OBJETIVOS DA PESQUISA	14
1.2.1	Objetivo Geral	14
1.2.2	Objetivos Específicos	14
2.	REFERENCIAL TEÓRICO	15
2.1	TEORIA HISTÓRICO CULTURAL	15
2.1.1.	O conceito de consciência	16
2.1.2.	A aprendizagem e o desenvolvimento intelectual	21
2.1.3.	Importância da linguagem escrita para o desenvolvimento	22
2.1.4.	A zona do desenvolvimento proximal ou iminente	23
2.2.	O QUE É O CONCEITO?	25
2.2.1	Conceito científico e conceito espontâneo	27
2.3.	HISTÓRIA DO CONCEITO DE ORBITAL ATÔMICO	29
2.3.1.	A teoria quântica do átomo	29
2.3.2	Orbital como região do espaço	32
2.3.3	Funções de onda radial e distribuições radiais	40
2.4	ANÁLISE DO CONCEITO DE ORBITAL	42
2.5	O ENSINO DO CONCEITO DE ORBITAL	47
2.5.1.	Ensino da teoria quântica para químicos	47
2.5.2.	Críticas ao ensino do conceito de orbital	49
2.5.3.	Equívocos e concepções alternativas	52
2.5.3.1	Reflexão sobre o ensino de química	55
2.5.4.	O que é encontrado nos livros didáticos	57
2.5.4.1.	<i>Representação dos orbitais nos livros didáticos</i>	59
2.5.4.2.	<i>Representação dos orbitais nos artigos científicos e o seu reflexo</i>	62
	<i>no ensino</i>	
	Controvérsia de 1990	62
	Controvérsia de 1999	64
	Reflexão a respeito da realidade dos orbitais e o seu ensino	68
3.	METODOLOGIA	71
3.1	TIPO DE PESQUISA	71
3.2	Contexto da pesquisa	72

3.2.1 Proposta da aula	75
3.3 INSTRUMENTO DE COLETA DE DADOS	75
3.4. Análise de dados	78
4.RESULTADOS E DISCUSSÃO	79
4.1 Observação piloto em 2015.2.	80
4.2 Teste de sondagem	81
4.3. Análise dos vídeos	86
4.4. Análise das respostas da avaliação	92
4.4.1. Análise da 2ª questão da avaliação	99
4.4.2. Análise da questão 3	108
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	111
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	113
ANEXOS	119

1. INTRODUÇÃO

O meu primeiro e único contato com a Química no ensino médio foi no 1º ano do ensino profissionalizante de Administração no ano de 1995. Um fato interessante foi que no ano de 2003, mesmo com domínio superficial do conteúdo, comecei a dar aula particular de Química, Física e Matemática para alguns amigos. Porém, só entrei em contato com essa disciplina de forma mais aprofundada no cursinho pré-vestibular em 2004, mesmo ano que ingressei no curso técnico subsequente de Análise Química do CEFET-BA, atual IFBA.

Em 2005 fui aprovado no Curso Tecnológico de Polimerização do CEFET, que cursei durante um ano (não concluí). No ano seguinte fui aprovado em Química na UFBA, após três tentativas em cursos diferentes. Devido ao estágio obrigatório na Braskem e depois na Millenium Inorganic Chemicals, tive que trancar o curso por um ano. Por não conseguir conciliar o trabalho de turno e o curso de Química, saí do trabalho e consegui uma bolsa CNPQ no IGEO para trabalhar como Apoio Técnico no Laboratório de Estudos Isotópicos da Bahia, sem deixar de dar as aulas particulares.

A primeira vez que ouvi a palavra orbital atômico foi no CEFET-BA, porém, foi na UFBA que percebi a complexidade e utilidade deste conceito. Desde que a ouvi nas aulas de Química Fundamental e de Química Orgânica Fundamental III, percebi que era algo importante, porém não entendia o porquê de o orbital apresentar dois conceitos e meus colegas também se questionavam sobre esse aspecto. Outro ponto também era o fato de meus colegas e eu acharmos que orbitais eram as “caixas” onde colocávamos os elétrons com spins contrários e também não sabíamos a origem das imagens em forma de esfera, halteres, etc.

Após a defesa do meu TCC (Trabalho de Conclusão de Curso) da Licenciatura em Química conversei com o Professor José Luis sobre o meu interesse em trabalhar com o conceito de orbital atômico com o intuito de tentar achar uma explicação para o fato de ser duplo: **função de onda para elétron para um átomo hidrogenóide** ou **região do espaço onde é mais provável encontrar o elétron**. Porém, com o percurso dos estudos percebemos que existiam outras questões a respeito desse conceito tão amplo. Esse trabalho é fruto das nossas inquietações sobre como esse conceito deve ser ensinado e como os estudantes estão aprendendo.

Durante o curso de Química os estudantes se deparam com muitos conceitos, teorias, leis e fórmulas. Dentre estes conceitos está o conceito de orbital, que é de

fundamental importância para a compreensão das teorias quânticas do átomo e da ligação química. Porém, este conceito surge nos livros de Química do nível superior de formas diferentes, como "função de onda" (BROWN et al.,2007, p.195) ou como "região do espaço" (SOLOMONS,2000, p.16), causando confusão e dúvidas nos estudantes.

O termo orbital foi introduzido por Robert S. Mulliken em 1932 como um modo abreviado para se referir a "função de onda orbital para um elétron". Anteriormente, Born (1926) fez a interpretação da função de onda $|\psi|^2$ como a densidade de probabilidade de encontrar o elétron. Pauling e Wilson Jr (1935) utilizaram esse conhecimento para explicar as ligações químicas.

O orbital atômico está na base das interpretações do químico, no que diz respeito à estrutura atômica e molecular. A estrutura molecular é quase sempre expressa em termos de orbitais, ou em relação aos orbitais dos átomos constituintes. Porém, conceitos importantes para seu entendimento como: (a) quantum de uma grandeza; (b) natureza dual da matéria e da radiação; (c) átomo como estrutura; (d) movimento eletrônico sem trajetórias definidas, devem ser ensinados anteriormente.

Vários autores (AUTCHBACH, 2012; TABER, 2005; TSARPALIS, 1997) afirmam que, mesmo depois de terem sido ensinados sobre o conceito de orbitais, os estudantes apresentam: linguagem incorreta em discussões científicas; uma visão de estrutura atômica em termos de elétrons em órbitas do tipo planetário; não entendem porque a quantização foi introduzida no modelo atômico; apresentam denominações confusas de orbitais e não distinguem claramente orbitais moleculares e atômicos. Tsarparlis (1997) vai mais além e afirma que um número crescente de educadores é contrário a utilização do conceito de orbital em cursos básicos de química.

As representações da densidade de probabilidade de elétrons geram gráficos que sugerem direções para o movimento do elétron dando uma visão realista aos orbitais. Esta visão fica clara em dois artigos publicados na revista Nature, o trabalho intitulado **Direct observation of d-orbital holes and Cu–Cu bonding in Cu₂O** escrito por Zuo et al (1999) e **Electrons seen in orbit** escrito por Humphreys (1999). Esses artigos motivaram uma controvérsia a respeito da realidade do orbital, trazendo um novo aspecto para ser discutido durante o ensino desse conceito.

O conceito de orbital é um conceito científico. Para Vigotski (2009), os conceitos científicos subentendem um sistema de modo que, para que os estudantes tomem consciência do conceito de orbital, devem conhecer e compreender seu sistema

conceitual e, assim, saber explicar o conceito e justificar seu uso. Diante disso, um ensino no qual os conceitos estejam sistematizados pode contribuir para uma discussão mais abrangente, incluindo também os aspectos epistemológicos, como a questão do realismo e do antirrealismo (BELLAS; GONZALEZ; SILVA, 2015), proporcionando um melhor desenvolvimento intelectual dos estudantes e o uso mais consciente e voluntário deste conceito.

Para se ter uma compreensão lógica dos conceitos, tem-se que fazer uma análise histórica. O conceito é um ato de generalização e evolui com os significados das palavras. Ele pode ser espontâneo ou científico, e o desenvolvimento de ambos é um processo intimamente conectado e mutuamente influente. O processo de ensino e aprendizagem na escola deve ser construído, então, tomando como ponto de partida o nível de desenvolvimento do aluno (VIGOTSKI, 2001).

O capítulo 2 apresenta o referencial teórico deste trabalho, no capítulo 3 está contida a metodologia utilizada e nos capítulos 4 e 5 a discussão dos resultados e considerações finais.

1.1 PROBLEMA E OBJETIVOS DA PESQUISA

A questão de pesquisa: Como se dará a aprendizagem e desenvolvimento do conceito de orbital atômico para o estudante de química do ensino superior?

1.1.1 Objetivo Geral

Compreender como se dá a aprendizagem e o desenvolvimento do conceito de orbital atômico em estudantes de química de ensino superior

1.1.2 Objetivos Específicos

Identificar os conceitos prévios dos estudantes sobre o conceito de orbital.

Analisar como o ensino contribuiu para desenvolvimento conceitual dos estudantes em relação ao conceito de orbital.

Analisar como os estudantes empregam o conceito de orbital na solução dos problemas.

2.REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 TEORIA HISTÓRICO CULTURAL

A teoria histórico-cultural foi criada por Vigotski¹ e tem como foco o estudo das funções psicológicas elementares e superiores das pessoas. Ela surgiu para explicar de forma científica os processos mentais superiores. E ao utilizar uma visão marxista a teoria histórico-cultural busca explicações para o desenvolvimento das funções mentais superiores nas relações sociais (LUCCHI, 2006).

Vigotski foi um psicólogo russo, com formação em medicina e direito, entre outras, que nasceu em Orsha em 1896 e se radicou em Gomel, ambas cidades da Bielo-Rússia, sendo que Gomel situava-se em território de confinamento de judeus na Rússia czarista. Desenvolveu sua produção psicológica basicamente em Moscou, onde faleceu em 1934, com 38 anos de idade. O trabalho de Vigotski e de seus colaboradores (Lúria e Leontiev são os mais conhecidos), foi voltado para a demonstração do caráter histórico e social da mente humana e da possibilidade de intervir em seu desenvolvimento.

Segundo a concepção materialista, o desenvolvimento do indivíduo e da espécie humana está ligado à ideia de que o homem se transforma de biológico em sócio-histórico, mas continua sendo um ser biológico, no qual a cultura é parte essencial da sua constituição. Para a teoria histórico cultural, o significado é o ponto principal da relação entre pensamento e a linguagem. No significado da palavra o pensamento e a fala estão juntos em pensamento verbal. Para Vigotski o significado propriamente dito refere-se ao sistema de relações objetivas, estável e compartilhado por todos que o utilizam. (OLIVEIRA, 1997)

A compreensão das relações homem-homem e homem-natureza era um dos focos dos estudos de Vigotski. Estas relações, conhecidas como mediações, estão vinculadas a dois elementos principais: os instrumentos e os signos. Os instrumentos

¹ Devido às traduções o nome do russo Lev Semenovich Vigotski (1896-1934) apresenta as seguintes formas: Vygotsky, Vigotsky, Vygotski, Vigotskii, Vigotski, entre outras -, porém a forma usual neste trabalho será Vigotski, exceto nas referências, as quais serão escritas conforme a grafia do texto original.

regulam as ações dos homens sobre os objetos, enquanto que os signos regulam as ações sobre o psiquismo das pessoas. Os signos agem de acordo com um dado problema psicológico, por exemplo: lembrar do dia do casamento, comparar coisas, relatar fatos, escolher uma roupa, etc. Desta forma, os signos, proporcionam ao homem um controle voluntário da sua atividade² psicológica e assim ampliando sua capacidade de atenção, memória e acúmulo de informações. (RÊGO,1994, p.50-53)

A teoria histórico-cultural entende a linguagem como um sistema simbólico fundamental, elaborado no curso da história social, responsável por organizar os signos em estruturas complexas, cujo papel é "imprescindível na formação das características psicológicas humanas" (RÊGO,1994, p.50-53).

Para Luria (1991) o advento da linguagem insere ao menos três mudanças à atividade consciente humana a saber: A primeira é "discriminar, dirigir a atenção e conservar os objetos na memória"; A segunda é que as palavras indicam coisas, abstraem as propriedades essenciais e relacionam as coisas perceptíveis possibilitando categorizá-las e a terceira é a transmissão de informação permitindo o intercâmbio social entre indivíduos que compartilhem do mesmo sistema de representação da realidade.

2.1.1.O conceito de consciência

Em 1924, Vigotski sintetiza algumas de suas primeiras ideias sobre a consciência, linguagem e inconsciente. Para ele o pensamento é considerado reflexo inibido e a linguagem (interna ou externa) como um tipo de comportamento e a fala aparece como cadeias de perguntas e respostas, séries capazes de sofrer a influência de outros sistemas reflexos. Nesse interim, Vigotski supera o dualismo reflexológico³ e passa a enxergar na socialidade da linguagem a origem das interações que compõem a consciência humana e para isso lança mão de uma vertente materialista nos seus estudos. (TOASSA, 2006, p.59)

² O conceito de atividade utilizado neste trabalho não tem relação com a Teoria da Atividade de Leontiev.

³ "[...] Reflexologia consiste no estudo da atividade correlativa do organismo no sentido amplo da palavra, e por atividade correlativa denomino todas as reações inatas e adquiridas individualmente, começando pelos reflexos inatos e reflexos organizados-complexos até os reflexos mais complexos adquiridos que no homem começam nas ações e condutas e incluem sua conduta característica" (BECHTEREV, 1973, p. 171 retirado de CARVALHO et al,2010,p.14).

Nesse contexto, surgem dois termos — *estrutura* e *sistema* — importantíssimos para a discussão do conceito de consciência e para a obra de Vigotski. Estes termos indicam que:

[...] o cérebro não tem um funcionamento organizado *a priori*, que as estruturas funcionais se fundamentam na capacidade de formação de novas conexões neurais sistemicamente organizadas. A palavra é unidade básica do sistema dos reflexos da consciência, isto é, dos reflexos que servem para refletir a influência de outros sistemas. (TOASSA, 2006, p.59)

Como bem nos assegura Toassa (2006), no ano de 1926, no trabalho de Vigotski intitulado: "*A Psicologia Pedagógica*", temos o conceito de consciência direcionado à educação e ao desenvolvimento da criança, com atenção aos processos psicológicos de aquisição da consciência social. Pode-se notar um amadurecimento nas ideias de Vigotski, no que tange a aquisição do conhecimento por parte do homem, que passa a ser vista como um processo dinâmico, ativo e dialético. Para Vigotski, a interação com o ser mais experiente produz mudanças estruturais da consciência.

O desenvolvimento da consciência, é o "desenvolvimento de um conjunto de determinadas capacidades independentes ou de um conjunto de hábitos específicos" (VIGOTSKI,1991, p.55). E para ocorrer a melhora de uma função ou de um aspecto da atividade consciente tem que haver "elementos comuns a ambas funções ou atividades". Vigotski (2001) afirma que "[...] tomar consciência de alguma operação significa transferi-la do plano da ação para o plano da linguagem, isto é, recriá-la na imaginação para que seja possível exprimi-la em palavras" (VIGOTSKI,2001. p. 275). Tomar consciência de um conceito significa passar de um conceito não conscientizado para um conscientizado, pois "para tomar consciência é necessário que haja o que deve ser conscientizado. Para assimilar, é necessário dispor daquilo que deve ser subordinado à nossa vontade. (VIGOTSKI,2001. p. 286)

A linguagem é de fundamental importância para a formação da consciência, pois, influencia todos os campos da atividade consciente do homem, fazendo evoluir os seus processos psíquicos. A linguagem e o discurso devem ser analisados e considerados como uma construção histórica da vida consciente do homem. A linguagem consegue reorganizar de forma substancial o modo de percepção do mundo exterior, criando regras dessa percepção e alterando os processos de atenção do homem. (LURIA,1991. p. 81-82)

A atividade consciente do homem engloba os seguintes processos psíquicos: as sensações, a percepção, a atenção, a memória, o pensamento e a linguagem. As sensações constituem a fonte básica dos nossos conhecimentos e são os principais canais da atividade consciente do homem. Sem elas, as informações relativas aos fenômenos do mundo exterior e ao estado do organismo não chegariam até o cérebro. Costuma-se apresentar cinco tipos de sensações: tato, olfato, visão, audição e paladar. Contudo, para se obter uma classificação com uma resposta mais eficiente, deve-se utilizar dois princípios: "o princípio sistemático e o genético, noutros termos, pelo princípio da modalidade, por um lado, e pelo princípio da complexidade ou do nível de sua construção, por outro". (LURIA,1991, p. 1,9)

As sensações podem ser classificadas em três tipos: interoceptivas, propioceptivas e extraceptivas. As sensações interoceptivas são fundamentais na regulação da balança dos processos internos de metabolismo ou daquilo a que se chama homeostase dos processos de troca no organismo. As sensações propioceptivas, asseguram os sinais referentes à posição do corpo no espaço. As sensações exteroceptivas fazem chegar ao homem a informação procedente do mundo exterior e é justamente entre esse grupo que se situa o olfato, o paladar, o tato, a visão e a audição (LURIA,1991).

A percepção é um processo complexo de síntese de objetos e situações, mediado por conhecimentos e experiências anteriores. Tais experiências trazem informações precisas dos objetos e situações. A percepção apresenta peculiaridades, como seu caráter ativo e imediato, seu caráter material e genérico, sua constância e correção (ortoscopia) e é móvel e dirigível. De forma mais clara temos que

[...] o processo de percepção está intimamente ligado à reanimação dos remanescentes da experiência anterior, à comparação da informação que chega ao sujeito com as concepções anteriores, ao cotejo das ações atuais com as concepções do passado, com a discriminação dos indícios essenciais, com a criação de hipóteses do valor suposto da informação que a ele chega e com a sintetização dos indícios perceptíveis em totalidades e com a (tomada de decisão) a respeito da categoria a que pertence o objeto perceptível. Noutros termos, a atividade receptora do sujeito se assemelha aos processos de pensamento direto e essa semelhança será tanto maior quanto mais novo e mais complexo for o objeto perceptível. (LURIA,1991, p.40)

A atenção é a seleção da informação necessária, o asseguramento dos programas seletivos de ação e a manutenção de um controle permanente sobre elas.

A atenção é determinada por dois grupos de fatores: a estrutura dos estímulos externos e a atividade do próprio sujeito. A atenção pode ser arbitrária quando o homem utiliza seu "livre arbítrio" ou involuntária quando a atenção do homem é atraída pela necessidade. (LURIA,1991)

Segundo Luria (1991, p.39), a "memória é o registro, a conservação e a reprodução dos vestígios da experiência anterior." A memória apresenta alguns tipos principais para o desenvolvimento cognitivo: as imagens sucessivas, eidéticas e representação; a memória verbal e visual. A memória verbal apresenta grande complexidade, porque, o discurso verbal não apenas participa da formação das concepções e da conservação da informação direta. É através do sistema verbal que o homem recebe o maior volume de conhecimentos.

A atividade consciente do homem apresenta três traços fundamentais: não dependência exclusivamente biológica; não é determinada por "impressões evidentes, recebidas do meio, ou por vestígios da experiência individual imediata" e a importância da experiência acumulada pela humanidade na formação e no processo de aprendizagem dos conhecimentos e habilidades do homem. Assim sendo, a gênese da atividade consciente do homem "não deve ser procurada nas peculiaridades da 'alma' nem no íntimo do organismo humano, mas nas condições sociais de vida historicamente formadas". (LÚRIA,1991. p.72)

A relação entre o pensamento e a linguagem se modifica no processo de desenvolvimento tanto quantitativamente quanto qualitativamente. Com respeito ao desenvolvimento da fala pode-se afirmar que suas raízes pré-intelectuais (o grito, o balbucio e as primeiras palavras), são diferentes do que ocorre com o desenvolvimento do pensamento. Contudo, quando a criança se aproxima dos dois anos de idade o desenvolvimento do pensamento e da fala se interceptam, principiando uma forma de comportamento característica do homem a partir da qual a fala se torna intelectual e o pensamento verbalizado. (VIGOTSKI,2001)

A teoria histórico cultural concebe a atividade intelectual verbal como etapas nas quais as funções emocionais e comunicativas da fala são expandidas pela função planejadora. Como resultado a criança adquire a capacidade de engajar-se em operações complexas dentro de um universo temporal. (VIGOTSKI,1991)

Luria (1991) nos informa que existem três formas básicas de comportamento: motor-sensorial, perceptivo e intelectual. O motor-sensorial aparece sob a influência das inclinações congênitas básicas ou necessidades (fome, necessidade sexual).

Enquanto, que o comportamento perceptivo compreende operações de análise direta e síntese e na aquisição dos atos adaptativos, tão importantes para a atividade consciente do homem.

O comportamento "intelectual" é o mais complexo dos comportamentos, pois estabelece uma fase de transição para o trabalho social, com o surgimento dos instrumentos e da linguagem. O domínio da linguagem permite uma codificação abstrata da informação tornando o homem capaz de expressar em palavras a sua tarefa e abstrair a sua solução. Além disso, as tarefas complexas passam a ser resolvidas mentalmente antes de se concretizarem, modificando a percepção na atividade intelectual. (LURIA, 1991)

A respeito da relação entre a percepção e a atividade intelectual temos:

A percepção é parte de um sistema dinâmico de comportamento; por isso, a relação entre as transformações dos processos perceptivos e as transformações em outras atividades intelectuais é de fundamental importância. O uso de signos auxiliares rompe com a fusão entre o campo sensorial e o sistema motor, tornando possível assim, novos tipos de comportamento. A criança que anteriormente solucionava o problema impulsivamente, resolve, agora, através de uma conexão estabelecida internamente entre o estímulo e o signo auxiliar correspondente. (VIGOTSKI, 1999, p.25)

A atividade intelectual prática concreta ocorre nos limites do campo direto e subordina-se inteiramente às leis da percepção direta imediata. Na criança de 2-2,5 anos podemos observar a completa dependência da percepção visual direta. Por conseguinte, nas crianças de 4-5 anos forma-se um novo tipo de comportamento, no qual se separa uma fase de orientação prévia nas condições da tarefa e do esquema de sua sucessiva solução. Nas fases posteriores de desenvolvimento da criança (de 6-7 em diante), através dos testes eficientes diretos, a orientação desenvolvida se torna acessível e o processo de orientação prévia assume o caráter de ação intelectual interna. (LURIA, 1991)

Para a Teoria Histórico Cultural, a consciência é sempre consciência socialmente mediada de alguma coisa, ou seja, é a própria relação do indivíduo com o meio e da pessoa consigo mesmo. A consciência é dinâmica e o seu sistema se desdobra em três acepções principais. Na 1ª acepção, a *tomada de consciência* com respeito ao meio, ao próprio eu e às vivências subjetivas. Na 2ª acepção, Vigotski qualifica diversas funções ou conteúdos psíquicos com o termo consciente, por

exemplo: concepção consciente, memória consciente, ato consciente. E na 3ª aceção do termo, a consciência é, pois, um único sistema psicológico, composto pelas funções psíquicas superiores, portanto, a consciência é uma estrutura composta de outras estruturas. (TOASSA, 2006)

2.1.2.A aprendizagem e o desenvolvimento intelectual

Na análise do desenvolvimento, busca-se descrever as relações internas dos processos intelectuais despertados pelo aprendizado escolar. Neste contexto, deve ficar claro que o aprendizado e o desenvolvimento não ocorrem paralelamente. O mais importante, contudo, é que esta análise deve revelar ao professor como é que a aprendizagem escolar está influenciando o desenvolvimento intelectual do estudante. Não é exagero afirmar que cada disciplina escolar age de forma diferente em todo esse processo e varia de acordo com nível de cada estudante. (VIGOTSKI,1991).

Levando em consideração que a aprendizagem do estudante se inicia anteriormente à escola, ou seja, a aprendizagem escolar nunca parte do zero, tem-se que a aprendizagem escolar não é continuação direta do desenvolvimento pré-escolar em todos os campos é algo de completamente novo ao curso do desenvolvimento da criança. Sendo assim, cada matéria escolar age de forma diferente no processo do desenvolvimento do estudante, relação que muda com a passagem do estudante de uma etapa para outra. (VIGOTSKI,2010)

A aprendizagem escolar orienta e estimula processos internos de desenvolvimento. A aprendizagem não é desenvolvimento, mas a sua organização pode acarretar em desenvolvimento mental do estudante, acionando todo um grupo de processos de desenvolvimento. Por esse motivo, a aprendizagem é um momento intrinsecamente necessário e universal para que se desenvolva no estudante as características humanas não-naturais, mas formadas historicamente.

Em uma análise do processo educativo se deve partir do pressuposto que o processo de desenvolvimento e da aprendizagem não são coincidentes. E sim da ideia de que existe uma interdependência, extremamente complexa e dinâmica, dependência essa que não pode ser justificada por uma única fórmula teórica anterior à experiência. (VIGOTSKI, 2010)

2.1.3. Importância da linguagem escrita para o desenvolvimento

Pode se dizer que na linguagem escrita o pensamento emitido se expressa nos significados formais das palavras que empregamos. Neste contexto, temos que o discurso escrito ao ser comparado ao discurso falado, é um discurso desenvolvido ao máximo e sintaticamente complexo no qual, para enunciar cada pensamento isolado, precisa-se empregar muito mais palavras do que se faz com a linguagem falada. Não é exagero afirmar que a linguagem escrita é a forma de linguagem mais prolixa, exata e desenvolvida e é um processo, mais sofisticado de comunicação, pois temos de transmitir por palavras o que na linguagem falada se transmite por entonação e pela percepção imediata da situação. (VIGOTSKI, 2001)

Como bem nos assegura Vigotski (2001), na escrita é costume empregar palavras, expressões e construções que pareceriam contranaturais na linguagem falada. Neste contexto, pode se considerar a linguagem escrita como diametralmente oposta à linguagem falada. Na linguagem escrita a compreensão é produzida à custa de palavras e combinações e não existe a possibilidade de mímica, gestos ou entonações. Sendo assim, a linguagem escrita contribui para o fluxo do discurso na ordem de uma atividade complexa, tornando-se a forma mais desenvolvida de discurso.

O ensino da linguagem escrita depende de um treinamento artificial diferente do que ocorre com o ensino da linguagem falada. Neste contexto, podemos considerar que a aprendizagem da escrita lembra muito o processo de desenvolvimento de uma habilidade técnica como aprender a tocar um instrumento musical. E assim como as notas musicais o estudante tem que dominar os símbolos da escrita, temos então:

[...] que a linguagem escrita é constituída por um sistema de signos que designam os sons e as palavras da linguagem falada, os quais, por sua vez, são signos das relações e entidades reais. Gradualmente, esse elo intermediário (a linguagem falada) desaparece e a linguagem escrita converte-se num sistema de signos que simboliza diretamente as entidades reais e as relações entre elas. Parece claro que o domínio de um tal sistema complexo de signos não pode ser alcançado de maneira puramente mecânica e externa; ao invés disso, esse domínio é o culminar, na criança, de um longo processo de desenvolvimento de funções comportamentais complexas. (VIGOTSKI, 1991. p.70)

Para Vigotski (1991), o momento em que uma criança assimila o significado de uma palavra, ou domina uma operação tal como a adição ou a linguagem escrita, os processos de desenvolvimento estão apenas começando. E ao se analisar o processo educacional desta maneira, obtém-se a base para o desenvolvimento subsequente de vários processos internos altamente complexos no pensamento das crianças. O estado de desenvolvimento mental de uma criança só pode ser determinado se forem revelados: o nível de desenvolvimento real e a zona de desenvolvimento proximal.

2.1.4. A zona do desenvolvimento proximal ou iminente

O conceito de zona blijaichego razvitia, desenvolvido por Vigotski, é um dos mais difundidos e ao mesmo tempo um dos mais banalizados. No Brasil, esse termo já teve duas traduções com histórias e trajetórias diferentes: zona de desenvolvimento proximal e zona de desenvolvimento imediato. A tradução que mais se aproxima do termo zona blijaichego razvitta é zona de desenvolvimento iminente, pois sua característica essencial é a das possibilidades de desenvolvimento, mais do que do imediatismo e da obrigatoriedade de ocorrência. (PRESTES,2012, p.204)

Para Vigotski a constituição do sujeito é um movimento dialético entre aprendizagem e desenvolvimento. Sendo o desenvolvimento humano compreendido por dois níveis: o primeiro é o nível de desenvolvimento real, que compreende o conjunto de atividade que a criança consegue resolver sozinha e o segundo é o nível de desenvolvimento iminente, no qual a criança não consegue realizar atividades sozinha, porém, com o auxílio de alguém (uma pessoa mais experiente), ela consegue resolver. (ZANELLA, 1994)

De forma simples temos que o nível de desenvolvimento real de uma criança define funções que já amadureceram, ou seja, os produtos finais do desenvolvimento. Se uma criança pode fazer tal e tal coisa, independentemente, isso significa que as funções para tal e tal coisa já amadureceram nela. (VIGOTSKI, 1991)

A constatação de um segundo nível de desenvolvimento ocorreu devido à percepção de Vigotski e da sua equipe a respeito das diferenças no nível de resolução de problemas entre crianças que, aparentemente, apresentavam os mesmos níveis de desenvolvimento real, mas, diferiam sobremaneira quanto às possibilidades futuras de aprendizagem e desenvolvimento. Essa diferença entre o que as crianças resolvem

independentemente e o que conseguem resolver com a ajuda de um adulto ou colega mais experiente é o que Vigotski denominou Zona de Desenvolvimento Iminente (ZDP). (ZANELLA, 1994)

Zanella (1994), afirma que Vigotski nos últimos quinze meses de vida, utilizou o conceito de ZDP em três diferentes contextos, a saber:

1º) o conceito de ZDP enquanto escore que marcava a distância entre a atuação independente do indivíduo e a atuação "assistida", i.e. com a ajuda de alguém mais experiente.

2º) A explicação de ZDP enquanto assentada nas diferenças gerais que aparecem no desenvolvimento da criança quando esta se encontra em contextos assistidos socialmente e contextos individuais, direção esta que, na verdade, é uma "generalização da primeira, diferenciando-se dessa por não se tratar de escore.

3º) A criação da ZDP através do jogo. Aqui o jogar assume o mesmos status que o processo ensino-aprendizagem na interdependência com o desenvolvimento humano, uma vez que a criança vivencia papéis sociais que se encontram muito além de suas possibilidades. (ZANELLA, 1994, p.98)

A zona de desenvolvimento iminente define aquelas funções que ainda não amadureceram, porém, estão amadurecendo e que amadurecerão durante o processo de aprendizagem. A característica marcante na zona de desenvolvimento iminente e que a diferencia do desenvolvimento real é o desenvolvimento mental prospectivo. Além disso, a zona de desenvolvimento iminente permite-nos descrever o futuro imediato da criança e seu estado dinâmico de desenvolvimento, dando condições de acessar não somente ao que já foi atingido através do desenvolvimento, como também àquilo que está em processo de maturação. Desta forma, pode-se afirmar que o "bom aprendizado" é somente aquele que se adianta ao desenvolvimento. (VIGOTSKI, 1991)

No contexto da sala de aula, deve se ter em mente que a ZDP não é simplesmente o ato de ensinar ou avaliar as habilidades isoladas do estudante. Ensinar apresenta complexidades, cujo objetivo que é a apropriação de conhecimentos por parte dos estudantes e a construção de funções psicológicas superiores com autonomia no pensar e no agir. Portanto, temos que o foco para uma análise da ZDP é a natureza das transações sociais. O sistema social é de total importância na aprendizagem das crianças, sistema esse entendido como mutuamente e ativamente criado pelo professor e seus alunos. (ZANELLA, 1994)

Qualquer análise vigotskiana da instrução incide, pois, na interdependência do adulto (pessoa experiente) e da criança (estudante ou aprendiz). A zona de desenvolvimento iminente consiste no campo interpsicológico, constituído na e pelas interações sociais em que os sujeitos se encontram envolvidos com problemas ou situações que remetam à confrontação de pontos de vista diferenciados. (ZANELLA,1994)

2.2. O QUE É O CONCEITO?

Vigotski confere aos processos de ensino um importante papel na aquisição dos conceitos científicos. A aprendizagem leva o estudante em direção a uma percepção generalizada, aspecto importante para que este possa se conscientizar dos próprios processos mentais: “a consciência reflexiva chega à criança através dos portais dos conhecimentos científicos” (SCHROEDER, 2007).

Como nos assegura Vigotski (20001), não existe definição sem a palavra, o material relativo aos sentidos e a palavra são partes indispensáveis do processo de formação dos conceitos, e a palavra dissociada desse material, transfere todo o processo de definição do conceito para o plano puramente verbal. Ao se utilizar o método da definição, fica difícil determinar a relação existente entre o significado e a palavra. O essencial mesmo para o conceito - a sua relação com a realidade – acaba sendo excluída da investigação. É importante levar em consideração o seguinte:

[...] todas as funções psíquicas superiores têm como traço comum o fato de serem processos mediatos, melhor dizendo, de incorporarem à sua estrutura, como parte central de todo o processo, o emprego de signos como meio fundamental de orientação e domínio nos processos psíquicos. No processo de formação dos conceitos, esse signo é a palavra, que em princípio tem o papel de meio na formação de um conceito e, posteriormente, toma-se seu símbolo. (VIGOTSKI, 2001, p.152)

Vigotski (2001), afirma que o conceito é dinâmico e dependente, fato evidenciado quando se investiga o uso das funções psíquicas na solução de problemas. Nessas situações, consegue-se perceber o processo de elaboração, o processo de transferência, o emprego do conceito no processo de livre associação e, por último, a aplicação do conceito na formação de juízos e definição de conceitos reelaborados. Sendo assim, pode-se afirmar que a formação de conceito ou a

aquisição de sentido através da palavra é o resultado de uma atividade intensa e complexa (operação com palavra ou signo), da qual todas as funções intelectuais básicas participam em uma combinação original.

Os conceitos estão no centro da atividade cognitiva: a aprendizagem é uma aquisição ou assimilação do sistema de conceitos científicos e só é possível por meio da relação mediada com o mundo dos objetos, ou através de outros conceitos prévios do estudante. O conceito, em sua forma natural e desenvolvida, implica na combinação e na generalização de determinados elementos concretos da experiência, na discriminação, na abstração e no isolamento de determinados elementos, na habilidade de examinar esses elementos discriminados e abstraídos fora do vínculo concreto e baseado em fatos dados na experiência.

Na Teoria Histórico-Cultural, trabalha-se com a palavra em termos psicológicos, ou seja, a palavra e o poder de generalização do seu significado, seu conceito. A palavra é um ato verbal do pensamento que reflete a realidade de modo inteiramente diferente do que é revelado pelas sensações e percepções imediatas. O significado da palavra, do ponto de vista psicológico, é um ato de pensamento generalizado. Sem o significado à palavra deixa de ser palavra, passa a ser um som vazio e não exerce sua função de linguagem. (VIGOTSKI, 2001)

Epistemologicamente, temos que um conceito, é uma entidade mental e linguística. Mais especificamente, podemos afirmar que "um conceito é um conhecimento mais geral aplicado a um objeto ou uma situação particular que representa uma categoria de objetos, de eventos ou de situações e pode ser expresso por uma ou mais de uma palavra" (HARDY VALÉE, 2013, p.16). Portanto, a concepção filosófica do conceito corrobora com a concepção histórico-cultural que o conceito é um ato de generalização expresso por uma palavra.

Para a teoria histórico-cultural, tem-se que fazer uma análise histórica para se ter uma compreensão lógica dos conceitos. Pois, o conceito evolui com os significados das palavras e a passagem de uma estrutura de generalização a outra. Estrutura é:

a) um conjunto de elementos com leis próprias independentes das leis que regem cada um desses elementos; b) a existência de tais leis relativas ao conjunto implica que a alteração de um dos elementos provoque a alteração de todos os outros; c) dado que o valor de cada elemento não depende apenas do que ele é por si mesmos, mas depende também, e sobretudo, da posição que ele ocupa em relação a todos os outros do conjunto. (COELHO, 1965. p.XXI)

Segundo a Teoria Histórico-Cultural a ausência de unidade dos vínculos, de hierarquia, o caráter concreto dos vínculos que lhe servem de base, a relação original entre o geral e o particular e vice-versa, denota todas as formas de pensamento por complexos, ou seja, o estudante ainda não desenvolveu sua capacidade de abstração. Sendo assim, a metáfora vigotskiana do mapa *mundi* pode ser uma maneira de apresentar o conceito estruturado em uma hierarquia e organizado em um sistema de conceitos. Nesta perspectiva, um conceito pode ser analisado pelo conjunto de coordenadas dadas em medidas de longitude e de latitude. Desta forma, os termos colocados no topo (no polo norte do mapa) representarão o pensamento abstrato e os colocados mais abaixo (no polo sul), representarão o pensamento concreto. (BELLAS; GONZALEZ; SILVA, 2015, p. 4-5)

2.2.1 Conceito científico e conceito espontâneo

A formação de conceitos demanda ações de pensamento diversificadas, ligadas ao livre movimento no sistema de conceitos, à generalização de generalizações antes formadas, a uma operação mais consciente e mais arbitrária com os conceitos prévios. Portanto, o desenvolvimento do conceito científico começa justamente pelo que ainda não foi plenamente desenvolvido nos conceitos espontâneos ao longo de toda a idade escolar. Começa habitualmente pelo trabalho com o próprio conceito como tal, pela definição verbal do conceito, por operações que pressupõem a aplicação não espontânea desse conceito (VIGOTSKI, 2001).

O conceito pode ser espontâneo e científico, lembrando que o termo *científico* neste trabalho, se refere ao conceito ensinado/aprendido na escola. Na escola, vários conceitos científicos são ensinados e na sua maioria esses conceitos não fazem parte da vivência do estudante, os conceitos são apresentados pelo professor, definido (quando isso é possível) ou trabalhado de um modo distante do cotidiano do aluno. O conceito que é aprendido na escola sempre tem relação com outros conceitos — como parte de um conteúdo curricular sistematizado — e de modo intencional, voluntário — por isso, consciente. (SILVA, [s.d])

A formação dos conceitos científicos tem como base o processo de formação de conceitos espontâneos. Na escola, vários conceitos científicos são ensinados à criança. À medida que a formação de conceitos científicos se desenvolve, a sistematização e conscientização próprias deste tipo de conceitos atuam sobre a

formação de conceitos espontâneos, abrindo novas possibilidades. É o caso da melhoria na precisão e na articulação da linguagem do senso comum.

Para Vigotski (2001), o desenvolvimento dos conceitos espontâneos e científicos são processos intimamente conectados e são mutualmente influentes. O desenvolvimento dos conceitos científicos depende de um amadurecimento dos conceitos espontâneos, pois o desenvolvimento dos conceitos científicos só se torna possível depois que os conceitos espontâneos do estudante atingiram um nível próprio escolar. A assimilação do sistema de conceitos científicos só é possível por meio da relação mediada com o mundo dos objetos, ou através de outros conceitos prévios do estudante.

Segundo Vigotski (2001), pode-se dizer que a tomada de consciência se fundamenta na generalização dos próprios processos psíquicos. Nessa circunstância, os conceitos científicos são o campo em que ocorre a tomada de consciência dos conceitos. Sendo assim, tem-se que a causa da não-conscientização dos conceitos está na ausência de sistematicidade dos conceitos científicos resultando em conceitos não conscientizados e não-voluntários. Conclui-se então que a tomada de consciência dos conceitos se efetiva por meio da formação de um sistema de conceitos, fundamentado em determinadas relações mútuas de generalidade os tornando arbitrários (voluntários).

Um passo fundamental no estudo da formação de conceitos foi a experiência realizada por Sakharov, um colaborador de Vigotski. Um estudo experimental chamado por Vigotski de método funcional de dupla estimulação, cuja essência eram duas séries de estímulos; na qual uma desempenhava a função do objeto da atividade do sujeito experimental, a outra, a função dos signos através dos quais essa atividade de organiza. Desta maneira, o problema e o observação de como o sujeito experimental aplica os signos como meios de orientação das suas operações intelectuais são o foco principal de todo o processo.

Como resultado da utilização do método de Sakharov, se inferiu que o processo de formação de conceitos, é composto pelo pensamento sincrético, pensamento por complexos e pelo pensamento por conceitos. Temos então, que o pensamento sincrético é quando não ficam claras as relações que foram estabelecidas para formar os conceitos. Pelo fato dessas relações não serem claras, supõe-se que existam subjetivamente e que sejam sincréticas, quer dizer, de natureza heterogênea. O pensamento por complexos está ligado aos fatos — objetos, eventos

experiências concretas — vivenciados pelo sujeito. Nesse sentido, o sujeito já desenvolveu a abstração— porque consegue separar mentalmente traços dos objetos para tomá-los em consideração — e generalidade — porque consegue formar grupos de objetos empregando os traços abstraídos como critérios de agrupamento — mas, ainda não se encontra no nível de abstração e generalidade do conceito, porque não consegue se libertar da concretude da experiência. (SILVA, [s.d])

No estágio final do pensamento por complexos é quando o modo de emprego das palavras sugere conceitos, mas, estas ainda estão presas aos fatos. Por isso, diz ser um pensamento por pseudoconceitos. A passagem do pensamento por complexos ao pensamento por conceitos acontece quando a pessoa aprende a analisar e a abstrair elementos de uma experiência concreta; a separar tais elementos discriminados e abstraídos da experiência em si e voltar a sintetizá-los em uma categoria que abarque todas as experiências que possuem esses elementos (generalização); o pensamento pode ser considerado conceitual quando a pessoa utiliza dessas categorias para conhecer e atuar na realidade em que vive (SILVA,[s,d]).

De forma mais clara temos que não existe pensamento em conceitos sem pensamento verbal; e o momento central é o emprego específico da palavra, o emprego funcional do signo como meio de formação de conceitos. É justamente o problema proposto, que torna necessário e estimula o adolescente a desenvolver o seu pensamento.

2.3. HISTÓRIA DO CONCEITO DE ORBITAL ATÔMICO

Segundo a Teoria-Histórico Cultural para se ter uma compreensão lógica dos conceitos é necessário fazer uma análise histórica. Para que se tenha um bom entendimento do conceito é necessário conhecer a sua evolução ou seja, como a discriminação e a abstração de determinados elementos da realidade vieram a aglutinar-se na formação do conceito (VIGOSTSKI,2001).

2.3.1. A teoria quântica do átomo

As tentativas de explicar os espectros de emissão foi um dos motivos responsáveis pelas primeiras formulações de uma teoria quântica do átomo. Em 1864,

Mitscherlich foi o primeiro a observar que as regularidades observadas nos espectros tinham relação com átomos e moléculas. Entre o final do século XIX e o início do século XX, houve um grande desenvolvimento na espectroscopia devido às descobertas das séries de linhas no espectro do hidrogênio, em outras regiões do espectro de radiação eletromagnética, que obedeciam à fórmula geral proposta por Rydberg : $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ (BUNGE, 1977). Anteriormente às contribuições de Rydberg, houve a proposta de Balmer, e posteriormente, as propostas de Kayser, Runge que a ampliaram

[...] a abrangência da fórmula inicial para uma equação geral. [...] em 1903 duas novas propostas derivadas da proposta de Rydberg foram apresentadas por Fowler e por Ritz. [...], no entanto ainda eram muito frágeis as relações que se construíram entre a estrutura dos átomos e a espectroscopia, principalmente quando eram considerados modelos atômicos “estáticos” como o de Dalton. A concepção ondulatória da luz foi predominante nas análises de espectros de absorção e emissão até o início do século XX. Incluía analogias com fenômenos acústicos. O estudo de espectros teve grande influência nas propostas de Nagaoka, Nicholson e Bohr. (LOPES, 2009. p.14-15)

Em 1913, Niels Bohr propôs o seu modelo atômico que explicava perfeitamente o espectro do átomo de hidrogênio. O modelo consiste em um núcleo central com uma carga $+Ze$, sendo Z o número atômico e um elétron de carga $-e$ girando ao redor do núcleo com velocidade v numa órbita de raio r . Uma das considerações mais importantes de Bohr foi que um sistema atômico não pode existir em todos os estados possíveis mecanicamente, formando um contínuo, mas em uma série de estados estacionários discretos. (BORN, 1954). Bohr, obteve uma expressão da energia na qual cada estado correspondia a um número inteiro natural. Tais números foram chamados de números quânticos e indicam de forma breve os estados de energia dos elétrons nos átomos.

Sommerfeld, em 1923, introduziu a noção de centro de gravidade do átomo e órbitas elípticas com a intenção de aprimorar o modelo atômico proposto por Bohr, pois não explicava a contento os átomos com mais de um elétron. No seu modelo Sommerfeld utilizou orbitas elípticas que precisavam de duas coordenadas polares para ser descrita. Desse modo, foram criados o número quântico radial, n_r , que estava relacionado com a distância do elétron ao núcleo e o número quântico azimutal, k , que diz respeito ao ângulo azimutal, com os quais, o modelo atômico explicava a estrutura

do espectro atômico. Cada uma destas variáveis deveria ser quantizada. Em 1925, foi proposto por Goudsmit um quarto número quântico chamado *spin* (relacionado com a propriedade dos elétrons terem seu próprio momento magnético). (SANTOS; RAMOS; SILVA, 2015)

Louis de Broglie introduziu o conceito de ondas de matéria em 1924, em um momento em que era difícil justificar a ideia de que os elétrons poderiam ocupar apenas determinados níveis de energia, como propôs Niels Bohr em seu modelo atômico. Nessa época era defendido pelos cientistas a ideia do elétron como uma partícula, minúscula e esférica circulando ao redor do núcleo como um planeta girando em torno do Sol. Na hipótese criada por Louis de Broglie, uma onda está associada com cada partícula, cujo comprimento de onda da onda material está inversamente relacionado com o momentum da partícula. (HEWITT, 2012, p.609).

Com essas *ondas de matéria* introduzidas por de Broglie, o elétron é concebido como se sua massa e sua carga estivessem espalhadas em uma onda estacionária circundando o núcleo atômico, a qual apresentava um número inteiro de comprimentos de onda de forma a se adequar às órbitas circulares. Por serem múltiplos do número quântico radial, os valores dos raios de tais órbitas e dos níveis de energia, também são discretos. Desta forma, cai por terra a teoria que os elétrons descrevem uma trajetória em espiral, aproximando-se cada vez mais do núcleo e fazendo com que os átomos encolham para o tamanho de um núcleo minúsculo. (HEWITT, 2012, p.609)

A antiga teoria quântica apresentava alguns aspectos indesejáveis como: tratar apenas de sistemas periódicos; ser bem-sucedida apenas para átomos de um elétron e falhar quando aplicada ao átomo do He neutro, que contém apenas dois elétrons. Diante disso surgiu a necessidade de uma teoria quântica resolvesse tais problemas (EISBERG; RESNICK, 1994).

O desenvolvimento da mecânica quântica moderna teve seu início em 1925, quando Werner Heisenberg concebeu a ideia de representar quantidades físicas por conjuntos de números complexos dependentes do tempo. Pouco tempo depois, foi elaborada por Born, Jordan e pelo próprio Heisenberg uma nova abordagem para essas ideias de Heisenberg, que ficou conhecido como mecânica matricial, a mais antiga teoria consistente dos fenômenos quânticos. (JAMMER, 1974, p.22)

No final de janeiro de 1926, Erwin Schrodinger, completou a primeira parte de seu histórico trabalho "Quantização como um problema de autovalor ". Seis meses

depois, Schrodinger publicou a quarta comunicação deste artigo, que continha a equação de onda e a teoria da perturbação dependentes do tempo e várias outras aplicações dos novos conceitos e métodos. No final de fevereiro daquele ano, após completar sua segunda comunicação, Schrodinger descobriu que seu próprio formalismo e a matriz de Heisenberg eram matematicamente equivalentes. (JAMMER, 1974, p.22)

Max Born, em 1926, formulou a sua interpretação da função de onda sob influência dos trabalhos de Einstein, Heisenberg e Schroedinger. Born utilizou a ideia de Schroedinger, que considerava os elétrons como uma distribuição contínua da densidade $|\psi|^2$ (ou densidade eletrônica e $|\psi|^2$). A ideia de Einstein para tornar compreensíveis a dualidade de partículas e ondas, como a densidade de probabilidade para a ocorrência de fótons, levou Born a pensar que este conceito poderia ser usado para ser a função ψ . Sendo $|\psi|^2$ a representação da densidade de probabilidade de elétrons. Tais representações geram representações pictóricas ou expressões gráficas que passaram a ser interpretadas como “a probabilidade de um elétron ser encontrado precisamente no elemento de volume” (BORN, 1969, p. 147).

Segundo Jammer (1974, p.22), a compreensão da importância dos trabalhos de Heisenberg, Schrödinger e Born só foi alcançada depois de 1930, porém pode se considerar que em 1926, o essencial do formalismo matemático da mecânica quântica atingiu sua conclusão. Esse formalismo ganhou ainda mais importância ao obter sucesso na explicação de praticamente todos os fenômenos espectroscópicos conhecidos, incluindo os efeitos de Stark e Zeeman, bem como o efeito fotoelétrico.

2.3.2 Orbital como região do espaço

O termo orbital foi introduzido por Robert S. Mulliken (1932, p. 50) como um modo abreviado para se referir à “função de onda orbital para um elétron”. No mesmo artigo, Mulliken explica que “um orbital atômico correspondente ao movimento de um elétron no campo de um único núcleo mais outros elétrons” e um orbital molecular “corresponde ao movimento de um elétron no campo de dois ou mais núcleos além de outros elétrons”. Ele afirma ainda que “todo orbital degenerado não pode ser ocupado por mais de dois elétrons” de acordo com as orientações do spin eletrônico. (MULLIKEN 1932, p.50-51)

Em 1966, em sua Conferência Nobel, Mulliken conceitua orbital como:

Agora, para tentar uma resposta à questão colocada no início (o que é orbital?), um orbital, é aproximadamente, algo como uma órbita; ou, mais precisamente, algo muito parecido com uma órbita como é possível na mecânica quântica. Ainda mais precisamente, o termo "orbital" é simplesmente uma abreviatura para a função de onda orbital para um elétron ou, de preferência, para autofunção orbital de um elétron. Esta última expressão refere-se a qualquer uma das chamadas soluções características ou autofunções de equação de onda da mecânica quântica de Schrödinger para um único elétron em um átomo ou molécula. (MULLIKEN, 1966, p.132)

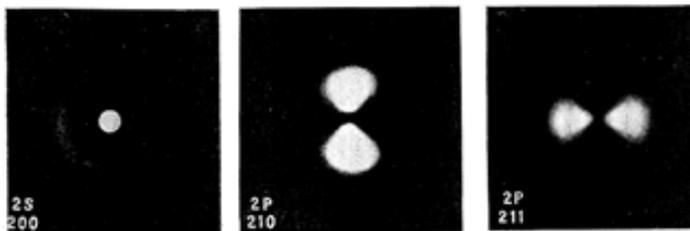
Mulliken estendeu esse conceito para:

[...] um conjunto de orbitais representa um arranjo de habitação para os elétrons. Uma regra muito rigorosa (princípio de exclusão de Pauli) aplica-se a todos os orbitais, quer atômico ou molecular, ou seja, que máximo de dois elétrons podem ocupá-lo. Em outras palavras, ele pode estar vazio, ou ele pode conter um elétron, ou ele pode conter dois elétrons. (MULLIKEN, 1966.p.132).

Nesta citação de Mulliken fica bem clara a sugestão de orbital como lugar do espaço, o que pode ser percebido pelo emprego dos termos: habitação, ocupação, vazio, contenção. Essa ideia era ausente nos seus primeiros trabalhos.

Um fato interessante é que as imagens dos orbitais surgiram inicialmente no artigo de Slater em 1931, no trabalho intitulado "Directed Valence In Polyatomic Molecules", antes do próprio conceito de orbital criado por Mulliken em 1932. Nesse trabalho são apresentadas algumas imagens das densidades de cargas para as funções s e p (Fig.1), que mais tarde serão chamadas de orbitais s e p.

Figura 1: Distribuição de carga de p^+ e p_0 , com s para comparação (imagens feitas por Langer).



Fonte: artigo de Slater (1931, p.482)

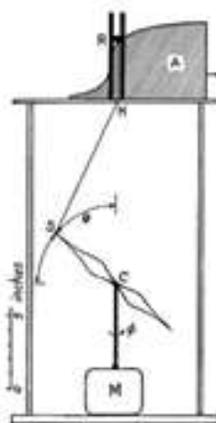
Essas imagens também são utilizadas nos trabalhos de White "*Pictorial Representations of the Electron Cloud for Hydrogen-Like Atoms*", de 1931 e no seu livro "*Introduction to atomic spectra*", de 1934. White (1931), explica que Langer e

Walker utilizando um método que não foi publicado produziram fotografias de densidade de probabilidade que representam os 5 estados esfericamente simétricos e os estados $2p$, $m = +1$ e 0 . E que as tentativas preliminares para produzir um modelo em três dimensões da densidade de probabilidade $\psi\psi^*$ resultou de um dispositivo mecânico criado por Langer. Conforme informações destes autores temos:

Como mostrado na Fig. 1, feita por um método muito engenhoso pelo Dr. Langer, o primeiro e o terceiro são grandes no plano x-y, em uma região em forma de anel; o segundo é grande ao longo do eixo de s e é mais concentrado do que os outros. Mas podemos usar quaisquer três combinações lineares ortogonais dessas funções. (SLATER,1931. p.482)

Na Figura 2, é mostrado o equipamento utilizado por Dr. Langer para criar as imagens das densidades de probabilidade

Figura 2: Equipamento utilizado por Langer para criar as imagens da densidade de probabilidade. Um dispositivo mecânico que quando colocado em movimento e fotografado representa a nuvem de elétrons para os vários estados dos átomos do tipo hidrogênio. O modelo mostrado na figura é para um elétron 3d.



Fonte: (White,1931, p.1422)

e seu funcionamento é explicado por White (1931), da seguinte forma:

Um tal eixo é articulado no seu centro por um pino pequeno em C, e posto em rotação em torno do eixo vertical, por meio de um motor M. Este movimento dá a simetria necessária sobre o 0(zero). Ao mesmo tempo que a rotação em torno do eixo φ está a decorrer, o ângulo θ é alterado lentamente a partir $\theta = 0$ e $\theta = \pi / 2$ por meio de um giro de S e um cordão duplo SHR que passa através de um orifício no tampo da mesa para um rolo R, o movimento está confinada à ranhura. Curvas de madeira fina, na Fig. 2, estão cortadas de modo que, possam ser deslocadas lentamente, mas com uma velocidade uniforme ao longo do tampo da mesa no sentido indicado pela seta angular. (White,1931, p.1422)

O trabalho de White (1931), vai mais além do que o de Slater e afirma que apesar do sucesso da mecânica quântica termos como: órbitas de elétrons mais simples, órbitas penetrantes e órbitas não-penetrantes, ainda era utilizado. White (1931), justifica que isso ocorria porque em muitos casos é possível obter os mesmos resultados ou quase os mesmos resultados dados pela mecânica quântica. White (1931), utiliza as coordenadas angulares para traçar as imagens referentes a $[\Theta_m]^2$ (densidade de probabilidade) e faz uma série de correlações interessantes com as órbitas clássicas de Bohr-Sommerfeld, conforme imagens mostradas na Fig. 3 para elétrons s, p, d, f, g e h.

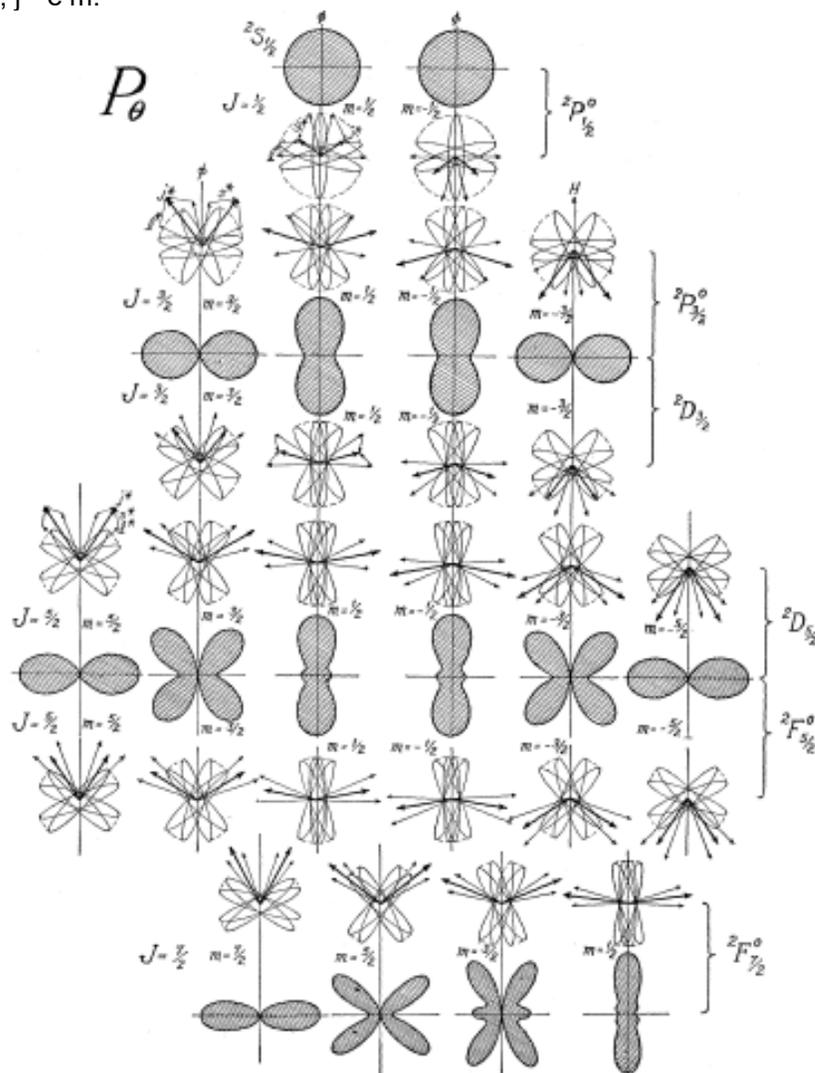
Pode-se observar que abaixo de cada figura de probabilidade tem uma órbita clássica correspondente. White (1931) reforça que o elétron não se limita à área sombreada, porém a magnitude de uma linha que une o centro e qualquer ponto da curva é uma medida da probabilidade de elétrons, sendo encontrado na direção daquela linha.

Além dos trabalhos de White e Slater, as imagens das fotografias apresentadas nas figuras 1 e 4, também são mostradas no livro de Herzberg (1937) e Born (1937) o que demonstra uma aceitação grande por parte dos cientistas da época de tais imagens. Herzberg (1937), utiliza as imagens da Figura 4 (abaixo) e explica que o elétron está espalhado sobre a totalidade do espaço. Porém, a probabilidade de encontrar o elétron em qualquer grande distância para fora da região da órbita de Bohr é muito pequena devido a diminuição exponencial na direção do exterior e uma vez que já não têm órbitas de elétrons distintas, talvez seja melhor considerar tais imagens como nuvens de elétrons ao redor do núcleo.

Em 1926, Max Born, propôs que o quadrado da função de onda, ψ , deveria ser interpretado como a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula no espaço. Born (1937), explicava que o motivo para se usar o quadrado do módulo da função de onda é por se tratar de uma quantidade complexa, enquanto que as grandezas suscetíveis de interpretação física necessitam ser reais. Segundo o ponto de vista de Born (1937), um estado no espaço corresponde uma probabilidade definida dada pela onda de de Broglie associada com o referido estado. Sendo assim, o processo mecânico é seguido por um processo ondulatório, a onda piloto, descrita pela equação de Schroedinger. Dentro desta perspectiva o quadrado do módulo da

função de onda fornece a probabilidade de um dado comportamento do processo mecânico.

Figura 3: O fator angular, P_θ , da densidade de probabilidade $\psi\psi^*$ plotado em coordenadas angulares. Acima e abaixo das distribuições de elétrons mecânicos quânticos, as órbitas de elétron clássicas correspondentes são mostradas orientadas em cada caso de acordo com o modelo l^*, s^*, j^* e m .



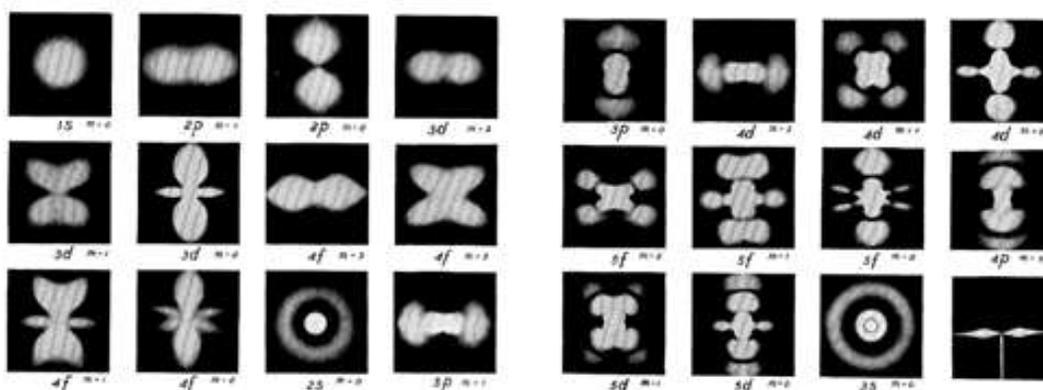
Fonte: White (1931, p.517)

Max Born (1937), explica que a distribuição de carga é obtida quando se multiplica a função de probabilidade $|\psi_n|^2$ para um estado definido pela carga e do elétron e é conhecida como distribuição de densidade de elétrons no átomo, ou nuvem eletrônica ao redor do núcleo. E reitera que do ponto de vista da interpretação estatística tem significado claro e pode ser representado através de imagens como mostra a Fig. 4. “Tais figuras representam as projeções (sombras) das nuvens

eletrônicas em vários estados; as posições das superfícies nodais podem ser reconhecidas ao mesmo tempo”. (BORN, 1937, p.120)

Nos trabalhos de White (1931) e Slater (1931) as fotografias de densidade de probabilidade (Figura 4) são chamadas de imagens da nuvem eletrônica. Essa forma de denominar as fotografias de densidade de probabilidade permaneceu até os dias atuais, mesmo depois do surgimento do conceito de orbital, informações que podem ser verificadas nos trabalhos de Born (1937) e Herzberg (1937).

Figura 4: Projeções das nuvens eletrônicas em vários estados



Fonte: Born (1937.p.133)

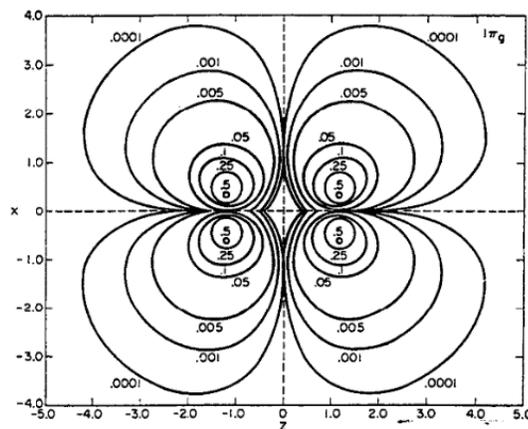
Mulliken fala sobre o orbital como região do espaço, termo que não aparece em trabalhos dele na década de 1930. Ele diz:

Um orbital (seja atômico ou molecular), estritamente falando, é apenas uma função matemática no espaço tridimensional comum. Quando um elétron está ocupando um orbital, **a forma do orbital nos diz, entre outras coisas, qual fração de tempo que o elétron pode gastar em diferentes regiões do espaço em torno do núcleo**, ou núcleos. **Cada orbital favorece algumas regiões particulares do espaço e desfavorece outras**, no entanto, todos os orbitais em um determinado átomo ou molécula se estende pelo menos em pequena extensão ao longo de todas as regiões do átomo ou molécula. Orbitais diferem mais impressionante das órbitas da teoria Bohr no fato de que eles não especificam caminhos detalhados para elétrons. Eles, no entanto, dão alguma informação sobre as velocidades médias bem como as posições dos elétrons. (MULLIKEN,1966. p. 133, grifo nosso)

Mulliken (1966, p.136), apresenta algumas figuras que mostram o mapa de contorno da camada de valência do orbital molecular da molécula de oxigênio. Ele chama de “retratos” de orbital molecular, no qual cada contorno é marcado por um

número que dá a magnitude, não do próprio orbital molecular, mas do seu quadrado. O uso do quadrado é importante para mostrar que “o valor do orbital em algum ponto do espaço é proporcional à probabilidade de encontrar o elétron naquele ponto quando ele estiver no orbital”. Sendo assim, o que a Fig. 4 está apresentando são “retratos de densidade de probabilidade, ao invés de imagens diretas do orbital molecular”.

Figura 5: Contornos de densidade de carga de orbitais moleculares para a molécula de oxigênio



Fonte: Mulliken (1966, p.134)

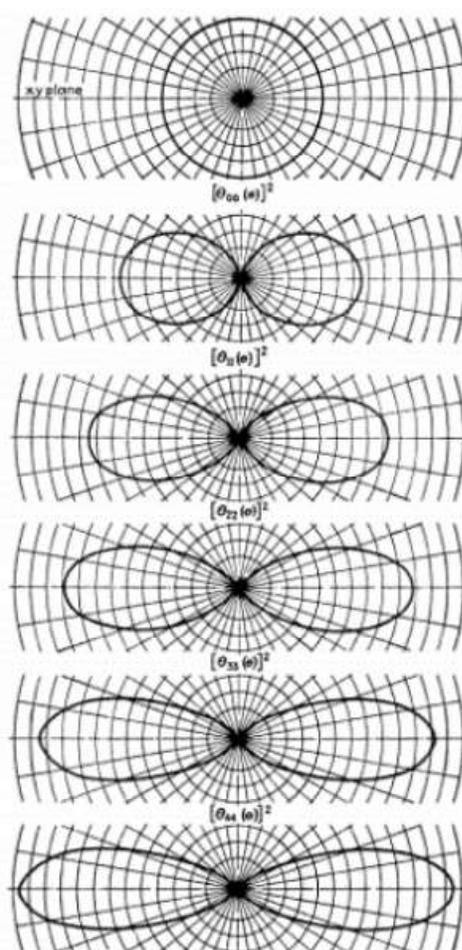
A respeito do conceito de orbital Mulliken argumenta que “em 1932 foi proposto por ele o termo "orbital" como uma abreviação para função de onda orbital de um elétron. Além disso, foram discutidos também os orbitais atômicos e moleculares e o seu significado em termos da teoria de campo auto consistente Hartre-Fock. Mulliken (1978), afirma que os símbolos abreviatura MO e AO foi criado por ele em 1939 e surgem no artigo intitulado (Intensities of Electronic Transitions in Molecular Spectral Introduction). Assim como o termo "spin-orbital" foi introduzido por ele em 1948. (MULLIKEN, 1978.p.5)

No livro de Pauling e Bright Wilson Jr (1935), o conceito de orbital passa a ser utilizado como substituto de função de onda:

Seguindo Mulliken, nos referiremos ocasionalmente a funções orbitais de um elétron, como as funções de ondas hidrogenóides deste capítulo, como orbitais. De acordo com a prática espectroscópica, também usaremos os símbolos s, p, d, f, g, ... para nos referirmos aos estados caracterizados pelos valores 0, 1, 2, 3, 4 ..., respectivamente, do número quântico azimutal l, falando, por exemplo, de orbital s para significar um orbital com $l = 0$. (PAULING e BRIGHT WILSON Jr 1935, p.137)

As imagens ganham denominação de orbitais, os autores explicam que na antiga teoria quântica a quantização espacial determinava o plano da órbita em relação a direção fixa do eixo z, o plano sendo normal ao eixo z para $m = \pm l$ e inclinados em diferentes ângulos para outros valores de m e que interpreta a distribuição de probabilidade função $\psi^*\psi$ de uma maneira similar. Por exemplo, as figuras referentes aos orbitais p é mostrado na figura 6:

Figura.6: Gráficos das funções polares $[\theta_{lm}(\vartheta)]^2$ para $m = \pm l$ and $l = 0, 1, 2, 3, 4, \text{ e } 5$, mostrando a concentração da função sobre o plano xy com o aumento do l.



Fonte: PAULING.L; BRIGHT WILSON Jr (1935.p148)

Nota-se nos gráficos a tendência de concentrar-se em direções correspondentes ao plano da órbita orientada de Bohr (plano determinado na medida em que seu ângulo com o eixo z é fixo) (PAULING.L; BRIGHT WILSON Jr, 1935.p.149). Sherman e Van Vleck (1935), argumentam que primeiramente Slater e depois Pauling, recomendaram que no método Heitler-London do haltere em forma de

nuvens de carga em $\psi_{p\sigma z}$, $\psi_{p\sigma y}$, poderiam ser responsáveis por muitos fenômenos de valência direcional, especialmente aquelas que envolvem ângulos retos.

O conceito de nuvem de carga, bastante utilizado na química, é uma interpretação da função de onda mais pictórica e menos rigorosa, pois os elétrons são “considerados como espalhados sob a forma de uma nuvem (nuvem de carga), a densidade da nuvem, em qualquer ponto é proporcional à Ψ^2 ”. A densidade da nuvem de carga varia com o Ψ^2 e a maior concentração de carga negativa está nos lugares onde Ψ^2 é maior. “A objeção a esta interpretação é que um único elétron não pode ser distribuído pelas regiões do tamanho de um ou dois raios Bohr”. (COULSON, 1947. p. 145)

2.3.3 Funções de onda radial e distribuições radiais⁴

Para Cox (1996), as formas dos orbitais são importantes nas teorias de ligação química, porém são menos significativos na compreensão dos próprios átomos do que a função radial. Quando a equação de Schrodinger é separada, verifica-se que a parte radial das funções de onda, deve ser uma solução da equação diferencial

$$\frac{1}{2mr} \frac{d^2(rR)}{dr^2} + \left(E - \frac{l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R = 0$$

A Figura 7, mostra as formas de outras funções de onda radial para orbitais com n até três. Pode-se observar que as funções dos orbitais s são diferentes de zero no núcleo, enquanto os outros orbitais são nulos. A outra característica óbvia é que o número de nós é igual a $n - \ell - 1$. Se nos lembrarmos de que as funções angulares também podem ter nós, sendo o número ℓ , então é evidente que o número total de nós em qualquer orbital atômico é igual a $n - 1$; isso aumenta com a energia.

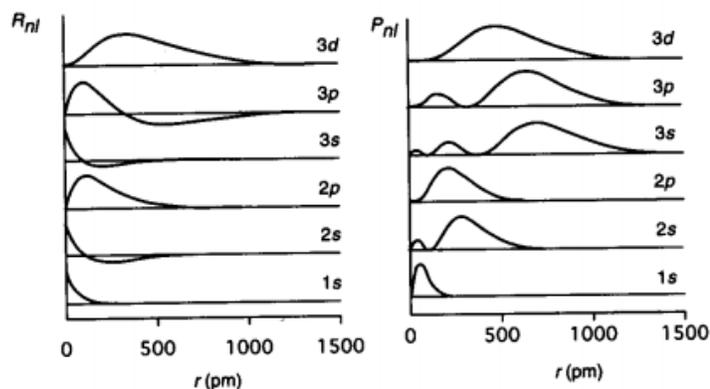
Os tamanhos dos orbitais atômicos também aumentam com a energia; de fato, como na teoria de Bohr ($r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2}{me^2}$), o raio médio de um orbital é dado aproximadamente a $r = n^2 a_0$ e $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$.

$P(r)$ fornece a probabilidade de que um elétron no orbital correspondente seja encontrado a uma distância r do núcleo. Mais estritamente, $P(r).dr$ é igual à

⁴ Essa seção foi baseada na obra Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure, 1996.

probabilidade de encontrar o elétron em algum lugar na casca esférica entre o raio r e $r + dr$. De acordo com a interpretação de Born, ψ^2 dá a probabilidade de encontrar o elétron perto de um certo ponto no espaço.

Fig.7. Função de função radial (R) e funções de distribuição radial para orbitais atômicos com n até três. As escalas verticais não são as mesmas para diferentes orbitais.



Fonte: (COX,1996)

As funções de distribuição radial ($r \cdot dR$) têm um número de máximos igual a um maior que o número de nós radiais. Como pode ser visto na Fig.7, existem diferenças marcantes com l para um dado n . O $r dR$ orbital $3s$ é mais espalhado do que o $3d$, aproximando-se muito mais do núcleo, por um lado, e tendo um máximo mais distante, por outro; o orbital $3p$ é intermediário na distribuição. No campo eletrostático de um núcleo desprotegido, essas diferenças compensam-se exatamente, dando uma energia que não depende de l . Os diferentes $r dR$ são, no entanto, importantes na compreensão de átomos de muitos elétrons, onde a energia dos orbitais varia tanto com l quanto com n .

A distribuição real de elétrons é mais complicada neste modelo simples, mas princípios semelhantes se aplicam. Um elétron externo que mantém fora das camadas internas será bem peneirado, e um que penetra menos.

Entretanto, se você considerar o intervalo entre $r = 0$ e $r = a \cdot 2 \text{ \AA}$, observa que a maior densidade radial nesse intervalo corresponde ao orbital $3s$, em seguida ao $3p$ e é zero para o $3d$. Isso indica que um elétron no orbital $3s$ pode se aproximar mais do núcleo do que em um orbital $3p$. Esse fato é denominado **efeito de penetração** ou **penetrabilidade dos orbitais**. Podemos dizer, então, que o orbital $3s$ é mais penetrante do que o $3p$; e que o $3d$ praticamente não penetra nessa região. A consequência disso é que um elétron no orbital $3s$ é mais atraído pelo núcleo do que

nos orbitais $3p$ ou $3d$. Daí a diferença de energia entre os orbitais com um mesmo número quântico principal.

2.4 ANÁLISE DO CONCEITO DE ORBITAL

O conceito de orbital atômico utilizado nos dias atuais na pesquisa e no ensino de química é resultante das soluções da equação de Schrödinger para átomos hidrogenóides. A equação de Schrödinger traz consigo a noção de que um ente quântico, como o elétron, pode apresentar comportamento ondulatório.

Para a mecânica quântica a equação de onda de Schrödinger descreve o comportamento dos elétrons nos átomos - a Equação de Schrödinger é uma equação de movimento – e quando é aplicada ao elétron, fornece as funções de estado e os valores de energia. A resolução matemática dessa equação diferencial leva a um conjunto de funções matemáticas chamadas de funções de onda, representadas pela letra grega psi (Ψ). O quadrado da função de onda, $\Psi^*\Psi$, é a densidade de probabilidade e representa a probabilidade de se encontrar o elétron numa região do espaço em torno do núcleo, sendo essa região denominada de orbital. (BERRY, 1966).

O conceito de orbital é um conceito científico ensinado a adolescentes e jovens do ensino médio e superior, que já desenvolveram o pensamento por conceitos. O desenvolvimento do conceito científico começa habitualmente pelo trabalho com o próprio conceito como tal, pelo termo e a explicação verbal do conceito, por operações que pressupõem a aplicação não espontânea desse conceito. (VIGOTSKI, 2001)

O conceito de orbital criado por Robert S. Mulliken (1932), pode ser considerado um exemplo de conceito segundo a teoria histórico-cultural, pois ao utilizar a palavra orbital como substituta da expressão “função de onda orbital para um elétron” ele está expressando por uma palavra o conceito função de onda. Com isso, Mulliken também está fazendo uma generalização e assim criando um conceito. O conceito de orbital está dentro de uma teoria mais complexa: a teoria quântica. Desta maneira, o conceito de orbital está dentro de um sistema de conceitos.

O sistema para a compreensão do conceito de orbital requer conhecimento a respeito dos seguintes conceitos: (a) quantum de uma grandeza; (b) natureza dual da matéria e da radiação; (c) átomo como estrutura; (d) movimento eletrônico sem trajetórias determinadas (e) interpretação probabilística da função de onda (f) números

quânticos. Além disso presume-se que o estudante tenha conhecimento que uma função de onda é uma função matemática que expressa o comportamento de uma onda e tenha noções gerais acerca de equações diferenciais.

Consideramos que o átomo é um sistema quântico, pois seus elétrons apresentam algumas propriedades — energia, momento angular, spin etc. — cujos valores são discretos; tais propriedades são ditas quantizadas. A diferença entre dois valores de uma propriedade quantizada é um quantum da propriedade. Os elétrons num átomo se encontram distribuídos em vários níveis de energia, cuja diferença entre dois valores é um quantum de energia. (SILVA, 2008, p.3)

O átomo, assim como outros sistemas quânticos, exibe comportamento dual, ou seja: a interpretação de alguns fenômenos exige que seu comportamento seja considerado como corpuscular; outros, exigem comportamento ondulatório.

No modelo atômico de orbitais os elétrons encontram-se em movimento em volta do núcleo, porém, em trajetórias indeterminadas. A determinação da trajetória de um elétron exige o conhecimento exato do valor da sua posição e do seu momento (ou velocidade) em um dado instante, a partir do qual se pode calcular os demais estados que constituem sua trajetória. Porém, as relações de incerteza da posição e do momento ($\Delta q_i \cdot \Delta p_i \cong h$) informam ser impossível medir ambas grandezas com exatidão e simultaneamente, de modo que, os demais estados da trajetória do elétron não podem ser determinados. Diz-se, então, que os elétrons do átomo se movem em uma região em volta do núcleo.

O comportamento ondulatório do átomo e do elétron levou Schrödinger a propor uma equação de onda para calcular sua energia. A cada função de onda que é solução da equação de Schrödinger corresponde um valor de energia dos elétrons no átomo e, como a energia é uma propriedade de estado, fica estabelecido que a cada estado eletrônico corresponde uma função de onda.

Uma função de onda de um elétron num átomo hidrogenóide pode ser escrita, em coordenadas polares esféricas, como um produto de três equações independentes, cada qual envolvendo apenas uma única variável, ou seja: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$. Em vários estados $\Phi(\varphi)$ é uma função imaginária, produzindo uma função $\psi(r, \theta, \varphi)$ complexa. A representação comumente utilizada para a função de onda de um elétron num átomo hidrogenóide é feita com a sua parte radial, $R(r)$, separada da parte angular, $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$, denominada de esférico harmônico. Os gráficos da parte angular da função de onda $|Y(\theta, \varphi)|^2$ produzem figuras

geométricas. Os gráficos de $|\Psi(\theta, \varphi)|^2$ são denominados de orbitais, adotando-se o valor de 90-95% de probabilidade como um limite arbitrário da região do espaço.

A partir dos critérios a seguir: (a) Ter um valor único (a função de onda deve ter apenas um valor $F(x)$ possível para cada valor de x); (b) Ser contínua; (c) Ser diferenciável (o quadrado de algumas funções de onda deve ser também integrável). Pode-se então reconhecer um orbital como uma função membro da categoria das funções de onda. Esses critérios evitam que ocorram probabilidades infinitas, por isso, a função de onda deve ser normalizada, ou seja $\int \Psi^* \Psi = 1$. Para normalizar uma função de onda, ela deve se aproximar de zero quando x vai a infinito. (BUNGE, 1977.)

O conceito é compreendido pela Teoria Histórico-Cultural e pela epistemologia como estruturado em uma hierarquia. Nesta perspectiva, um conceito pode ser apresentado em um mapa de conceitos, porém, é necessário um maior detalhamento e profundidade de informações, pois, além dos conceitos em relação hierárquica baseada nas suas amplitudes, inclui também as relações concreto/abstrato, o que lhes confere maior riqueza de informação. (LIMA, SILVA, 2016)

A seguir dois exemplos de mapas conceituais na Figura 8 referente ao conceito de átomo e a Figura 9 referente ao conceito de orbital atômico. Pode-se observar que este mapa considera um sistema conceitual para o ensino do conceito de orbital. (LIMA, SILVA, 2016)

O mapa conceitual da Figura 8 apresenta um sistema de conceitos e procura deixar claro que o orbital é uma função de onda, porém após a interpretação de Born para função de onda a ideia de região do espaço ganhou força e com isso permite abordar a noção de realidade ou não do orbital.

O mapa conceitual da Figura 9 pode ser interpretado da seguinte maneira: o orbital é uma função de onda para um elétron, composta pelo produto de uma função radial e outra angular (esférico harmônico). O quadrado do módulo dessa função é interpretado como uma densidade de probabilidade, o que deu lugar ao entendimento dos gráficos dos esféricos harmônicos correspondentes como regiões do espaço onde se encontra o elétron, ou seja: uma visão realista. Por outro lado, sendo uma função de onda, pode ser entendido não realisticamente, como um ente puramente matemático.

Figura 8: Mapa Conceitual sobre os conceitos envolvidos no ensino do conceito de orbital

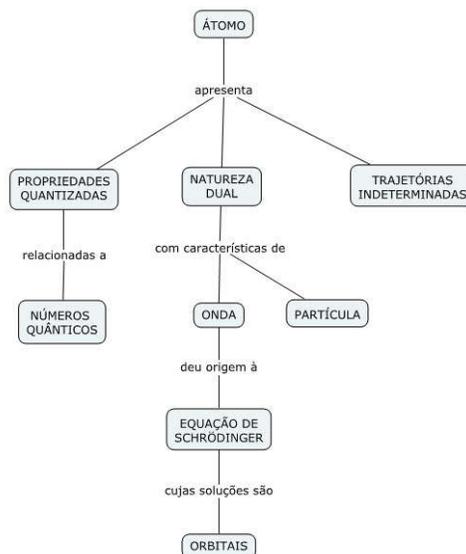
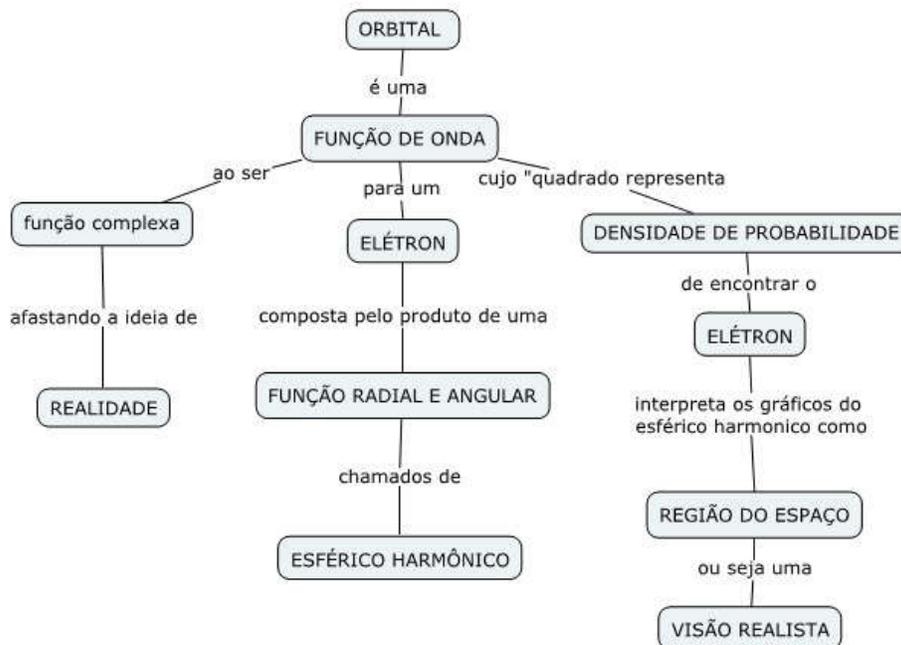


Figura 9: Mapa Conceitual referente ao sistema de conceitos de orbital



Tem-se que no processo de ensino do sistema de conhecimentos, ensina-se ao estudante o que ele não tem diante dos olhos, o que vai além dos limites da sua experiência atual e da eventual experiência imediata. Assim ocorre com o conceito de orbital, que se refere a um ente que não é observável pelos sentidos. Portanto, a assimilação do conceito de orbital ocorre durante a própria experiência do indivíduo

com o emprego deste conceito e da sua relação com o sistema de conhecimentos do qual faz parte.

A representação gráfica dos orbitais tem relação com o conceito de forma, o estudante deve ser instruído pelo professor que são as formas dos gráficos resultantes das funções de onda. Quando o estudante ainda não tomou consciência dos sistemas de conceitos envolvidos no conceito de orbital não houve uma aquisição do conceito científico, no sentido vigotskiano. Para que isso ocorra o conceito deve ser tomado em conjunto com todo o sistema de suas relações de generalidade, sistema esse que determina a medida de generalidade própria do conceito de orbital.

Essas afirmações são importantes, pois no caso do orbital atômico, mesmo se tratando de um conceito nascido das teorias da física quântica, ao ser manipulado pelos químicos ganha um tratamento aparentemente mais realista. Principalmente, as representações da densidade de probabilidade de elétrons que geram representações pictóricas ou expressões gráficas que ao serem interpretadas como "a probabilidade de um elétron ser encontrado precisamente no elemento de volume" (BORN, 1969, p.147), sugerem direções para o movimento do elétron dando outro significado para o termo orbital na química. Estas imagens dos orbitais traz à tona a discussão a respeito da realidade ou não de tais figuras tão importantes no trabalho do químico.

O conceito de orbital atômico, assim como qualquer outro conceito, tem uma função. No caso do orbital atômico, a sua primeira função foi a de substituir a frase "função de onda para um elétron em um átomo", ou seja, uma função linguística, e posteriormente ganhou novas funções, principalmente na química. O orbital atômico pode funcionar para descrever a realidade, se admitirmos que não é uma descrição exata, mas que a ideia de região do espaço está coerente com a ideia de que há elétrons se movendo em volta do núcleo. Pode ser utilizada para deduzir estruturas, que são usadas para deduzir mecanismos de reações e produzir materiais

Segundo a teoria histórico cultural de Vigotski, o conceito pode ser espontâneo ou científico. Muitos estudantes de química, ao ouvirem a palavra orbital, podem espontaneamente imaginar os orbitais como uma "caixa" na qual os elétrons estão com spins contrários; outra forma espontânea é a associação direta as imagens dos esféricos harmônicos. O conceito de orbital é uma abstração, e possui representação concreta: o termo falado ou grafado ou desenhado. Um sujeito que possuir o conceito de orbital pode aplicá-lo em situações do dia-dia em um laboratório de química ou para resolver problemas relacionados a profissão do químico.

2.5 O ENSINO DO CONCEITO DE ORBITAL

Atualmente, o ensino de química é baseado fortemente na teoria da estrutura atômica. O modelo de Bohr é uma ferramenta importante para estimar e caracterizar praticamente todas as propriedades atômicas e moleculares. Porém, é o modelo de orbitais que está na base das nossas interpretações de estrutura molecular e tem grande importância nas interpretações de muitos mecanismos de reação (BERRY,1966).

A utilização do conceito de orbitais pelos químicos apresenta uma boa medida de realismo, além de concepções alternativas ou equívocos dos estudantes de química, que devem ser corrigidos (Papaphotis e Tsaparlis, 2009; Taber,2005; Coll e Taylor,2002). Por outro lado, Gillespie et al, (1996) defendem o não ensino de orbitais nas disciplinas de química introdutória, pois a mecânica quântica envolvida para o entendimento do conceito de orbital é conceitualmente difícil e os estudantes de nível introdutório são incapazes de compreendê-la corretamente (BARRADAS-SOLAS, SÁNCHEZ GÓMEZ, 2014).

Considerando que o ensino de um determinado conceito deve estar dentro de um sistema de conceitos e que no caso específico do orbital atômico esse sistema diz respeito à teoria quântica, inicialmente, apresentaremos um panorama do ensino da teoria quântica para os químicos e em seguida abordaremos a literatura pertinente ao ensino do conceito de orbital

2.5.1. Ensino da teoria quântica para químicos

O ensino dos conceitos básicos da quântica deve levar em conta questões técnicas e filosóficas, porém não é isso que se vê na maioria das pesquisas em ensino de ciências e nos materiais didáticos. Notamos a necessidade de se modificar a forma como esses conceitos são introduzidos nos cursos científicos da graduação. Os autores sugerem que no ensino de química, os conceitos quânticos fundamentais devem ser tratados nos “temas introdutórios relacionados às leis da física ou, em alternativa, aos primeiros temas de química / física”. (GRECA, FREIRE Jr., 2014, p. 286.)

Outro ponto importante é que o objeto da teoria quântica deve ser descrito por seu próprio formalismo, pois diferentemente de outras partes da física (principalmente a física clássica), fica difícil a sua compreensão com o uso de fotos ou imagens mentais. Greca e Feire Jr (2014), destacam que a necessidade de utilizar fotos / imagens para os conceitos clássicos fica mais evidente na química. A questão da visualização deve trazer consigo uma interpretação ou uma visão complementar, se não estaremos pensando em “termos da física clássica e não seremos capazes de entender adequadamente os conceitos quânticos”.

Apesar da complexidade matemática da mecânica quântica, a tendência de usar abordagens mais fenomenológicas muito próximo de imagens tem levado muitos praticantes e pesquisadores de química a darem um caráter de quasi-quântica para as ferramentas da química quântica que empregam (SANCHEZ-GÓMEZ; MARTIN, 2003).

O ensino da física quântica para química costuma introduzir a teoria quântica através dos modelos das duas primeiras décadas do século XX e isso atua como um impedimento de aprendizagem. Os alunos partem de “modelos determinísticos do átomo derivado da velha teoria quântica para a compreensão de conceitos quânticos modernos”. Essa abordagem instrumentalista da mecânica quântica dificulta o entendimento e reduz o alcance cognitivo da física quântica (GRECA, FREIRE JR, 2014)

Uma maneira de solucionar os problemas ocasionados por essa abordagem instrumentalista está na proposta feita por Garritz, que utiliza episódios históricos reconstruídos, especialmente aqueles que envolvem polêmicas e rivalidade entre os cientistas. Desta maneira, os estudantes podem compreender como se deu a evolução dos conceitos quânticos e da química quântica. Assim como a proposta feita por Garritz, a maioria das propostas para o ensino da teoria quântica estão dentro do espectro de interpretação realista; afastando-se da posição epistemológica da interpretação de Copenhague e dando um caráter menos dependente do processo de medição. (GRECA, FREIRE JR, 2014)

Para Greca e Freire Jr (2014), a tentativa de representar alguns conceitos quânticos para a interpretação ondulatória, pode ser problemática, pois “reforça os laços com a física clássica impedindo os estudantes de obter uma melhor compreensão de conceitos quânticos”. Resultados encontrados por Tsaparlis e Papaphotis (1997), corroboram a afirmativa de Greca e Freire Jr (2014), pois eles

observaram que os estudantes de química ao serem introduzidos ao modelo ondulatório do átomo, não entenderam o conceito de orbital como uma função matemática e sim como um “espaço”. Para sanar esse problema eles sugerem uma introdução ao princípio da complementaridade.

Para Greca e Freire Jr (2014), as imagens do modelo Bohr que os estudantes de química são expostos só podem ser superadas com grande dificuldade. Como solução eles propõem que os assuntos iniciais de quântica devem enfatizar o aspecto probabilístico da mecânica quântica, evitando desta forma a atribuição de realidade aos orbitais entre outros conceitos. Além disso, os professores devem mostrar os resultados obtidos com uso da mecânica quântica na solução de problemas de química, em oposição ao modelo de Bohr.

2.5.2. Críticas ao ensino do conceito de orbital

Um número crescente de educadores tem se posicionado contrários a utilização do conceito de orbital em cursos básicos de química por considerarem este conceito altamente abstrato e fora do alcance de muitos estudantes. Existem também os que defendem o ensino do conceito de orbital, pois é científica e pedagogicamente incorreto ensinar teorias superadas ou que mais tarde tenham de ser substituídas ou desaprendidas (TSARPARRIS, 1997). Algumas destas críticas a respeito do ensino do conceito de orbital serão apresentadas nos parágrafos que se seguem.

As pessoas contrárias ao ensino do conceito do orbital estão erradas, pois os estudantes desde o início se deparam com disciplinas que "exigem um monte de raciocínio abstrato". E usam justamente esse argumento para classificarem a química como uma disciplina difícil. Porém, é inaceitável deixá-los fora da discussão a respeito dos modelos atômicos modernos e dos avanços proporcionados por estes modelos. Então "o debate sobre quando o modelo quântico deve ser introduzido resume-se à seguinte questão: como deve ser introduzido?" (MORWICK, p. 262, 1979)

Para responder essa questão o professor tem que refletir a respeito de quais assuntos são necessários para ensinar esse conceito. Se acreditar que assuntos como: equações diferenciais e funções de onda normalizadas são necessários, então, sua visão defende a forma de ensino universitário, indo de encontro à forma que o conceito deve ser introduzido no ensino médio. Uma maneira de se ensinar esse conceito está apresentada abaixo:

Os alunos podem e devem considerar o átomo como sendo composto de um núcleo denso e de carga positiva, cercado por uma nuvem eletrônica negativa. De fato, os alunos devem ser introduzidos em duas formas possíveis de olhar para esta nuvem eletrônica: uma, como uma distribuição de carga elétrica, ao longo do tempo, resultante de uma partícula (elétrica) carregada negativamente movendo-se sobre o núcleo em uma trajetória indeterminada, ou dois, como um "borrão" de carga negativa que pode ser pensado como estacionário (MORWICK, 1979, p. 262).

Morwick (1979, p. 262), sugere que no ensino médio seja ensinado: a forma da região do espaço ocupada por elétrons em vários níveis de energia; como estão descritos os vários níveis de energia como 1s, 2s, 2p; as ligações químicas em termos de "orbitais" proeminentes que se sobrepõem e que todas as forças relacionadas ao comportamento químico são de natureza eletrostática. Para ele, o ensino médio é o momento ideal para "introduzir uma representação física simplificada do átomo com base no modelo mecânico quântico". Porém, as discussões a respeito da controvérsia filosófica sobre a realidade do orbital devem ser abordadas em outro momento educacional.

Cervellati e Perugini (1981), argumentam que um dos problemas do ensino do conceito de orbital no ensino médio, se dá pela maneira que ele é introduzido na disciplina de química e pelo fato de nem sempre esse assunto ser dado por professores formados em química. Outro ponto levantado por eles, é a variedade de livros didáticos cuja apresentação desses tópicos geralmente deixa muito a desejar, problemas que poderiam ser sanados se os professores tivessem conhecimento deste conceito.

Bent (1984), defende que os orbitais moleculares não devem ser ensinados no curso inicial em química, pois, eles são importantes apenas para a discussão de estados excitados. Ele questiona a forma como é ensinado o conceito de orbital e que a química deveria se debruçar inicialmente aos fatos químicos para depois entrar na quântica. Ele afirma ainda que essa forma de tratar a química é decorrente dos dizeres de Dirac que disse que a química poderia ser redutível a física quântica, criando desta forma, problemas para a educação em química em todos os níveis.

Berry (1986), advoga que os professores de química do ensino médio devem focar seus esforços nos "princípios básicos", como: linguagem química, cálculos químicos, lei dos gases e nas teorias atômicas até o modelo de Bohr. Os conceitos da

mecânica quântica, como os orbitais atômicos e moleculares, energia livre de Gibbs devem ser ignorados, pois são conteúdos mais complicados para os estudantes desse nível. E desta forma ela sugere que a química seja mais atrativa para os estudantes, ao conhecerem mais sobre a ciência química e sua utilidade para o desenvolvimento da sociedade.

Gillespie (1991, p. 192), considera que os conceitos de orbitais híbridos e moleculares e as equações da termodinâmica são muito abstratos, desnecessários e difíceis para um curso introdutório. Embora tais tópicos sejam necessários para a formação do químico, "temos que perguntar se eles pertencem ao curso de química geral". Para ele os conceitos teóricos abordados na química geral devem ser os necessários para o estudante fazer um bom curso de química inorgânica e orgânica, que virão no andamento do curso, "e não aquelas que podem ser necessárias em algum momento do futuro pela química avançada".

Hawkes (1989, p. 831), defende que ensino de química no ensino médio seja diferente do que é feito, pois ele não vê "nenhum benefício óbvio" para as futuras carreiras profissionais dos estudantes ao aprenderem sobre "a natureza da ligação química, ou a variação do raio iônico e atômico em toda a tabela periódica". Para Hawkes até mesmo a tabela periódica poderia ser dispensada do ensino. Ele defende que os estudantes compreendam, em termos muito gerais,

[...] o mecanismo de emissão e absorção de radiação, a compreensão qualitativa dos equilíbrios iônicos, mas não precisam realizar os cálculos aterradores em nossos textos. O significado de um complexo e seu equilíbrio de dissociação é vital e o equilíbrio entre um sólido iônico e sua solução. Eles devem entender o efeito iônico comum. O efeito da força iônica na condutividade elétrica é ocasionalmente referido. (HAWKES, 1989, p. 831)

Hawkes (1992) ainda defende que os alunos lucrariam mais com a formação geral em orgânica e bioquímica com enfoque em saúde e que na universidade os conceitos de orbital atômico e molecular têm pouco valor na química geral. Além desses conceitos, ele destaca a ressonância como um conceito útil, porém sem nenhum significado para o calouro. Ele discorda também do uso da teoria orbital molecular simplificada para prever que o Li_2 existe, Be_2 não, e O_2 é paramagnético, pois o valor preditivo é limitado a pares de átomos de números atômicos quase iguais.

Para Ogilvie (1990), todo o espaço dedicado aos orbitais e seus derivativos que estão presentes nos livros didáticos de química, no currículo e no tempo de aula,

prejudica mais do que ensina. Ogilvie (1990, p.286-287) afirma que a "química não é apenas uma ciência das moléculas, mas também uma ciência dos materiais. E que deve a sua importância muito mais à sua indústria." Em suas palavras: "A química deve sua importância na comunidade moderna aos seus materiais e não às suas moléculas". Por isso, considera desnecessária a aplicação da "química quântica para explicar a estrutura e propriedades moleculares no programa geral de graduação em química, pelo menos no componente obrigatório".

Ogilvie (1990, p.288) é radical ao afirmar que "as explicações qualitativas da estrutura molecular e das reações baseadas em orbitais e tais características não são ciência (ou seja, são absurdas) e devem, portanto, ser completamente descartadas". Para ele os professores da graduação em química deveriam gastar seu tempo e esforço para demonstrar as substâncias químicas e as propriedades da matéria real que produzem química, a ciência das moléculas, a ciência central no nosso mundo atual.

Pauling (1992, p. 519), advoga que a química introdutória na universidade "deve enfatizar os aspectos mais simples da estrutura molecular em relação às propriedades das substâncias". Como temas importantes para esses estudantes, ele defende o ensino das estruturas eletrônicas dos átomos, enfatizando a estrutura do gás nobre; a ligação através do compartilhamento do par de eletrônico, o átomo de carbono tetraédrico, a eletronegatividade, o caráter iônico parcial das ligações químicas e a ideia de ressonância aplicada a molécula do benzeno. O orbital molecular deve ser abordado nos semestres subsequentes.

2.5.3. Equívocos e concepções alternativas

Os equívocos mais comuns sobre orbitais, cometidos por estudantes, estão relacionados aos aspectos qualitativos da teoria do orbital molecular e aos diagramas de energia do orbital. Isto acontece mesmo quando os mesmos foram expostos ao tema anteriormente. Como consequência destes equívocos estão: o uso incorreto da linguagem em discussões científicas, expectativas teoricamente infundadas a respeito de como um sistema pode se comportar e se orbitais e energias orbitais podem ser medidos. O autor percebe como problemático o fato de os alunos ignorarem

completamente a natureza aproximada da teoria orbital nas explicações a respeito das ligações químicas (AUTSCHBACH, 2012).

Autschbach (2012), salienta a importância dos estudantes de química saberem sobre alguns aspectos do conceito de orbital, como: (i) o termo "orbital" refere-se exclusivamente a orbitais de elétrons, isto é, funções de uma única coordenada eletrônica que são usadas para descrever a estrutura eletrônica de muitos átomos e moléculas de elétrons; (ii) orbitais representam uma aproximação à realidade, ou seja, os orbitais são usados para construir funções de onda mecânico-quânticas aproximadas para muitos elétrons que, por sua vez, descrevem as distribuições de elétrons e outras propriedades das moléculas; (iii) os orbitais são uma conveniência muito usada pelos químicos devido a seu poder interpretativo e (iv) orbitais e energias orbitais não são observáveis.

Com relação a linguagem, Autschbach (2012) ressalta que seria mais apropriado explicar o que significam declarações referentes à ocupação do orbital, pois os alunos podem criar em sua mente uma imagem enganadora de uma região do espaço cheia, ou seja, ocupada por uma nuvem de elétrons. Outra questão importante de salientar para os alunos é que os orbitais não são elétrons e não são únicos. No entanto, quando mencionar a palavra ocupação pela primeira vez, seria útil explicar que se trata de uma palavra utilizada com frequência por pesquisadores e professores, mas que possui um significado diferente do que a palavra sugere.

Tsaparlis e Papaphotis (2009, p.896), destacam que entre os impedimentos que podem ser considerados no diagnóstico das origens de dificuldades dos alunos em compreender o conceito de orbital, está o pensamento mecanicista clássico ("elétrons se movem ao redor do núcleo em órbitas definitivas", "o elétron é sempre uma partícula", "os elétrons se movem ao longo de órbitas onduladas ao redor do núcleo") e, no caso de hibridação as dificuldades, a uma má compreensão do conceito de orbital atômico.

Mais adiante, Tsaparlis e Papaphotis (2009) fazem uma revisão de literatura e apontam que, mesmo os estudantes que cursaram química quântica, demonstraram muitas falhas na compreensão das formas orbitais e nas definições exatas para um orbital atômico e orbital molecular. Além disso, os estudantes identificaram um orbital molecular apenas como uma combinação linear de orbitais atômicos. Estudantes da graduação e pós-graduação investigados apresentam modelos mentais de ligação química muito simples e, em sua maioria, concretos. Outro problema identificado na

sua revisão de literatura foi a incapacidade demonstrada por parte dos estudantes em separar os marcos conceituais da física clássica e quântica, produzindo assim, obstáculos epistemológicos para a aquisição dos conhecimentos necessários.

Tsaparlis e Papaphotis (2002), relatam também que na sua investigação alguns alunos assumem o termo "orbital" como outra palavra para "órbita", e que os elétrons giram em torno do núcleo como os planetas ao redor do sol, ou seja, permanecem com as ideias da velha teoria quântica. Para outros estudantes, os orbitais são únicos e representam um espaço fixo bem ligado. Muitos alunos não conseguiram perceber a natureza probabilística de orbitais, assumindo uma perspectiva determinista. Por fim, os alunos cometeram o equívoco de que os orbitais de átomos hidrogenóides são exatos para átomos de muitos elétrons.

Uma constatação é que os modelos antigos como o modelo atômico de Bohr ainda ocupam um lugar dominante no ensino de química, principalmente nos livros didáticos. Esses modelos constituem, muitas vezes, um impedimento de aprendizagem. Para que o estudantes tenham uma melhor aprendizagem do conceito de orbital deve ser reforçado que: a mecânica quântica tem uma natureza probabilística; os orbitais atômicos possuem significado físico quando relacionado a probabilidades de elétrons ou densidades de elétrons; as representações dos orbitais são formas gráficas de funções matemáticas; deve-se dar atenção especial nas seções de contornos com a mesma probabilidade; os orbitais moleculares são baseados em combinações lineares de orbitais atômicos e também são utilizados para construir as formas dos orbitais moleculares, sendo assim, uma representação gráfica de funções matemáticas. (TSAPARLIS; PAPAPHOTIS, 2009)

Em particular, a pesquisa sugere que os alunos são bastante resistentes a aprender sobre modelos de mecânica quântica do átomo com os elétrons "localizados" em orbitais definidos em termos de probabilidade e que não estão sujeitos a limites bem definidos.

Taber (2005) verificou que os estudantes, mesmo após aprenderem sobre o conceito de orbital, continuavam utilizando a regra do octeto para explicar a ligação química. Dentre as razões para esse comportamento dos estudantes estão: a dificuldade em formar um conceito adequado de orbitais de elétrons, confusão nas denominações de orbitais e falta de clareza na distinção de orbitais moleculares de orbitais atômicos.

Um dos aspectos-chave da introdução de ideias quânticas em nível universitário de química é a adoção do conceito de orbital para descrever a estrutura eletrônica de átomos e moléculas. Porém, a pesquisa aponta para o uso do termo "orbital" pelos estudantes como substituto para órbitas. Nesse caso, o ensino prévio serviu como um obstáculo de aprendizagem, pois o modelo atômico de orbitais não consegue suplantiar o modelo planetário de Bohr (TABER, 2005).

Taber (2005) defende que é necessário o professor ensinar algumas noções de física clássica aos alunos, pois desta forma os estudantes não aceitariam o modelo planetário para o átomo porque este átomo não seria estável, portanto ficaria mais clara a necessidade da introdução da quantização da energia. É necessário também alertar sobre os tipos de forças, de maneira a ficar claro que a atração nuclear é forte o suficiente para influenciar o elétron; ensinar ao aluno sobre força centrípeta e sua influência para manter uma órbita circular, explicar o porquê do elétron não ser atraído para o núcleo mesmo em um modelo planetário do átomo; mas também é necessário cuidado para que o aluno não utilize o conceito de inércia para justificar que os elétrons dos átomos estão em uma "órbita".

2.5.3.1 Reflexão sobre o ensino de química

Nosso argumento está dividido em dois momentos: o primeiro estará relacionado ao ensino do conceito de orbital para o ensino médio e o segundo está relacionado ao ensino do conceito de orbital no ensino superior.

Inicialmente, discordamos do que Greca e Freire Jr (2014) discorrem a respeito das imagens do modelo Bohr, uma vez que não vemos problemas no fato de os estudantes de química serem expostos a essas imagens. Pois, o modelo de Bohr consegue explicar e justificar alguns fenômenos em química, assim como o modelo de Dalton, Thomson e Rutherford. O interessante é que o estudante saiba os principais modelos e possa usá-los na hora correta de acordo com a sua necessidade. Concordo com os autores no ponto em que eles sugerem uma ênfase probabilística da mecânica quântica ao serem ensinados os assuntos iniciais de quântica. Concordo também, que deve ser mostrado ao estudante os resultados obtidos com o uso da mecânica quântica na solução de problemas de química, em oposição ao modelo de Bohr.

Concordamos com a afirmação de Morvick (1979), que o fato de ser abstrato não é justificativa para o não ensino do conceito de orbital no ensino médio, pois os estudantes se deparam o tempo todo com assuntos "abstratos", sendo, então, esse argumento muito fraco. Além disso, ao não ensinar esse conceito para os estudantes estaremos deixando-os de fora da discussão a respeito dos modelos atômicos modernos e dos avanços proporcionados por estes modelos. Concordo que a questão não é quando ensinar o modelo quântico e sim como ele deve ser introduzido.

Concordamos com Morvick (1979, p. 262), que no ensino médio seja ensinado da seguinte maneira: a forma da região do espaço ocupado por elétrons em vários níveis de energia; como estão descritos os vários níveis de energia como 1s, 2s, 2p; as ligações químicas em termos de "orbitais" proeminentes que se sobrepõem e que todas as forças relacionadas ao comportamento químico são de natureza eletrostática. Porém, no ensino médio é possível introduzir algumas questões filosóficas não aprofundadas sobre a realidade dos orbitais, além de "introduzir uma representação física simplificada do átomo com base no modelo mecânico quântico".

Por fim, consideramos interessante a abordagem de Mól e Santos (2013), que traz o modelo de orbitais em dois momentos (1º e 3º anos), sendo a primeira abordagem mais superficial e a segunda, mais aprofundada. Porém, se essa discussão ocorresse apenas no 3º ano não seria problemático, pois permitiria o uso desse conceito em algumas situações de reatividade de orgânicos.

Partindo agora para o ensino superior, concordamos com Bent (1984), que não defende o ensino dos orbitais moleculares no curso inicial em química, porém a justificativa deve ser outra. Defendemos que o início do curso de química seja ensinado os conceitos aprendidos no ensino médio de forma mais aprofundada, com uma perspectiva histórica e epistemológica dos conceitos da química. O conceito de orbital deveria ser ensinado a partir do 2º ano do curso (considerando um curso de 4 anos). Acho irrelevante a discussão sobre a química ser redutível a física quântica, pois, a química já é uma ciência estabelecida e que gera muitos produtos. Concordamos com Berry (1986), sobre a importância de os estudantes conhecerem mais sobre a ciência química, sua linguagem e sua utilidade para o desenvolvimento da sociedade.

Enfim, discordamos com Ogilvie sobre a não cientificidade das explicações qualitativas da estrutura molecular e das reações baseadas em orbitais. Para nós os professores da graduação em química devem se preocupar com todos os aspectos

da química, tanto os qualitativos quanto os quantitativos e os epistemológicos também, pois a formação do químico deve ser abrangente.

2.5.4. O que é encontrado nos livros didáticos

Rozentalski (2013), investigou livros didáticos voltados para o Ensino de Química Geral no Ensino Superior produzidos no século XX com foco no conceito de orbital. Foram investigados 26 livros agrupados em três períodos em relação à apresentação da Mecânica Quântica e, especialmente, do conceito de orbital: (a) Período 1911-1932: um conceito ainda em gestação; (b) Período 1939-1946: um conceito ainda a ser divulgado e (c) Período 1950-2001: introdução e estabelecimento do conceito de orbital.

Os livros de Química Geral pertencentes ao período 1911-1932 não apresentam tópicos referentes à Mecânica Quântica. Além disso, destacamos que o termo orbital foi cunhado no início desse período. No período 1939-1946 os livros de Química Geral se caracterizam por uma menção ou breve introdução à Mecânica Quântica, sem, contudo, qualquer menção ao conceito de orbital. O período 1950-2001 se caracteriza por apresentar o objeto da presente pesquisa, a saber, o conceito de orbital.

Os livros do período 1950-2001, utilizam como referências históricas os trabalhos de Heisenberg e Schrödinger, e especialmente os de Mulliken. O tempo que levou entre a publicação dos trabalhos dos cientistas e sua posterior transposição didática para os livros de Química Geral foi de aproximadamente 20 anos. O conceito de orbital é apresentado, pela primeira vez, aos leitores dos livros de Química Geral em capítulos sobre a estrutura da matéria. Geralmente, os capítulos iniciavam com a velha teoria quântica, modelo atômico de Bohr e, por fim, discutem a Mecânica Ondulatória de Schrödinger (ROZENTALSKI,2013. p. 92).

Uma outra classificação é como os livros de Química Geral ao longo do século XX, definem orbital: orbital corresponde à função de onda; orbital corresponde à densidade de probabilidade; e orbital corresponde aos números quânticos. (ROZENTALSKI,2013)

Segundo Rozentalski (2013), sete livros compreendem o orbital como a densidade de probabilidade. Desse grupo de livros, Mahan (1970), Pimentel e Spratley (1974), e Russell (1981), afirmam que a função de onda não possui significado físico.

Nessa circunstância, a compreensão do orbital como se referindo ao conceito de densidade de probabilidade, uma região no espaço onde é mais provável encontrar o elétron, ampara-se, em certa medida, na dificuldade que eventualmente emergiria ao se associar o orbital com a função de onda, considerada sem significado físico. Diante disso, o orbital entendido como a densidade de probabilidade sugere uma interpretação realista do conceito.

A correspondência do orbital com um dado número quântico, ou mesmo, um conjunto de números quânticos aparece implicitamente nos livros analisados. Entre os livros (oito dos dezesseis livros analisados) o orbital como um nível de energia surge um significado adicional. Os demais livros, mesmo não fazendo essa consideração textualmente o faz quando: descrevem que o número quântico principal (n) determina o nível de energia do orbital e ao exibir diagramas de níveis de energia de orbitais. Conclui-se, que os livros analisados não apresentam uma introdução problematizada do conceito de orbital e sonegam informações a respeito do alcance, dos limites, dos significados de suas representações, deste conceito. Cada livro destaca apenas determinados aspectos e objetivos do conceito. (ROZENTALSKI, 2013)

Partindo para o ensino da teoria quântica nos livros de química do ensino médio, temos o trabalho de (CUNHA; SILVA, 2009; RAMOS; SILVA, 2012), que investigaram os livros aprovados pelo PNLD de 2008 e 2012, respectivamente. A investigação de Cunha e Silva (2009), foi mais ampla, pois tratou dos temas: quantum de uma grandeza; o átomo como sistema quântico; comportamento dual do átomo e/ou do elétron; indeterminação da trajetória do átomo e/ou de um elétron no átomo; caráter probabilístico da localização do átomo e/ou de um elétron num átomo; função de onda como representante do estado do átomo ou do elétron em um átomo. Enquanto, Ramos e Silva (2012) tratou apenas dos temas: quantum de uma grandeza e comportamento dual do átomo e/ou elétron.

Os resultados obtidos apontaram que independente do ano de investigação e mesmo o tema em questão sendo sugerido pelos PCN's (Parâmetros Curriculares Nacionais) da época revelou que apenas uma das obras trata dos cinco pontos considerados necessários ao entendimento do átomo como um sistema quântico. Outras três obras discutem-nos parcialmente e duas não os incluem. Ramos e Silva (2012), concluíram que "há utilização de alguns dos conceitos da teoria quântica sem clareza ou sem articulação com outras informações apresentadas anteriormente no

próprio texto". A noção de quantum é apresentada de forma não compreensível para o estudante do ensino médio e o comportamento dual da energia e da matéria, não é citado em duas das coleções analisadas e que apenas uma das coleções apresenta uma descrição contendo um breve relato histórico e relacionando a elaboração deste conceito com os resultados obtidos para o efeito fotoelétrico.

Seguindo a mesma linha de investigação apontado no parágrafo anterior, outros trabalhos (LIMA; SANTOS; SILVA, 2015; RAMOS; SILVA; SILVA, 2015), investigaram o conteúdo da teoria quântica necessário para o entendimento do modelo atômico em livros didáticos de química para o ensino médio aprovados pelo PNLD 2015. De modo específico, foram analisados os seguintes conteúdos: a) quantum de uma grandeza; (b) natureza dual da matéria e da radiação; (c) átomo como estrutura; (d) movimento eletrônico sem trajetórias definidas.

Os resultados encontrados por (LIMA; SANTOS; SILVA, 2015; RAMOS; SILVA; SILVA, 2015), apontaram para textos basicamente, informativos e não esclarecedores dos raciocínios que deram origem a esses conceitos. Os livros não estabeleciam relação entre mecânica quântica e mecânica ondulatória, bem como, não explica as razões para o abandono das trajetórias dos elétrons, faltou explicação acerca do que consiste o princípio da incerteza. Dos quatro livros analisados dois deles não tratavam dos conceitos de indeterminação de trajetórias, incerteza de medidas ou orbitais no seu texto. Não existe também uma explicação clara a respeito dos termos "quantizada" e "quanta". Não há referência também aos números quânticos.

Retomando o trabalho de Lima, Santos e Silva (2015) que investigou livros didáticos de química para o ensino médio aprovados pelo PNLD 2015, com enfoque para o conceito de orbital. Temos o seguinte resultado: apenas duas coleções apresentavam o conceito de orbital. O primeiro não deixa muito clara a relação entre função de onda, orbital e probabilidade de encontrar o elétron. Enquanto, o segundo apenas informa sobre os orbitais. Ambos definem orbital como: " como a região mais provável de encontrar um elétron a certa distância do núcleo".

2.5.4.1. *Representação dos orbitais nos livros didáticos*

Conforme mostrado na seção 2.3 deste trabalho, podemos afirmar que a busca da visualização e representação do orbital atômico sempre foi uma

necessidade. Na prática científica cotidiana dos químicos os orbitais são mostrados como objetos reais. Um fato é que a interpretação de todos os resultados obtidos na pesquisa científica requer uma boa dose de mecânica quântica, e não é de todo evidente que eles mostram orbitais como entidades reais existentes (BARRADAS-SOLAS; SÁNCHEZ GÓMEZ, 2014).

As representações gráficas dos orbitais são facilmente encontrados em qualquer livro de química independente de ser do ensino médio ou superior. Tais imagens são utilizados tanto para representar estruturas (esquemas de ligação) e processos (mecanismos de reação). Em alguns textos educacionais, as representações gráficas de orbitais são usadas para ilustrar qualitativamente um cálculo, ou seja, uma função de onda. Desta forma, essas representações gráficas podem começar a adquirir o estatuto de quase-material. Sua interação com a superfície do papel ou da tela pode ser interpretada pelos alunos como refletindo o que realmente acontece com os átomos e moléculas. (BARRADAS-SOLAS; SÁNCHEZ GÓMEZ, 2014).

Para Barradas-Solas e Sánchez Gómez (2014), o uso das representações gráficas pode produzir em alguns dos que entram em contato com essas imagens a sensação de que estão visualizando os orbitais e suas interações, o que pode ser considerado como uma "realidade clássica". Porém, é fato que essas representações são "simplesmente o modo como a maioria dos químicos trabalham" e o ensino de química sem orbitais não é a química praticada pelos químicos. Diante disso, os orbitais químicos e seus conceitos quânticos auxiliares devem ser ensinados, pois, não apresentam dificuldades especiais e o seu carácter visual pode ser um trunfo na educação química.

Rozentalski (2013), em sua dissertação também investiga as representações dos orbitais em livros de química geral do ensino superior e aponta que a maioria dos livros investigados concebe as representações icônicas dos orbitais como a densidade de probabilidade máxima. Estes livros identificam explicitamente o conceito de densidade de probabilidade com a função de onda ψ^2 . Desta forma, é possível "vislumbrar que as imagens dos orbitais se referem a uma equação matemática particular", ainda que a maioria dos livros não apresente essas equações matemáticas aos estudantes.

Devido a impossibilidade de se representar no papel um objeto que tende a dimensões infinitas os livros de Química Geral, os autores recorrerem a delimitações

arbitrárias do tamanho da nuvem eletrônica. Entre os poucos livros que esclarecem esse fato, Mahan (1970) explica que o emprego das representações dos orbitais por superfícies limites, em detrimento das representações por nuvens eletrônicas, se justifica por aquela ser mais fácil de ser desenhada. Além disso, esse modo de representação do orbital enfatiza as principais características que os químicos veem no orbital: sua forma e natureza direcional. Assim, nota-se que são poucos os livros de Química Geral que tecem comentários epistemológicos sobre as representações dos orbitais por superfícies limites. Mesmo os que o fazem são insatisfatórios na descrição dos significados das imagens exibidas. (ROZENTALSKI,2013)

Antes de se depararem com essas imagens, os estudantes foram introduzidos às imagens dos orbitais por nuvens eletrônicas, nas quais a intensidade do sombreamento apresentava um significado físico, isto é, maior intensidade representava maior probabilidade de se encontrar o elétron em uma dada região. Todavia, nas representações dos orbitais por superfícies limites, as diferentes intensidades de sombreamento não possuem qualquer significado físico, sendo, meramente, um recurso estético para sugerir tridimensionalidade. Apesar disso, nenhum esclarecimento é exposto pelos autores a esse respeito. (ROZENTALSKI,2013, p.117)

Como bem nos assegura Rozentalski (2013), pode-se dizer que nas superfícies limites o orbital mostra-se como algo separado do elétron. Observa-se que as representações dos orbitais por superfícies limites predominam nos livros de Química Geral, principalmente em discussões sobre ligação química. Não é exagero afirmar que nas suas representações por traços e setas e no preenchimento dos diagramas de orbitais com elétrons, sugere uma existência independente para os orbitais.

Com relação às representações de orbital, Rozentalski (2013), conclui que sua diversidade contempla apenas certos aspectos resultando em uma representação incompleta. Essa incompletude nos leva a gerar novas representações para que sejam complementos do que as demais não abarcam. "Isso pode ser observado nos livros, que apresentam diferentes representações icônicas para o orbital, conforme as qualidades que se deseja destacar". (PESSOA Jr. 2007.p. 25-33)

Pessoa Jr. (2007), investiga o significado das representações pictóricas de orbitais atômicos e moleculares em livros de química. Ele alerta para a existência de interpretações ora realistas, ora positivistas. Um assunto levantado por Pessoa Jr é

controvérsia a respeito da observabilidade de orbitais em ligações covalentes, surgindo daí uma questão: Até que ponto tal representação corresponde à realidade? Os orbitais atômicos e moleculares são apresentados nos livros como algo fluido, homogêneo e suave, como uma nuvem uniforme e contínua. E outras vezes como uma nuvem composta de pontinhos separados, que representariam os elétrons como partículas. "Devemos levar a sério tais representações, ou seja, elas correspondem parcialmente ou integralmente a algo no mundo real? "

Pessoa Jr (2007), conclui o artigo entre outras coisas, questionando: "O que dizer então das representações pictóricas de orbitais em textos didáticos de Química?" Ele explica que o conceito de "orbital" é proveniente da teoria quântica, e que essa teoria apresenta diferentes maneiras de ser interpretada, essas interpretações podem ser realistas ou positivistas. Sendo assim, "o significado das representações pictóricas de orbitais vai depender de nossa postura interpretativa".

2.5.4.2. Representação dos orbitais nos artigos científicos e o seu reflexo no ensino

O conceito de orbital pode ser entendido como uma função de onda para um elétron, composta pelo produto de uma função radial e outra, angular (esférico harmônico). O $|\psi|^2$ ao ser interpretado como uma densidade de probabilidade, dá lugar ao entendimento dos gráficos dos esféricos harmônicos correspondentes como regiões do espaço onde se encontra o elétron, ou seja: uma visão realista. Por outro lado, sendo uma função de onda, pode ser entendido não realisticamente, como um ente puramente matemático. (LIMA; SILVA, 2016)

Morwick (1979), sugere que as discussões a respeito da controvérsia filosófica sobre a realidade do orbital deve ser abordado no ensino superior. Dois exemplos de discussão que podem ser feitas na sala de aula são as controvérsias entre Pauling e Ogilvie publicadas no *Journal of Chemical Education*, e a originada a partir de um artigo de Zuo e colaboradores publicado na *Nature*, ambas ocorridas na última década do século XX.

Controvérsia de 1990

Em 1990, Ogilvie publicou um artigo intitulado *The Nature Of The Chemical Bond*, com o subtítulo *There Are No Such Things as Orbitals*, com objetivo de fazer

uma crítica ao trabalho de Pauling, de 1931, também intitulado *The Nature Of The Chemical Bond*. Entre as críticas feitas está a utilização do conceito de orbital para explicar a forma tetraédrica do metano. Ogilvie enaltece o trabalho de van't Hoff e Le Bel ao inferir a forma deste composto em 1874 a partir de informações químicas antes mesmo do conceito de orbital ser criado.

Uma crítica que pode ser feita inicialmente ao trabalho de Ogilvie é a cerca subtítulo do seu trabalho, pois o termo orbital não foi introduzido em 1931 por Linus Pauling, sendo assim o artigo de 1931 não podia tê-lo utilizado. Além disso, houveram mais 6 ou 7 artigos de Pauling com este título. Mais adiante, Ogilvie (1990), argumenta que

os orbitais não têm existência física: eles são meramente funções matemáticas de acordo com uma abordagem particular (isto é, a saber onda mecânica, dentro da sua representação de coordenadas-) à solução matemática, por meios analíticos ou numéricos, de uma equação diferencial em particular. Em outras palavras, não há tal coisa como orbitais... (OGILVIE, 1990, p. 285, tradução nossa)

Para reforçar a sua ideia a respeito da não existência dos orbitais, Ogilvie (1990, p.285) utiliza as afirmações feita por McWeeny no livro *Coulson's Valence*, "... Orbitais não existem! Eles são artefatos de uma teoria em particular, com base em um modelo de partículas independente...", isto é, com base em não repulsão de elétrons. Ogilvie considera como falácia, a classificação de elétrons como ligante, não-ligante, ou antiligante, porque os elétrons são fundamentalmente indistinguíveis, ou seja, são partículas idênticas.

Em 1992, Pauling, escreve seu artigo em resposta a Ogilvie com o título "A Natureza do Ligação Química - 1990 (I), contém erros e falhas lógicas". Linus Pauling diz que o argumento de Ogilvie sobre os orbitais é baseado em um conceito errado do significado da palavra "coisa" cuja definição no dicionário é "Tudo o que é ou pode tornar-se um objeto de pensamento"; em outras palavras, uma coisa que não precisa ser tangível, mas poderia ser representada por um símbolo.

Sobre a definição de Robert Mulliken para orbitais, Pauling afirma que expressões da mecânica quântica para orbitais, "tais como aquelas que Mulliken e eu e dezenas de outros físicos teóricos têm formulado, são claramente objetos de pensamento, e, portanto, são coisas". Pauling, advoga no final do seu artigo, que:

[...] uma equação para o orbital híbrido sp^3 impresso em um artigo do *Jornal da Sociedade Americana de Química*, em 1931, pode até ser considerado

uma outra definição de coisa, "um objeto material sem vida ou a consciência, um objeto inanimado." Ogilvie tem mostrado que certamente orbitais são objetos de pensamento. (PAULING, 1992. p. 520)

A controvérsia gerada pelo artigo de Ogilvie, obteve respostas de outros cientistas. A primeira resposta foi de Simons (1991) no artigo *There are no such things as orbitals-Act two!* onde defende que "os dados experimentais, as moléculas, átomos e substâncias se constituem nas coisas "reais" em química. Em contrapartida, as quantidades derivadas resultantes da "aplicação de modelos, teorias e suas equações associados não são reais". Os orbitais, hibridação, configurações eletrônicas e seus símbolos também não são "reais".

Em uma das notas de rodapé, **Simons (1991), define o real para química como: o que pode ser medido diretamente no laboratório** (destaque nosso), por exemplo "um fóton de energia ou comprimento de onda, a atenuação de uma luz de feixe, um ângulo de espalhamento de um feixe de luz, [...]".

Edmiston (1992) também fez um artigo em resposta a Ogilvie no qual ressalta a importância do orbitais e afirma que:

Funções de onda são apenas uma maneira de compreender a teoria quântica e os orbitais são uma forma de representar aproximadamente as funções de onda de forma visualizável, mas sem estes orbitais (de AO e MO) não é possível o entendimento da química. Na abordagem de interação de configuração, muito usada hoje, a função de onda aproximadamente exata é representada através de orbitais para pequenas moléculas. As "correções relativísticas" são também devidamente tratadas na abordagem orbital. (EDMISTON,1992. p.600)

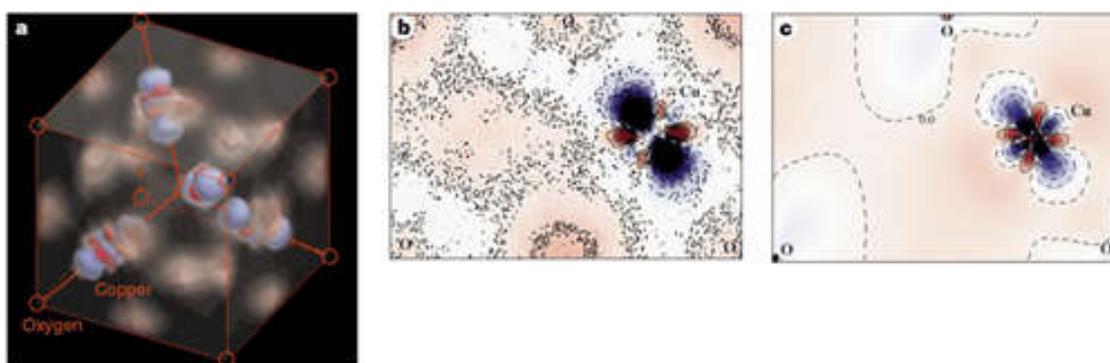
Os trechos destacados apontam para uma visão realista de teorias, porque ele aceita que a teoria é verdadeira, mas não aceita "que as entidades inobserváveis existam", são apenas termos que ajudam a entender os fenômenos. (DUTRA,1998, p.32). Ao afirmar que o orbital tem o significado de coisa, pois é algo pensamento, Pauling demonstra uma visão realista, pois para ele se a "coisa" existe no pensamento ela existe realmente.

Controvérsia de 1999

A seguir, serão apresentados os trechos dos dois trabalhos que deram início à discussão a respeito da realidade do orbital no final do século XX.

Zuo, Kim, O'Keeffe, Spence (1999), buscavam entender a ligação química existente entre o átomo de cobre e o oxigênio no óxido cuproso. Como resultado de suas análises eles encontraram uma baixa densidade de carga em uma determinada região do cobre e atribuem esse fato a um orbital híbrido d_{z^2} pouco ocupado. Porém, o que chama a atenção deles é a imagem da densidade de carga obtida, que guardava uma semelhança “impressionante” com a imagem do orbital d_{z^2} presentes nos livros didáticos de química. Tais imagens são apresentadas abaixo:

Figura 10; Imagens de densidade de carga por Zuo e colaboradores



Fonte: Zuo e col(1999, p.50)

Os autores afirmam que “A correspondência entre nosso mapa experimental e os diagramas clássicos de orbitais d_{z^2} esboçados em livros didáticos é impressionante” (ZUO et al., 1999, p.50). Dando continuidade às suas explicações eles reforçam as afirmações ao escreverem que “Todos os nossos mapas de diferenças mostram uma forte distorção de carga não-esférica em torno dos átomos de cobre, com a forma característica dos orbitais d”. Os autores agem como se através do experimento pudessem manipular o orbital e as imagens são a comprovação de tal fato. Essa é uma visão realista.

No mesmo número da revista, o resumo do artigo intitulado **Elétrons vistos em órbita** informava que “A forma clássica dos orbitais dos livros-textos foi, agora, diretamente observada, [...] confirmando a teoria estabelecida [...]”. (HUMPHREYS, 1999, p.21) Trata-se de um argumento realista, pois defende que é possível através de instrumentos detectar um inobservável (orbital) postulado por uma teoria (quântica).

No texto, Humphreys (1999, p.21) afirma que “Pela primeira vez a impressionante forma de alguns dos orbitais eletrônicos é experimentalmente revelada”. Humphreys passa a ideia de que o conhecimento presente nas disciplinas científicas é verdadeiro, ou aproximadamente verdadeiro, e, enquanto tal, é aceito, isto é: quem aceita uma teoria científica, aceita-a como um relato aproximadamente verdadeiro de como o mundo é. (DUTRA,1998). Mais adiante, comenta:

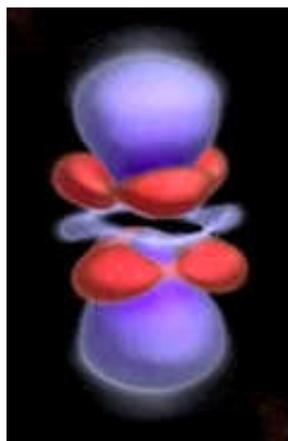
“O artigo de Zuo et al. é notável porque a qualidade dos seus mapas de densidade de carga possibilita, pela primeira vez, uma ‘imagem’ experimental direta a ser tomada da forma complexa do orbital d_{z^2} . A correspondência entre o mapa de densidade de carga experimental de Zuo et al. [...] e o orbital d_{z^2} de livro-texto é impressionante”. (HUMPHREYS, 1999, p. 21)

Os trechos selecionados apontam que Humphreys se aproximada de uma visão realistas de entidades e teoria, pois assim como Zuo, ele afirma que as imagens do orbital foram reveladas, ou seja, ele admite que era algo real e que estava escondido. Ele também considera que as imagens presentes nos livros são um relato aproximadamente verdadeiro de como o mundo é. (DUTRA,1998)

Diante da repercussão de um trabalho que foi capa da revista *Nature*, uma das mais importantes do mundo, houve manifestações a favor das declarações de Humphreys e contrárias. Houve críticas, também, às afirmações feitas por Humphreys referentes a técnica utilizada por Zuo e colaboradores, destacando-se Spackman e colaboradores, (2000); Coppens (2000); Wang e Schwarz (2000).

Dentre os defensores das ideias de Humphreys está o artigo “Observando Orbitais” de Kristin Leutwyler (1999). Além deste artigo da *Scientific American*, teve também o artigo de Mitch Jacoby (1999) (Orbitais imagem perfeita) e Paloma Zurer (1999) (Cinco principais realizações da Química em 1999?), publicados na *Chemical & Engineering News*, uma revista semanal publicada pela American Chemical Society.

Leutwyler (1999), argumenta ainda que “as fotos, tiradas usando uma técnica inovadora de Zuo, e colaboradores ‘confirmam que os orbitais são de fato moldados como esferas, halteres, pétalas e rosquinhas - dependendo da energia e outras propriedades dos elétrons habitando-os e interagindo com eles”.

Figura 11: Imagem do orbital d_{z^2} 

Fonte:(<https://www.scientificamerican.com/article/observing-orbitals/>)

Jacoby (1999, p.8), afirma que "o estudo atribui uma qualidade física, real a uma entidade matemática (o orbital d_{z^2} , de curiosa forma)". O artigo de Zurer (1999), colocou o trabalho de Zuo et.al (1999) entre as cinco maiores histórias de 1999.

Além dos trabalhos discutidos nos parágrafos antecedentes, os três artigos "Os orbitais foram realmente observados?" (Scerri, 2000) merecem uma atenção e finalizando mais um artigo de Scerri (2001 - A recente reivindicação da observação do orbitais e questões filosóficas envolvidas)

Scerri (2000, p 1492), argumenta que a maneira como a descoberta feita por Zuo e colaboradores foi comunicada "deu origem a uma certa confusão, pelo menos". Ele julga surpreendente que essa confusão tenha sido a "publicação de um artigo na prestigiosa revista Nature". Scerri é enfático no argumento: "Eu acredito que os autores deste artigo se aproximam de fazer a afirmação de que orbitais d foram literalmente observados" principalmente ao escreverem que: "A correspondência entre o nosso mapa experimental e os diagramas clássicos de orbitais d_{z^2} esboçados em livros didáticos é impressionante".

Scerri (2000, p 1492), considera graves as afirmações de Humphreys em seu artigo intitulado "Os elétrons vistos em órbita", pois [...] "os orbitais não podem ser observados. Os orbitais atômicos são construções matemáticas e, estritamente falando, são apenas funções de onda genuínas em sistemas de um elétron, como o átomo de hidrogênio". Ele conclui reafirmando "que os orbitais não podem ser observados diretamente. Não podem ser observados, ponto final". Diz ainda que, "é

essencial ter mais discernimento na atribuição da realidade física a entidades que são definidas teoricamente e que a própria teoria nos informa a não existência física”.

Na resposta de Spence, Zuo e O’Keeffe (2001) à Scerri, eles afirmam concordarem com o fato de os “orbitais atômicos não serem diretamente observáveis”. E advoga que o seu “artigo descreve uma nova técnica para o mapeamento de densidades de carga” e que “o objetivo do nosso trabalho [...] é o estudo das densidades de carga para elucidar os efeitos de ligação, e não a observação de orbitais”. E que devido a técnica utilizada “revela um mapa de diferença de densidade de carga para os átomos de cobre em óxido cuproso surpreendentemente semelhante às imagens de livros didáticos de um orbital d_{z^2} ”.

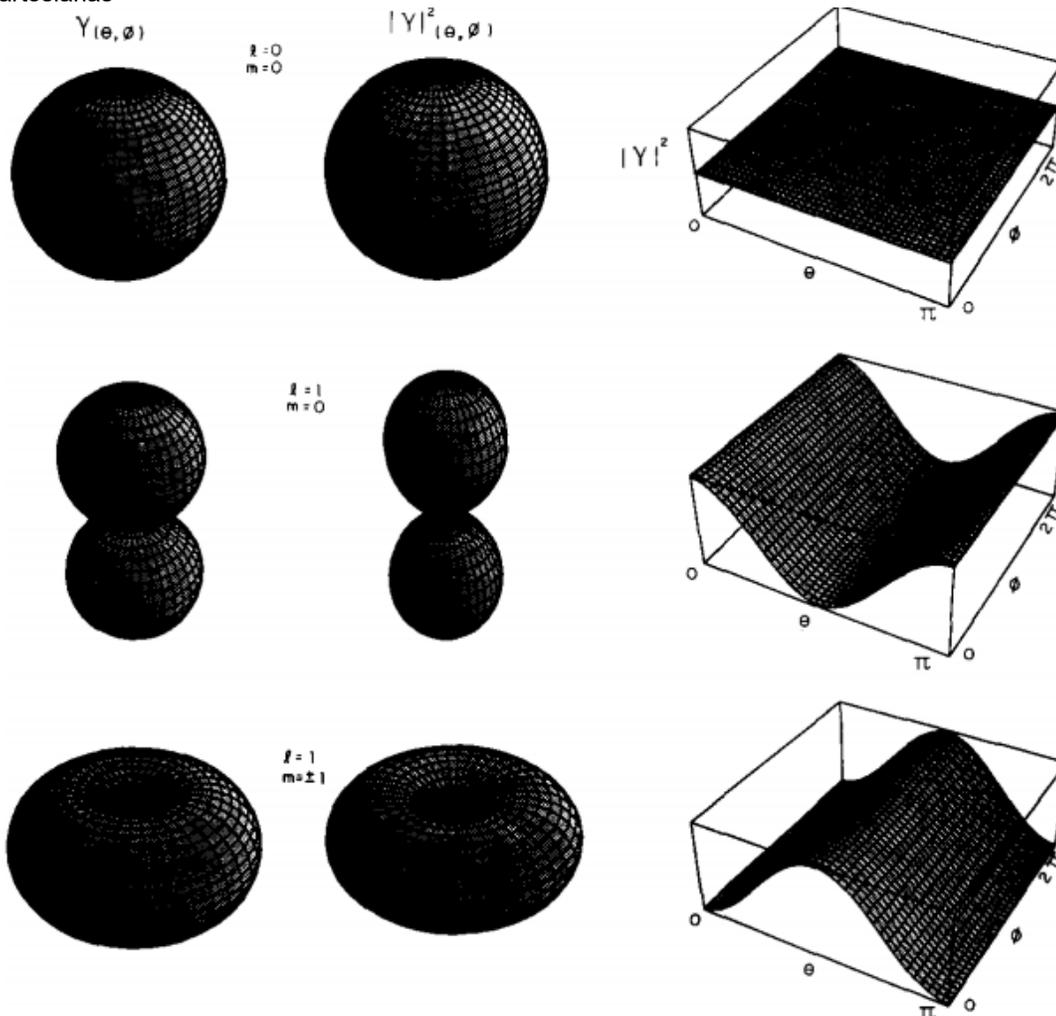
Spence e colaboradores (2001), se dizem conscientes a respeito de que as “funções da onda orbital são inobserváveis” e que “o modelo orbital permanece extremamente útil”. Porém, eles acham “perverso não mencionar a semelhança indubitável de nosso resultado final com o modelo simples de um elétron de uma distribuição orbital d de densidade de carga”.

Na contra-resposta, Scerri (2001) se diz aliviado por Spencer e sua equipe concordarem com o fato da não observabilidade dos orbitais. Porém, ao afirmarem que as imagens obtidas por seu grupo são semelhantes às “imagens de livros didáticos de uma orbital d_{z^2} ” é algo que Scerri questiona, pois é dúbia a crença na tal semelhança e a afirmação que os orbitais não podem ser observados. Scerri (2002, p310 afirma que “de acordo com a mecânica quântica, os elétrons não podem mais ser considerados como tendo trajetórias ou caminhos definidos”. Sendo esta propriedade uma razão categórica para negar a observabilidade dos orbitais.

Reflexão a respeito da realidade dos orbitais e o seu ensino

A interpretação de orbital atômico como região do espaço apresenta alguns aspectos problemáticos para o ensino. Em primeiro lugar, é possível imaginar que o movimento eletrônico esteja restrito ao espaço limitado pelo gráfico do esférico harmônico. Isso está errado, pois a parte radial da função de onda considera que a distância entre elétron e núcleo pode variar de zero a infinito. Logo, não há razão para tal restrição. Os gráficos da Figura 12, abaixo ilustram estas afirmativas.

Figura 12: Superfícies harmônicas esféricas $Y(\theta, \phi)$, $Y^2(\theta, \phi)$ e superfícies harmônicas em coordenadas cartesianas



Fonte: Ferreira e Porto (1993, p. 593)

Segundamente, não há razão para crer que o espaço onde se move o elétron seja restrito às formas dos gráficos dos esféricos harmônicos em coordenadas polares esféricas, em lugar de outro sistema de coordenadas qualquer. Isto significaria que a natureza só poderia ser compreendida de um modo específico — ou melhor: a natureza se revelaria de um modo específico — mas, se assim fosse, por que o sistema de coordenadas polares esféricas mereceria tal privilégio?

Os gráficos de $Y^*Y(\theta, \phi)$ também não podem ser análogos a imagens de um conjunto de posições do elétron no espaço — como se fossem fotografias — pois as relações de incerteza entre posição e momento mostram a impossibilidade de se obter tais imagens.

Em quarto lugar, pode-se pensar que o elétron permanece mais tempo na região do gráfico, porque a probabilidade de encontrá-lo ali seria maior. Isto também constitui um equívoco porque as expressões dos orbitais não dependem do tempo, correspondem a estados estacionários.

O fato é que o modelo atômico de orbitais resulta da tentativa de elaborar modos de calcular valores de grandezas relativas aos átomos, baseados no pressuposto que a matéria é constituída por tais entidades. As equações obtidas podem ser adequadas para os cálculos, mas não estão, necessariamente, vinculadas a qualquer imagem sensorial.

Por outro lado, a interpretação dos orbitais como lugar no espaço tornou-se um instrumento químico poderosíssimo, tanto na pesquisa quanto no ensino. Artigos e livros texto de química mostram como explorar tal conceito e obter resultados materiais surpreendentes fundamentados nas explicações das geometrias das moléculas e das ligações químicas, com consequências nas explicações de mecanismos de reação e propostas de novos mecanismos.

Conclui-se que, se a interpretação do formalismo do modelo atômico de orbitais pelos químicos não autoriza inferir que orbitais são locais concretos, definidos no espaço nos quais os elétrons se encontram, transformou os orbitais em poderosos instrumentos de pesquisa e ensino. Nem os modelos atômicos subsequentes, nem a teoria do orbital molecular escaparam de tal interpretação, contribuindo para o fortalecimento do poder construtivo de tais instrumentos.

3. METODOLOGIA

Toda pesquisa tem por objetivo encontrar respostas para "problemas mediante o emprego de procedimentos científicos". Tem-se então que o processo que faz uso da metodologia científica com intenção de obter novos conhecimentos no campo da realidade social é conhecido como pesquisa social. A realidade social engloba todos os aspectos relativos ao homem e suas relações com outros homens e instituições sociais. (GIL,2008. p.26)

A abordagem metodológica desta pesquisa será a qualitativa de acordo com Lüdke e André (1986) e algumas características de destaque nesta investigação: a) a pesquisa qualitativa tem o ambiente natural como sua fonte direta de dados e o pesquisador como seu principal instrumento; b) os dados coletados são predominantemente descritivos; c) a preocupação com o processo é muito maior do que com o produto.

A pesquisa qualitativa pretende aprofundar a compreensão dos fenômenos que investiga a partir de uma análise rigorosa e criteriosa (MORAES, 2003, p. 191). Os significados, motivos, aspirações, crenças, valores e atitudes são a fonte de estudo, correspondendo assim, a um "espaço mais profundo das relações, dos processos e dos fenômenos que não podem ser reduzidos à operacionalização de variáveis". (GERHARDT, SILVEIRA, 2009, p.31-32).

3.1 TIPO DE PESQUISA

Esta investigação será um estudo de natureza empírica do tipo Ação-Pesquisada. Por pesquisa empírica, também conhecida como pesquisa de campo, pressupõe a comprovação prática através de diversos métodos sejam de observação ou experimentação em determinado contexto com o objetivo de colher dados em campo. Nessa pesquisa como toda pesquisa de natureza empírica busca mergulhar nas questões propostas, ressaltando a interação de seus componentes. (GIL,2008).

Neste trabalho desenvolvemos o que Tripp (2005) denomina de ação pesquisada, pois utilizamos elementos da pesquisa-ação, de modo parcial, como se verá a seguir.

Tripp (2005), conceitua a “pesquisa-ação como uma forma de investigação-ação que utiliza técnicas de pesquisa consagradas para informar a ação que se decide tomar para melhorar a prática”, sendo que as técnicas de pesquisa devem atender aos critérios comuns a outros tipos de pesquisa acadêmica. Toda investigação-ação segue um processo comum: Planeja-se, implementa-se, descreve-se e avalia-se uma mudança para a melhora de sua prática, aprendendo mais, no correr do processo, tanto a respeito da prática quanto da própria investigação.

O objeto da ação-pesquisada é uma situação social e não um conjunto de variáveis isoladas que se poderiam analisar independentemente. O investigador abandona o papel de observador em proveito de uma atitude participativa e desse modo traz consigo uma série de conhecimentos que serão o substrato para a realização da sua análise reflexiva sobre a realidade e os elementos que a integram. A reflexão sobre a prática implica em modificações no conhecimento do pesquisador (p. 35). Esse envolvimento ativo do pesquisador tem sido alvo de críticas, porém, tem sido uma modalidade de pesquisa bastante usada por pesquisadores identificados pelas ideologias reformistas e participativas. (GIL,2007, p. 55)

Para a ação-pesquisada não há verdades científicas absolutas, “pois, todo conhecimento científico é provisório e dependente do contexto histórico, no qual os fenômenos são observados e interpretados.” Se estes conhecimentos científicos são provisórios e dependentes do contexto histórico, os professores deveriam transformar suas próprias salas de aula em objetos de pesquisa a fim de melhorar a prática e serem agentes transformadores do meio escolar. A ação-pesquisada é, portanto, o instrumento ideal para uma pesquisa relacionada à prática.

3.2 Contexto da pesquisa

A disciplina

A disciplina de Química Quântica I foi escolhida porque o professor já conhecia a Teoria Histórico-Cultural e sua aula já era planejada utilizando um enfoque histórico para ensinar e o conceito de orbital faz parte dos conteúdos. Desta forma, não foi necessário fazer a formação do professor para se adequar a Teoria Histórico-Cultural, poupando tempo para a execução da pesquisa.

A pesquisa foi feita nas turmas de 2015.2 (piloto) e 2016.1, da disciplina QUIA49-Química Quântica I que contam com cerca de 45 alunos cada, entre estudantes de licenciatura e bacharelado em Química. Química Quântica I é uma disciplina do 4º semestre do curso de Química da UFBA, que tem como pré-requisitos as disciplinas de QUIA42- Química Fundamental III e MATA03-Cálculo B. Na disciplina de Química Fundamental III, os estudantes entram em contato com o conceito de orbital, evolução dos modelos atômicos e teoria de ligações. Enquanto que a disciplina de Cálculo B fornece o conhecimento das equações diferenciais e das integrais necessárias para o andamento do curso. Uma outra disciplina na qual o conceito de orbital é introduzido é QUI 138- Química Orgânica Fundamental III, porém não é pré-requisito para cursar a disciplina Química Quântica I.

Química Quântica I, é considerada difícil pelos alunos e por não ser pré-requisito para nenhuma outra, muitos estudantes deixam para cursá-la no último semestre, ou em qualquer outro semestre subsequente ao quarto. A pesquisa ocorreu em uma situação real e em uma disciplina obrigatória do curso de química. Com isso, ocorreram problemas como: paralisações de aula por motivos diversos, falta de alunos, desistências, entre outros.

O professor

O professor da disciplina cursou Bacharelado em Química, é doutor em Química, faz parte do PPGEFHC (Programa de Pesquisa em Ensino, Filosofia e História das Ciências) e neste trabalho também participa como pesquisador. O objetivo do professor é melhorar a sua prática e avaliar se sua metodologia de ensino promove o desenvolvimento das funções mentais superiores dos estudantes.

A Turma 2016.1

A turma 2016.1 contava com 37 alunos no início do semestre, porém na última avaliação da disciplina contava com 30 alunos. A turma era heterogênea, em sua maioria bacharelados. Constituída por formandos, semestralizados, repetentes e não-semestralizados. No início era pouco participativa, porém com o decorrer do curso houve maior participação.

3.2.1 Proposta da aula

A elaboração da aula será de acordo com a revisão de literatura e em conjunto com o professor, levando em consideração a Teoria Histórico Cultural de Vigotski. Para avaliação do desenvolvimento dos estudantes serão utilizadas: observação das aulas e análise documental.

A aula tem abordagem histórica, pois Vigotski (2001) afirma que a análise histórica torna o conceito lógico. Inicialmente, o professor fará uma sondagem para perceber as concepções espontâneas dos estudantes.

Serão necessárias quatro aulas de cem minutos, sendo a primeira aula para explicar o formalismo da mecânica quântica e a segunda, o conceito de orbital. Na terceira aula será discutida a relação dos gráficos obtidos pela função de onda e a visão realista dos químicos. Na quarta aula, os estudantes deverão resolver os exercícios propostos.

Tabela 1: Objetivo das aulas relacionadas ao conceito de orbital

<i>Objetivo</i>
<i>Explicar as interpretações probabilísticas da parte radial e da parte angular dos orbitais.</i>
<i>Explicar o conceito de orbital como lugar do espaço.</i>
<i>Calcular a probabilidade de encontrar o elétron em um volume definido (volume duma camada esférica de espessura Δr e em uma esfera de raio r).</i>
<i>Calcular o valor mais provável da distância entre elétron e núcleo do átomo em dado nível de energia.</i>
<i>Explicar a grandeza do raio atômico com base na probabilidade de encontrar o elétron a dada distância do núcleo.</i>
<i>Explicar o conceito de hibridização de orbitais.</i>
<i>Construir orbitais híbridos como combinações lineares de outros orbitais (linearmente independentes ou não).</i>
<i>Relacionar orbitais híbridos com geometria molecular.</i>
<i>Explicar as limitações da interpretação realista de orbital como lugar do espaço.</i>
<i>Conceituar orbital como função de onda para um elétron em um átomo.</i>
<i>Construir gráficos da parte radial e da parte angular (esféricos harmônicos) dos orbitais em coordenadas cartesianas e coordenadas polares esféricas.</i>

As aulas nas quais o conceito de orbital está inserido, fazem parte da terceira unidade intitulada - **Átomo de hidrogênio e modelo atômico de orbitais** e o material didático utilizado foram os livros: BALL, D. W. Físico-Química; CRUZ, D.; CHAMIZO, J.; GARRITZ, A. Estructura Atômica: un enfoque químico, além de textos elaborados e disponibilizados pelo professor. Foram utilizados também os sites: THE ORBITRON: a gallery of atomic orbitals and molecular orbitals on the WWW. Disponível em: <http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>; ATOMIC ORBITALS. Disponível em: <http://www.orbitals.com/orb/>.

Esta proposta é bem diferente da convencional ministrada na UFBA, porque tem uma abordagem histórica, na qual os alunos poderão perceber como os cientistas chegaram às formulações e ao conceito de orbital dando lógica a este conceito. As discussões sobre realidade do orbital abordaram um aspecto epistemológico pouco comum no ensino de química e que recai sobre o trabalho do químico.

3.3 INSTRUMENTO DE COLETA DE DADOS

Para esta pesquisa será pré-requisito a participação voluntária dos estudantes e do professor em todas as etapas desta investigação. Na etapa inicial da pesquisa os participantes assinaram um termo de livre consentimento e esclarecimento (ANEXOS). Os dados coletados serão utilizados exclusivamente para fins acadêmicos e a identidade dos sujeitos de pesquisa será preservada.

Os instrumentos de coleta de dados foram pensados de forma que fosse possível analisar o desenvolvimento dos estudantes em uma disciplina que utiliza um enfoque histórico para o ensino do conceito de orbital. A intenção era responder à questão: "Como se dará a formação do conceito de orbital atômico para o aluno de Química?".

Teste de sondagem

A primeira atividade da disciplina foi apresentar o curso. O professor enviou um texto explicando como os estudantes deveriam resolver as questões e depois os estudantes receberam um questionário cujo objetivo era sondar os conhecimentos prévios dos mesmos. Esse questionário de sondagem além de diagnosticar como

andava os conceitos espontâneos, também proporcionou uma visão do que os estudantes trazem em sua memória a respeito conceito do orbital.

Segundo Vigotski (2001), a aprendizagem escolar nunca parte do zero e o desenvolvimento dos conceitos científicos depende de um amadurecimento dos conceitos espontâneos. Por isso, é importante sondar os conceitos trazidos pelo estudante antes dele mergulhar no novo conceito, pois estes conceitos prévios servirão como mediadores da assimilação do sistema de conceitos científicos. E uma forma de perceber a assimilação desse sistema de conceitos é observar nas respostas às questões que o estudante apresenta melhoria na precisão e na articulação da linguagem do senso comum.

O teste de sondagem aplicado trazia perguntas a respeito dos conceitos que foram ensinados na disciplina e a pergunta que fazia parte do conceito de orbital questionava o seguinte: **"Se tivesse que explicar para alguém que não conhece um orbital atômico, o que diria?"**— os critérios para análise das respostas têm relação com os termos utilizados para o conceito e o uso adequado desses termos. Outra questão analisada, foi: **Se tivesse que explicar para alguém que não conhece a interpretação probabilística da função de onda, o que diria?**

Exercícios e Avaliação

Nos exercícios e nas avaliações da disciplina foi pedido para os estudantes utilizarem sempre a linguagem escrita, pois o discurso escrito é a forma mais sofisticada e desenvolvida de linguagem. Na escrita os estudantes têm que organizar cada pensamento isolado, empregando muito mais palavras do que se faz com a linguagem falada. (VIGOTSKI,2001)

Nas primeiras aulas da disciplina o professor entregou um material para esclarecer aos estudantes como cada atividade deveria ser respondida, explicando a complexidade de cada explicação. As listas de exercícios tinham o objetivo de criar situações para que os estudantes praticassem a elaboração das explicações e pudessem discutir nas aulas para aperfeiçoamento das respostas. Para responder os exercícios os estudantes precisavam, também, dos conhecimentos discutidos nas aulas. Ao buscar tais conhecimentos nos textos e empregá-los nas respostas dos problemas propostos proporcionaria aos estudantes uma melhor memorização dos

conceitos de modo compreensivo e uma melhor percepção do momento em que deve usá-los, cada vez mais facilmente.

Os critérios de análise dos exercícios e atividades levaram em conta a escrita e emprego dos termos que fazem parte conceito. Considerando que é necessário fazer uma análise histórica para saber se houve desenvolvimento do estudante, o teste de sondagem também vai ser levado em conta.

Filmagem e observação das atividades

No que diz respeito à observação, deve-se ter por trás alguma teoria para fundamentá-la, pois, ao ver um objeto o observador depende em parte de sua experiência passada, de seu conhecimento e de suas expectativas e quando se assume que apenas ao olhar um objeto pode-se elaborar teorias e conceitos estaremos agindo como os indutivistas ingênuos ou empiristas.

Para se ter uma melhor observação das aulas de forma que a observação captasse a participação dos estudantes e do professor durante as aulas, foram utilizados filmadoras e gravadores de áudio, além da presença de um pesquisador. As aulas teóricas e de exercícios, foram observadas com o intuito de se aproximar do professor da disciplina e do trabalho por ele desenvolvido e também do desenvolvimento dos estudantes durante as aulas.

O processo de observação ocorreu durante os meses de setembro e outubro do ano de 2016.1, e o piloto em 2015.2. Foi explicado aos estudantes da disciplina que durante o semestre ocorreria a pesquisa e eles foram solicitados a ler e a assinar o Termo de Compromisso (ver ANEXOS). Todos os estudantes da turma aceitaram participar da pesquisa e assinaram Termo de Consentimento Livre e Esclarecido, assegurando a eles o sigilo acerca de suas identidades.

A atuação do professor e sua metodologia de ensino foram observadas durante as aulas e através de conversas informais com os estudantes. Para analisar a disposição dos alunos ao aprendizado utilizamos a observação e a aplicação de questionários e conversas informais. Foi observada a atitude (atenção e/ou percepção do que se tratava na aula, interação com os colegas e o professor, participação nas discussões, resolução dos exercícios) dos alunos em sala de aula.

Os objetivos traçados pelo professor (em anexo) foram analisados com base na Teoria Histórico-Cultural e comparados com o mapa conceitual para verificar se os

conceitos foram apresentados de forma hierárquica e dentro do sistema de conceitos do qual faz parte o orbital atômico. Para análise das filmagens foi utilizado o software Atlas.ti®.

3.4. ANÁLISE DE DADOS

Para a análise dos dados obtidos será feita uma Análise de Conteúdo (BARDIN, 1977). A análise de conteúdo é um conjunto de técnicas de análise das comunicações, dos significados e também dos seus significantes. Apurando as descrições de conteúdo e evidenciando a sua natureza. A análise de conteúdo pode ser utilizada para decifrar qualquer significado, desde que esteja envolvida a linguagem. Pode se afirmar que a compreensão de um determinado contexto, registro ou código é o principal objetivo deste instrumento. (BARDIN,1977. p.28-42)

A análise das repostas dos estudantes foi realizada em duas etapas: em primeiro lugar, foi feita uma análise de conteúdo do argumento dos estudantes visando localizar os termos que deveriam ser empregados nas respostas. Em seguida, esses termos foram quantificados. Na segunda etapa, os trechos foram analisados por comparação com os conceitos constantes do nosso referencial teórico que serviram como categoria de análise. Para efeito de identificação e garantir a não divulgação dos nomes dos estudantes foram substituídos pelo código: Aluno 1, Aluno 2 ..., sem nenhuma relação com caderneta de chamada da disciplina.

4.RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. Observação piloto em 2015.2.

O semestre de 2015.2 foi utilizado para os testes de posicionamento das câmeras para filmagem das aulas, discussão dos temas entre o professor e o pesquisador, escolha de algumas questões para as listas de exercícios que foram utilizadas, observação da recepção dos textos por parte dos estudantes. No final do semestre de 2015.2, verificou-se o que deu certo, modificou-se o que não deu certo e aplicou-se no semestre seguinte.

As mudanças e melhorias que ocorreram foram relacionadas a erros de ortografia nos textos e acrescentar um texto que explicasse os formalismos da Mecânica Quântica que seria utilizada na disciplina. O texto escolhido foi Química Quântica. Parte II- O átomo de Hidrogênio de Eduardo M.A. Peixoto – Química Nova, 1978. Com relação às avaliações foi percebido que os estudantes tinham dificuldades em responder as questões, então o professor criou um texto chamado "Explicando explicações" e o mesmo foi utilizado no semestre de 2016.1.

Outras mudanças e melhorias que ocorreram foram relacionadas ao posicionamento das câmeras e a situação de melhoria foi colocar duas câmeras uma no alto do armário direcionada aos estudantes e outra direcionada ao professor, desta forma conseguimos captar nas aulas o trabalho do professor e as reações dos alunos. Não foram filmados os momentos de avaliação, porque poderia deixar os estudantes estressados. Um texto de Dutra sobre realismo e antirrealismo científico também foi acrescentado para discussão em sala de aula, porém houve pouca receptividade por parte dos estudantes e a discussão foi pouco produtiva.

O semestre de 2015.2 também serviu para aprofundamento por parte do pesquisador na Teoria Histórico-Cultural e na Teoria Quântica, pois ao se deparar com a realidade, notou-se que esse aprofundamento era necessário para uma melhor análise dos produtos desta pesquisa. Além disso, também foi criado um teste de sondagem que não tinha sido aplicado anteriormente.

4.2. Teste de sondagem

O questionário de sondagem foi respondido por trinta e cinco alunos matriculados na disciplina. Ao serem questionados: **Se tivesse que explicar para alguém que não conhece um orbital atômico, o que diria?**

Inicialmente foi avaliado o uso dos termos que são utilizados para conceituar o orbital. Consideramos os dois seguintes significados, conforme discutido no Referencial Teórico:

- a) Função de onda para um elétron.
- b) Região do espaço onde a probabilidade de encontrar o elétron é maior.

Os resultados apontam que os termos mais utilizados pelos estudantes são: elétron, probabilidade, e função de onda.

Tabela 1 – Classificação das respostas dos estudantes ao teste de sondagem quanto ao tipo de conceito de orbital atômico

Tipo de conceito	Quantidade
Matemático: Função de onda para um elétron.	9
Físico-Químico: Região do espaço onde a probabilidade de encontrar o elétron é maior.	16
Híbrido:	6
Não conceituaram	6

A quantidade de termos apresentados na tabela acima demonstra que a maioria dos estudantes utiliza mais o conceito de orbital como região do espaço. Era esperado que todos respondessem à questão, pois se tratava de um conceito recorrente no semestre em que os estudantes estavam cursando a disciplina de Química Quântica I. Porém, seis estudantes não souberam ou não lembravam como responder à pergunta.

Tabela 2: Termos utilizados na conceituação do orbital atômico no teste de sondagem

Tipo de conceito	Termos empregados na conceituação	Quantidade
Matemático	Função de onda	3
	Descreve	3
	Movimento	3
	Elétron (vinculado)	3
Físico-Químico	Região	6
	Probabilidade	6
	Elétron (vinculado)	6
Híbrido	Função de onda	3
	Região	2
	Probabilidade	3
	Elétron (vinculado)	3
Outras formas de conceituação	Função matemática	3
	Local	3
	Provável	3
	Elétron	3

Todos os estudantes que adotaram o conceito matemático utilizaram o termo função ou função de onda, mas não o empregaram de forma adequada. Por exemplo:

Aluno 1: *Orbital atômico é um conceito utilizado pela TLV que descreve a função de onda.*⁵

Uma possível justificativa para o fato de os estudantes apresentarem um uso inadequado dos termos relacionados ao conceito matemático de orbital, pode ser o enfoque dado ao conceito na disciplina de Química Fundamental III. Pois o ensino desse conceito, nessa disciplina, tinha como objetivo principal explicar as teorias de

⁵ As respostas dos estudantes foram grafadas em itálico, para dar maior destaque em relação ao texto que foi com aspas.

ligação (TLV e TOM). O conceito de orbital é apenas um dos temas entre um rol de assuntos que devem ser ensinados pelo professor da disciplina como: Estrutura do Átomo: modelo da mecânica quântica; Teorias de Ligação: teoria da ligação de valência; introdução à teoria do orbital molecular; Reações ácido-base: conceitos ácido-base de Arrhenius, Brönsted-Lowry e Lewis; pH; forças de ácidos e bases; Reações redox: eletroquímica.

O outro aspecto que pode ser observado é como aparece o conceito de orbital nos livros didáticos utilizados na disciplina de Química Fundamental III, por exemplo o Atkins e Jones (2012):

*As funções de onda de elétrons em átomos são chamadas de **orbitais atômicos**.*

O outro livro usado é o Brown e Lemay (20095) e apresenta o seguinte conceito para orbital:

*Ao resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio encontra-se um conjunto de funções de onda e as energias correspondentes. Essas funções de onda são chamadas **orbitais**.*

O conceito de orbital é apresentado nesses livros de forma que não deixa claro que o termo apresenta dois conceitos, e isso é refletido na assimilação e no uso do conceito por parte dos estudantes.

Em relação ao conceito físico-químico de orbital, seis estudantes aplicaram corretamente o termo região ou região do espaço. Por exemplo:

Aluno 7: "[...] *orbital atômico é uma região do espaço que é possível encontrar o elétron com uma certa probabilidade*".

Podemos considerar que o Aluno 7 está no nível classificado por Vigotski como pensamento por conceitos, pois o estudante conseguiu utilizar os termos de forma sistemática e consciente.

Dois estudantes utilizaram de forma inadequada os termos, por exemplo:

Aluno 33: "*Orbital atômico é a função de onda, que resulta em números quânticos, cuja interpretação permite saber a região de probabilidade de localização do elétron*".

Nota-se que os estudantes que apresentaram o tipo de resposta como a do Aluno 33, se enquadram no que Vigotski chama de pensamento sincrético, pois para

resolver o problema proposto eles utilizam uma resposta de modo aparentemente desconexo, ou seja, não fica claro que relações foram estabelecidas entre os termos para formar a resposta. Pelo fato dessas relações não serem claras, supõe-se que existam subjetivamente e que sejam sincréticas.

Um fato observado foi que muitos estudantes utilizaram uma junção dos dois conceitos de orbital, por exemplo:

Aluno 13: "É uma função de onda que representa uma determinada região no espaço que apresenta probabilidade de encontrar o elétron numa dada espécie química".

A resposta do Aluno 13, pode ser considerada como dentro do nível de desenvolvimento do pensamento por complexos, porque o estudante utilizou os termos com algum critério, porém é fácil perceber que são critérios objetivos. É perceptível que o sujeito já desenvolveu a abstração e generalidade, mas, ainda não se encontra no nível de abstração e generalidade do conceito.

De acordo, com as respostas dadas pelos estudantes podemos sugerir que estes apresentam uma visão realista do orbital, pois na maioria dos resultados os termos: região, local, posição e espaço surgem com maior frequência.

Partindo da ideia que a formação dos conceitos científicos tem como base o processo de formação de conceitos espontâneos e considerando que os estudantes tiveram contato com o conceito de orbital na disciplina Química Fundamental III, podemos considerar que este conceito é científico, porém ele deve estar na memória de qualquer estudante de química. Para Vigotski (2001), o desenvolvimento dos conceitos espontâneos e científicos são processos intimamente conectados e são mutuamente influentes. Por isso é importante a sondagem dos conhecimentos trazidos pelo estudante para o professor poder adequar sua aula para sanar esses problemas.

Temos que a atividade consciente do homem é dependente da percepção, da atenção e da memória. A percepção é um processo complexo de objetos e situações, mediado por conhecimentos e experiências anteriores. Os resultados obtidos das análises da sondagem indicam que os estudantes não tomaram consciência do conceito e nem do seu sistema de conceitos. De acordo com Vigotski (2001), essa ausência de sistematicidade dos conceitos científicos resulta em conceitos não conscientizados e não-voluntários. E essa ausência fica clara nas respostas dos

estudantes que utilizam os termos que fazem parte do sistema de conceitos, mas usam de forma equivocada.

Uma questão pertinente foi levantada por Bent (1984), Ogilvie (1990), Gillespie (1991), Hawkes (1992) e Pauling (1992): qual a necessidade de ensinar o conceito de orbital na química geral? Os resultados encontrados nessa sondagem demonstram que está ocorrendo problemas no ensino do conteúdo referente ao conceito de orbital, pois os estudantes apresentaram respostas de forma fragmentada, e no que diz respeito ao conceito matemático de forma inadequada.

O questionário de sondagem apresentava outra questão dentro do escopo deste trabalho e foi respondido por trinta e cinco alunos matriculados na disciplina. Ao serem questionados: **Se tivesse que explicar para alguém que não conhece a interpretação probabilística da função de onda, o que diria?**

Inicialmente foi avaliado o uso dos termos que são utilizados para explicar a **interpretação probabilística da função de onda**. Consideramos a seguinte possível resposta, conforme discutido no Referencial Teórico:

A probabilidade ao quadrado do módulo da função de onda, $\psi^*\psi$, é interpretada como a densidade de probabilidade de se encontrar o sistema em dada região do espaço.

Tabela 3 – Classificação das respostas dos estudantes ao teste de sondagem quanto a interpretação probabilística da função de onda

Tipo de conceito	Quantidade
A probabilidade ao quadrado do módulo da função de onda, $\psi^*\psi$, é interpretada a densidade de probabilidade de se encontrar o sistema em dada região do espaço.	21
outra	3
Não conceituaram	8

Os termos apresentados na tabela acima demonstra que a maioria dos estudantes se aproximam do conceito relacionado a interpretação probabilística da função de onda. Os resultados apontam que os termos mais utilizados pelos estudantes são: probabilidade e função de onda, ou seja, na percepção dos

estudantes os termos mais importantes para responderem a contento o que se pede no enunciado proposto não traz consigo os conhecimentos e experiências anteriores, que possibilitem uma resposta coerente com a teoria exigida na questão.

A maioria dos estudantes utilizaram os termos função de onda e probabilidade, porém apenas um estudante utilizou os termos de forma adequada com a possível resposta:

Aluno 1: A interpretação probabilística de uma função de onda refere-se à densidade de probabilidade que um elétron pode ser descrito. Ou seja, na região descrita pela função de onda, há uma probabilidade maior de se encontrar um elétron. Em dados estatísticos, pode ser considerado como o espaço amostral.

O Aluno1 demonstra através da sua resposta que está na passagem do pensamento por complexos ao pensamento por conceitos, pois ele já consegue analisar e a abstrair elementos do conceito, porém o conceito ainda não está sistemático e consciente.

Das respostas dos estudantes foi possível selecionar os seguintes termos:

Tabela 4: Termos utilizados na conceituação da interpretação probabilística da função de onda

Tipo de conceito	Termos empregados na conceituação	Quantidade
Born associou a probabilidade ao quadrado do módulo da função de onda, $\psi^*\psi$, interpretando-o a densidade de probabilidade de se encontrar o sistema em dada região do espaço.	Função de onda	17
	Probabilidade	22
	Densidade	4
	Região	13
	Espaço	5
	Encontrar	14
Outras formas de conceituação	Posição	3
	Local	1
	É ψ^2	2
	orbitais	1
	equação de Schroedinger	1

A maioria dos estudantes utilizou os termos necessários para conceituar sobre a Interpretação Probabilística da função de onda, mas apresentaram os termos de forma não sistemática o que caracteriza um pensamento por complexos. Abaixo um exemplo de resposta de estudantes que apresentaram uma outra forma de conceito, no qual os termos estão inadequados e/ou se afastaram da possível resposta:

Aluno 4: *"Ao utilizar a equação de Schrodinger usa-se o termo ψ (psi) função de onda, para determinar a velocidade da partícula ou sua localização. E ψ^2 determina com precisão onde se encontra o elétron (não tenho certeza da resposta)".*

Nas respostas abaixo, os dois estudantes (Aluno 7 e Aluno 32) utilizaram de forma inadequada os termos, porém pode se observar que estão bem próximos da possível resposta, denotando uma passagem do pensamento complexo para o pensamento por conceitos:

Aluno 7: *"Diria que é a probabilidade matemática na qual o elétron pode ser encontrado, que por razões de um melhor entendimento e compreensão, "erroneamente" transformamos em orbitais. "*

Aluno 32: *Se refere a probabilidade de encontrar o elétron, de localizar a densidade eletrônica em determinado tempo num átomo.*

Dos livros utilizados nas disciplinas de Química Fundamental, o que apresenta uma explicação interessante é o livro Atkins e Loretta (2005, p 123), que afirma o seguinte sobre a Interpretação Probabilística da Função de Onda:

*O físico alemão Max Born propôs uma interpretação física para a função de onda. Na interpretação de Born da função de onda, a probabilidade de encontrar uma partícula em uma região é proporcional ao valor de ψ^2 . Para ser mais preciso, ψ^2 é uma **densidade de probabilidade**, isto é, a probabilidade de que a partícula esteja em uma pequena região do espaço dividida pelo volume da região ocupada. Assim, para calcular a probabilidade de que a partícula esteja em uma pequena região do espaço, é preciso multiplicar ψ^2 pelo volume da região.*

4.3. Análise dos vídeos

A disciplina de Química Quântica I era dividida em aulas teóricas e aulas de exercícios. Por se tratar da última aula para a última prova do semestre, a aula de exercício que precedeu a 3ª Prova teve a participação de 18 alunos, porém apenas a

Aluna 18 se mostrou mais falante e a que mais tirou dúvidas. A aula de exercícios consiste em discussão das respostas dos alunos a um questionário enviado pelo professor no início de cada unidade.

O fato que deve ser esclarecido é que nos vídeos das aulas que precederam essa aula de exercícios não houve perguntas por parte dos estudantes, na maior parte do tempo eles permaneceram calados e pouco interagem durante as aulas. Em contrapartida, nas aulas de exercícios havia maior participação e nessas aulas os alunos deviam chegar com as dúvidas e/ou apresentar suas respostas para que fossem discutidas e, com auxílio dos colegas e do professor, deveriam chegar a uma resposta para explicar o que se pedia nas questões. O material enviado pelo professor no início do semestre intitulado " Explicando explicações", deixa claro que:

Explicar algo significa “tornar [algo] claro ou inteligível”, “dar a conhecer [algo]”. **Porque** é uma conjunção (vocábulo que serve para relacionar duas orações ou dois termos) resultante da fusão da preposição **por** com o pronome **que**. **Por**, significa, primariamente, “através de”, não no sentido de atravessar, mas, de ser intermediário; **que**, sendo pronome, substitui o nome de algo. Logo, a expressão **explique porque**, pode ser entendida como a solicitação de **tornar algo claro através (ou por meio) de outro algo**, ou, **dar a conhecer algo através (ou por meio) de outro algo**. Em outras palavras: a expressão **explique porque** pede que se estabeleça uma relação entre diferentes fatos/ideias/objetos, de modo a tornar um fato/ideia/objeto mais claro, através (ou por meio) de relações estabelecidas com outros fatos/ideias/objetos.

Partindo dessas ideias temos uma discussão interessante que surgiu na questão abaixo:

3. Compare os seguintes aspectos do átomo de hidrogênio segundo o modelo atômico de Bohr-Sommerfeld e o modelo atômico de orbitais:

- 3.1 . relação entre os valores de energia do elétron e os números quânticos n, l e m;
- 3.2. mudança de estado do elétron;
- 3.3. descrição do movimento do elétron em volta do núcleo

Com respeito a questão 3.1

ALUNO 18: De acordo com modelo de Bohr-Sommerfeld o valor de energia do eletron é calculado por

$$E_n = - \frac{\mu e^4 Z^2}{2n^2 \hbar^2}$$

e os números quânticos (n , l , m) aparecem quando se fatora a equação de Schrödinger em três equações correspondentes a ϕ , θ e r

PROFESSOR: Essa resposta não tá boa ...

ALUNO 10: Fatora a expressão?!

ALUNO 18: Por quê?

PROFESSOR: Você colocou um conectivo e ...desnecessário. Porque você tinha falado de Bohr-Sommerfeld e colocou esse conectivo e aí emenda com Schroedinger.

ALUNO 18: Então, eu coloco o que?

PROFESSOR: Coloca um ponto parágrafo. E muda de assunto. Se você vai falar dos números quânticos também, você pode falar de Bohr-Sommerfeld. Certo?

ALUNO 18: OK! Então o texto da resposta fica assim: Os números quânticos n , l , m aparecem quando fatora-se a Equação de Schrödinger em três equações correspondentes a ϕ , θ e r . Sabendo que ao final dos estudos Schrödinger chegou à conclusão que a energia do elétron poderia ser calculado da mesma forma que calculado por Bohr-Sommerfeld podemos estabelecer uma relação de identidade entre os valores de energia encontrados com o modelo de Bohr-Sommerfeld e os números quânticos. Tá bom?

(Todos na sala escutam atentos.)

PROFESSOR: Não.

ALUNO 18: Não tá bom? (sorrindo)

PROFESSOR: Tem muita coisa...desnecessária. E isso tem a ver com a forma como você entendeu as coisas.

ALUNO 3: Professor! Depois que ela explica que a energia pode ser calculada da mesma forma, eu concluí dizendo que a energia só dependeria do número quântico n , porque independente de m e l , pois eles estão na fórmula.

PROFESSOR: Veja! você pode responder assim: No modelo de Bohr-Sommerfeld a expressão de energia é essa... no modelo de orbitais ou de Schrödinger (como você quiser chamar) a expressão é essa. Como as expressões são as mesmas ambas só dependem de n e não de l e m .

ALUNO 18: Eu não gostei dessa resposta do senhor!

PROFESSOR: Olhe, se você responde por simetria, você coloca que n , l , m vieram da resolução da equação de Schrödinger, é bom você saber disso, mas a pergunta não quer saber disso. Não está errado. Mas, era de esperar que você colocasse na

questão como os números quânticos de Sommerfeld aparecem, por simetria. Tá entendendo?

ALUNO 18: Eu tô!

PROFESSOR: Porque você fala dos números quânticos de um e não fala dos números quânticos do outro... Explica aí seu raciocínio

ALUNO 18: Eu pensei que eu teria que explicar

PROFESSOR: Fala aí o seu raciocínio

ALUNO 18: Pra questão ficar fazendo links eu teria que fazer um link do número quântico com a energia.

PROFESSOR: Perfeito!

ALUNO 18: A partir daí ...

PROFESSOR: você fez na última frase.

ALUNO 18: Foi!

PROFESSOR: você fez a partir da equação da energia.

ALUNO 18 (Para e começa a reler a sua resposta.)

PROFESSOR: você só fez a partir da equação de energia. Não foi a partir da equação de Schrödinger que você fez. Se você faz para o Modelo de Bohr-Sommerfeld a equação é essa e para equação de Schrödinger é essa, a mesma equação, donde os valores de energia para os dois modelos independem de m e l . O fato é o seguinte, o l só vai interferir quando tivermos átomos polieletrônicos.

Nos apoiando em Vigotski (1991, p.58), temos que ao tentar resolver os exercícios sozinho o estudante está no nível de desenvolvimento real, pois se ele pode fazer tal e tal coisa, independentemente, isso significa que as funções para tal e tal coisa já amadureceram nele. Ao se depararem com a resolução de problemas (exercícios) ficam aparentes as diferenças no desenvolvimento dos estudantes, pois alguns ainda necessitam do auxílio do colega, que sabe um pouco mais do assunto, ou do professor. Essa diferença entre o que os estudantes resolvem independentemente e o que conseguem resolver com a ajuda de um professor ou colega mais experiente é o que Vigotski denominou Zona de Desenvolvimento Proximal.

Na sequência temos a discussão da Questão 3.2 e 3.3. Assim como ocorrido na questão anterior houve uma maior participação da Aluna 18, porém houve inserções de outros estudantes durante a discussão. Temos uma interação

interessante entre os alunos e uma participação do professor como mediador e pessoa mais experiente, segue então o diálogo inicialmente na Questão 3.2:

ALUNO 18: A mudança do número quântico indica mudança de estado do elétron tanto pelo modelo de Bohr-Sommerfeld quanto pelo de Schrödinger por isso podemos fazer uma relação de identidade.

PROFESSOR: Tá faltando. O que tá faltando? Quem ajuda?

ALUNO (não identificado): A mudança do número quântico n , muda o estado do elétron uma vez que ele está relacionado a energia do estado.

PROFESSOR: Até aí, ela está certa também. Continue! Ela não citou n , mas citou energia e mudança de estado.

PROFESSOR: O que tá faltando é em relação a identidade.

A aluna 18 relê o texto escrito por ela e diz que está faltando algo.

ALUNO 9: Seria a mudança de estado pra outro?

PROFESSOR: Tá mais seguindo a linha de raciocínio dela. Se a energia entre dois estados é idêntica. O que podemos dizer?

PROFESSOR: Os valores dos números quânticos que são usados na expressão de Sommerfeld e de Schrödinger são idênticos. É por isso que pela energia você enxerga mais fácil. Entendeu?

A energia só depende de n , o resto é tudo constante. Se você tem dois estados, os estados são idênticos que possuem números quânticos idênticos. Então a mudança de estado em um modelo é igual a mudança de estado no outro. Aí se quiser, você pode dizer que se mudar do estado 1 para o estado 2 de acordo com o modelo de Bohr-Sommerfeld é idêntico a mudar do estado 1 para o estado 2 no modelo de orbitais. Percebe? Porque os números quânticos têm os mesmos valores. Porque eles poderiam ter a mesma forma e a mesma expressão e os valores serem diferentes. Por isso, que eu não queria aceitar a ideia da forma, os valores de n ... se você tivesse escrevendo como nR e $n\theta$ ou m , você teria números com valores diferentes para representar o mesmo estado e teria que fazer uma coisa muito mais complexa. Porque você estaria decompondo n .

A questão 3.3.

PROFESSOR: Todo mundo identifica que a resposta aí não é idêntica? Todo mundo identifica que os modelos são diferentes?

ALUNOS (Todos): sim!

PROFESSOR: Essa questão foi colocada para chamar atenção do que é que fica e do que não fica quando passa de um modelo para o outro. Recapitulando: o modelo de Dalton durou o sec. XIX (átomo indivisível), no final do sec. XIX o átomo divisível (interrompe a gravação) ... Aí surge o problema da estrutura, se ele é divisível como essas partes estão organizadas? O que é estrutura? Organização das partes do átomo. Aí aparece a noção de núcleo, aparece aí depois a noção de órbita, de movimento em volta do núcleo. Certo?! E esse movimento em volta do núcleo foi proposto primeiro em movimento circular e depois elíptica generalizada por assim dizer (o círculo é um caso particular da elipse, onde dois semieixos são iguais). E depois cai essa noção de órbita com o Princípio da Incerteza de Heisenberg. Isso não quer dizer que o elétron no nível p está andando como estivesse em um oito. Como aqueles desenhos do esférico harmônicos aquilo não é o desenho da órbita do elétron. Não tem mais como atribuir uma trajetória, porque não posso calcular o instante seguinte. Se eu meço, eu perturbo e altero a trajetória.

ALUNO 3: No modelo de Bohr o elétron estaria em movimento em órbita circular ao redor do núcleo. O modelo de Schrödinger o elétron pode ser encontrado por uma probabilidade, porém em ambos os modelos não possui trajetória definida, pois não há como determinar simultaneamente a posição e o momento do elétron de acordo com Princípio de Heisenberg.

ALUNOS 18, 10: Não, o de Bohr possui trajetória definida.

ALUNO 3: Bohr possui?

ALUNO 10: Sim ele possui trajetória.

ALUNO 3: É definida?

ALUNOS 18, 10: sim

PROFESSOR: O modelo de Bohr é anterior ao Princípio da Incerteza.

ALUNO 18: Bohr postulou que o elétron se move em orbita circular ao redor do núcleo, enquanto que no modelo de Schrödinger não é possível definir uma trajetória pois a incerteza na medição da posição e do momento de partículas subatômicas

A situação descrita na resolução da questão 3 está em conformidade com o que Zanella (1994) nos apresenta como ZDP no contexto da sala de aula, ao observarmos as falas do professor nota-se que o seu objetivo e o seu esforço maior é que os estudantes se apropriem dos conhecimentos relativos aos conceitos ensinados e dessa forma ocorra a construção de funções psicológicas superiores com autonomia

no pensar e no agir. A todo momento observa-se a importância do sistema social para aprendizagem, porém, esse sistema não foi entendido em sua plenitude pelos estudantes, pois apenas a aluna 18 participa da construção do conhecimento e os seus colegas pouco participam.

Outro ponto que fica claro é que quando os alunos interagem a construção das respostas se dá de maneira mais fluida, pois a atuação do professor é direta na ZDP, constituído nas e pelas interações sociais em que os sujeitos se encontram envolvidos com problemas ou situações que remetam à confrontação de pontos de vista diferenciados. (ZANELLA, 1994, p.108)

4.4. Análise das respostas da avaliação

Inicialmente foi avaliado o uso dos termos que foram utilizados para responder as questões, porém para um melhor entendimento dividimos em duas partes. Consideramos o que foi discutido no Referencial Teórico, o que foi respondido no teste de sondagem e a possível resposta:

1. Descreva o movimento do elétron de um átomo de hidrogênio no estado fundamental segundo o modelo de orbitais e segundo o modelo atômico de Bohr.

No modelo atômico de Bohr o elétron se movimenta em órbitas em volta do núcleo, em trajetórias circulares com raio definido. O estado fundamental é aquele em que a energia e o raio são menores.

No modelo atômico de orbitais o elétron se movimenta em volta do núcleo, em trajetórias não definidas. O estado fundamental é aquele em que a energia é menor e a função de onda possui o menor número quântico principal, $n = 1$.

Inicialmente foi avaliado o uso dos termos que são utilizados para responder à questão. Consideramos os seguintes significados, conforme discutido no Referencial Teórico:

Tabela 5: Categorias utilizadas para análise das respostas dos estudantes na questão 1

Categorias de análise	QUANTIDADE
No modelo atômico de Bohr o elétron se movimenta em órbitas	26
O estado fundamental é aquele em que a energia e o raio são menores.	12
No modelo atômico de orbitais o elétron se movimenta em trajetórias não definidas	28
O estado fundamental é aquele em que a energia é menor e a função de onda possui o menor número quântico principal, $n = 1$.	6

Na tabela 5 pode ser observado que houve o uso dos termos necessários para resposta por parte de muitos alunos, porém houve pouco uso dos termos relacionados ao estado fundamental para o modelo de orbitais. Possivelmente, os estudantes não tomaram consciência desse conceito, além disso, como relatado na análise de vídeo, apenas uma aluna se destacava na hora de tirar as dúvidas.

Os termos mais utilizados pelos estudantes foram comparados com a possível resposta e com o teste de sondagem, assim como na questão anterior. Ao analisarmos as respostas dos estudantes percebeu-se que a maioria dos estudantes apresentaram respostas incompletas, não usaram ou não sabiam identificar a diferença do termo estado fundamental nos modelos de Bohr e no modelo de orbitais.

Um exemplo do uso adequado dos termos que estão destacados na tabela 6 é apresentado abaixo. Tal resposta pode ser assim considerada devido a quantidade e emprego dos termos pelo estudante.

Aluno 1: O estado fundamental é aquele de menor energia. Comparando os dois modelos atômicos, é possível observar que existem diferenças quanto a trajetória do elétron no átomo: No modelo de orbitais, a trajetória do elétron não é definida, pois não há a possibilidade de medir posição e o momento do elétron simultaneamente com precisão, assim, a posição do elétron é dada em termos probabilísticos; enquanto que no modelo atômico de Bohr, o elétron orbita ao redor do núcleo em trajetória circular. O estado de um sistema é caracterizado por um conjunto de propriedades, o estado fundamental é aquele de menor energia em ambos os modelos e é determinado pelo número quântico principal $n=1$.

Na Tabela 6, estão apresentados os termos mais utilizados pelos estudantes em suas respostas.

Tabela 6: Termos empregados pelos estudantes na questão 1

Termos empregados	QUANTIDADE
Modelo de Bohr	26
Trajectoria ou movimento circular	19
Órbita	19
Elétron	8
Em torno do núcleo	22
Quantizado	5
Menor energia	5
Estado fundamental	12
Modelo atômico de orbitais	28
Princípio da Incerteza	7
Trajectoria indefinida	16
Elétron	13
Probabilidade	11
Núcleo	11
Estado fundamental	6

O desenvolvimento da análise, da abstração e da generalização ocorrido durante a formação espontânea de conceitos (átomo, orbital atômico e princípio da incerteza) vão servir de base para a formação dos conceitos científicos. O Aluno 1 e os outros estudantes que utilizaram os termos de forma adequada demonstram uma maior sistematização e conscientização próprias deste tipo de conceitos que atuam sobre a formação de conceitos espontâneos, abrindo novas possibilidades. Por isso apresentaram melhoria na precisão e na articulação da linguagem do senso comum.

Para analisar a segunda parte da questão temos que os termos que devem aparecer na questão 1.1, estão expostos na possível resposta, a seguir:

1.1. Explique as diferenças entre as duas descrições, com base no princípio da incerteza e na interpretação probabilística da função de onda.

O princípio da incerteza, estabelece ser impossível determinar com exatidão e simultaneamente os valores da posição e do momento de um sistema de dimensões dos níveis atômico-molecular e subatômico. Como a determinação de uma trajetória requer o

conhecimento exato da posição e do momento do sistema em um instante, verificou-se que as trajetórias propostas no modelo atômico de Bohr não podiam ser determinadas ou calculadas, perdendo seu significado.

Como não se conhece a trajetória do elétron, calcula-se a probabilidade de encontrá-lo em regiões delimitadas do espaço em volta do núcleo com base na interpretação probabilística da função de onda, por meio da expressão:

$$P = \int_V \Psi^* \Psi dV$$

onde Ψ^* é o conjugado de Ψ e dV é todo o espaço de existência do elétron em volta do núcleo.

Denominamos orbital à região do espaço definida em volta do núcleo onde há probabilidade de encontrar o elétron. Nesse sentido, o orbital substitui a órbita do modelo de Bohr.

Na tabela 7 pode ser observado que os termos relacionados as trajetórias e ao princípio da incerteza com o modelo de Bohr não foram usados na maioria das respostas dos alunos. Na discussão registrada na análise dos vídeos, um dos pontos discutido era justamente a antecedência do modelo de Bohr em relação ao princípio da incerteza.

Tabela 7: Categorias utilizadas para análise das respostas dos estudantes na questão 1.1

Categorias de análise	QUANTIDADE
O princípio da incerteza estabelece ser impossível determinar com exatidão e simultaneamente os valores da posição e do momento de um sistema subatômico	21
as trajetórias propostas no modelo atômico de Bohr não podiam ser determinadas.	4
com base na interpretação probabilística da função de onda, por meio da expressão: $P = \int_V \Psi^* \Psi dV$	15
Denominamos orbital à região do espaço definida em volta do núcleo onde há probabilidade de encontrar o elétron.	19

Na Tabela 8, estão representados os termos utilizados pelos estudantes para responderem à questão 1.1:

Tabela 8: Termos empregados pelos estudantes na questão 1.1

Termos empregados na questão	QUANTIDADE
Princípio da Incerteza	21
Incerteza	10
$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2}$	3
Indeterminação da trajetória	4
Não há como medir	3
medição	3
Precisão e simultaneamente	5
Posição e momento	17
Trajetoária definida	8
Modelo de Bohr	18
Orbitas definidas	5
Orbita circular	3
Trajetoária determinada	3
Determinar posição	6
Probabilidade	15
Densidade de probabilidade	5
$\int_v \Psi \Psi dv$	11
Interpretação probabilística	16
Trajetoária	5
Função de onda	14
Modelo de orbitais	9
Região do espaço	19
Encontrar o elétron	16
Em torno do núcleo	5

Um exemplo do uso adequado dos termos que estão destacados na tabela 8:

Aluno 3: O movimento do elétron de um átomo de hidrogênio no estado fundamental segundo o modelo atômico de Bohr descreve uma trajetória definida por uma órbita atômica circular, porém este fato não é adequado, pois não há como medir a posição e o momento angular do elétron em um átomo com precisão, pois quando faz a medida da posição do elétron em um átomo com precisão, pois quando faz a medida da posição do elétron altera o momento

angular do elétron, e quando realiza a medida de momento angular do elétron altera a posição. A relação entre a incerteza da posição e do momento angular do elétron em um sistema é dado por: $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2}$. Porém, o movimento do elétron de um átomo de hidrogênio segundo o modelo atômico de orbitais não é descrito por uma trajetória definida, mas em termos de probabilidade de encontrar o elétron em determinada região do espaço. A expressão de probabilidade é dada por: $P = \int_V \Psi^* \Psi dV$.

No teste de sondagem esse estudante apresentou a seguinte resposta sobre interpretação probabilística da função de onda, conceito necessário para resposta da questão em análise.

Aluno 3: (Pré-teste) - A interpretação probabilística permite inferir qual é a probabilidade de encontrar o elétron no átomo.

Ao observamos as duas respostas dadas pelo Aluno 3, nota-se um desenvolvimento na linguagem e o uso de mais termos para explicar o conceito, denotando que o mesmo está pensando por conceitos.

A seguir, análise da resposta do Aluno 2 nos dois momentos: avaliação e teste de sondagem, respectivamente:

Aluno 2: 1.1. No modelo de orbitais é considerado a incerteza na medição da posição e do momento, sendo assim o eletron não possui uma trajetória definida. Para o modelo de orbitais é considerado uma probabilidade de se encontrar o eletron em uma dada região do espaço e essa probabilidade é dado por:

$$P = \int_V \Psi^* \Psi dV$$

O modelo de Bohr não leva em conta o princípio da incerteza, isso porque o mesmo surgiu depois da teoria de Bohr para o átomo de hidrogênio, sendo assim Bohr supôs que ao redor do núcleo existia orbitas definidas, onde se encontrava os elétrons.

Essa resposta mostra um desenvolvimento na resposta do Aluno 2 em relação ao pré-teste, pois ao responder sobre a interpretação probabilística da função de onda, ele utilizou mais termos do que na sua resposta ao pré-teste, conforme expresso abaixo:

Aluno 2- A função de onda não descreve a posição exata onde se encontra o elétron e sim a probabilidade de onde ele possa estar quanto mais próximo for o valor dessa função menor é a probabilidade do elétron se encontrar naquela posição.

Um outro exemplo do uso adequado dos termos que estão destacados na tabela 8:

Aluno 23: De acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg, para sistemas microscópicos, não há possibilidade de definir uma trajetória de acordo com as expressões da mecânica clássica, ou seja, não há como medir a posição de um determinado sistema sem uma incerteza associada ao processo de medição. Com base nesse princípio já se invalida a existência de órbitas definidas circulares descrevendo o movimento do elétron, uma vez que a trajetória não é conhecida. Baseado nessa indeterminação, lança-se mão da interpretação probabilística da função de onda, que é uma função que representa o estado elétron. Segundo Max Born, a densidade de probabilidade de se encontrar o elétron em determinado elemento de volume é dada por $\frac{dP}{dV} = \Psi^ \Psi$. Desta maneira, como não há como descrever uma trajetória definida, assume-se uma região do espaço onde poderá ser encontrado o elétron. Tal região será descrita pela $\Psi^* \Psi$, que em coordenadas esféricas polares resultam nos gráficos dos orbitais. Portanto, como o modelo de orbitais está baseado no princípio da incerteza e na interpretação probabilística da função de onda, o movimento do elétron será descrito por uma região provável e não como uma órbita definida, como é proposto pelo modelo de Bohr.*

O Aluno 23, já demonstrava em sua resposta no pré-teste que possuía em sua memória o conceito da interpretação probabilística, como podemos observar a seguir:

Aluno 23: A interpretação probabilística de uma função de onda refere-se à densidade de probabilidade que um elétron pode ser descrito. Ou seja, na região descrita pela função de onda, há uma probabilidade maior de se encontrar um elétron. Em dados estatísticos, pode ser considerado como o espaço amostral.

Um exemplo de resposta inadequada dada por um estudante:

Aluno 8: A incerteza que está associada às medidas é desconsiderada pelo modelo atômico de Bohr, logo esse modelo infere com certeza a trajetória bem definida do elétron e não se trata de probabilidade. É exatamente o inverso do que acontece no modelo de orbitais, no qual as incertezas são consideradas e apenas pode-se falar sobre probabilidades (estimativas) das trajetórias.

Aluno 8 (Pré-teste): Eu sei que tem a ver com os orbitais e a probabilidade maior dos elétrons estarem naquela região.

Ao olharmos a resposta do estudante na sondagem e ao compararmos com a resposta dada na avaliação, nota-se um desenvolvimento e aquisição de novos termos antes ausentes na escrita, porém o seu texto demonstra que o Aluno 8 não tomou consciência desse conceito. Pode se dizer que o estudante está passando do pensamento sincrético para o pensamento por complexos, pois ao tentar resolver o problema posto, não deixou claras as relações entre os termos, mas nota-se na resposta dada na avaliação que o Aluno 8 desenvolveu a abstração e a generalidade porém, ainda não se encontra no nível de abstração e generalidade do conceito.

4.4.1. Análise da 2ª questão da avaliação

A segunda questão da avaliação foi respondida por trinta e quatro alunos matriculados na disciplina, apenas um não respondeu. A questão exigia dos estudantes o conhecimento do Teorema Fundamental do Cálculo que estabelece que se $f(x)$ for contínua em $[a, b]$, então: $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$ onde, $F(x)$ é uma antiderivada de $f(x)$. De forma mais geral, este teorema afirma que se $f(x)$ é uma função contínua em um intervalo I então, para qualquer $a \in I$, temos que: $F(x) = \int_a^x f(t)dt$ é uma antiderivada de $f(x)$ definida para todo $x \in I$. Ou seja:

$$\frac{d}{dx} \left[\int_a^x f(t)dt \right] = f(x)$$

Seja $f(x)$ é uma função não-negativa definida em um intervalo I e $a \in I$. Para cada ponto $x > a$, a área A sob o gráfico de $f(x)$ restrita ao intervalo $[a, x]$ é função de x , i.e. $A = A(x)$. Nesse caso, como consequência do Teorema Fundamental do Cálculo temos que a derivada da área A é igual a função $f(x)$, i.e. $A'(x) = f(x)$. Com base nesse conceito e na interpretação probabilística da função de onda os estudantes deveriam responder a seguinte questão:

2. Com base no valor da probabilidade de se encontrar o elétron no orbital 1s de um átomo de hidrogênio a uma distância do núcleo menor ou igual a a_0 , para qualquer ângulo, explique se é adequado, ou não, considerar o raio atômico do hidrogênio como a_0 .

Como possível resposta temos:

Para calcular a probabilidade de se encontrar o elétron no orbital 1s de um átomo de hidrogênio é preciso calcular a integral

$$P = \int_V \Psi_{1,0,0} \Psi_{1,0,0} dV$$

$$\text{Como } \Psi_{1,0,0} \text{ é real, } \Psi = \Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\pi^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}.$$

Como o cálculo da probabilidade é para qualquer ângulo e uma distância do núcleo menor ou igual a a_0 , os limites de integração são:

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad \text{e} \quad 0 \leq r \leq a_0.$$

O elemento de volume (dV) em coordenadas esféricas é $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$.

Então, temos:

$$P = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{a_0} e^{-2r/a_0} r^2 dr$$

ou

$$P = \frac{1}{\pi a_0^3} \{ (\cos\pi + \cos 0)(2\pi - 0) \left[\left(\frac{a_0^2 a_0}{2} - 2 \frac{a_0 a_0^2}{4} + 2 \frac{a_0^3}{8} \right) e^{-\frac{2a_0}{a_0}} + 2 \frac{a_0^3}{8} \right] \}$$

Dividindo o termo entre chaves por πa_0^3 , obtemos:

$$P = 4 \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \right) e^{-2} + \frac{1}{4} \right] = 1 - 5e^{-2}$$

ou

$$P = 1 - 5 \cdot 0,135 = 0,325$$

O raio atômico é a distância do núcleo que representa o tamanho do átomo, logo, deve corresponder a um alto valor de probabilidade de encontrar o elétron em volta do núcleo, digamos, maior que 95%. Porém, a probabilidade de encontrar o elétron entre 0 e a_0 é de, apenas, 32,5%. Portanto, a_0 é pequeno para representar o raio atômico

Tabela 9: Categorias de análise utilizadas para análise da questão 2

Categorias de análise	QUANTIDADE
$P = \int_V \Psi_{1,0,0} \Psi_{1,0,0} dV$	20
$\Psi = \Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\pi^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	19
$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad \text{e} \quad 0 \leq r \leq a_0.$	16
$P = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\pi \text{sen}\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{a_0} e^{-2r/a_0} r^2 dr$	3
$P = 1 \quad 5,0,135 = 0,325$	2

Nas Tabela 10 e 11 estão apresentados os termos e os limites de integração mais utilizados pelos estudantes em suas respostas.

Tabela 10: Termos utilizados para calcular a probabilidade

Funções utilizadas	Quantidade
$\Psi = R \cdot \theta \cdot \phi$	7
$P = \int_V \Psi \Psi dV$	20
$R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	2
$\Psi = \Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\pi^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	19
$\Psi_{1,0,0} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \sqrt{\left(\frac{1}{4\pi}\right)}$	2
$dV = r^2 dr \text{sen}\theta d\theta d\phi.$	11
$r^2 dr$	1

Tabela 11: Limites de integração utilizados para calcular a probabilidade

Limites de integração	qtde
$0 \leq r \leq a_0$.	16
$0 \leq \theta \leq \pi$	14
$0 \leq \phi \leq 2\pi$	12
$0 \leq r \leq \infty$	9

Ao observarmos as Tabelas 10 e 11, podemos constatar que a percepção dos estudantes não foi suficiente para reanimar uma experiência anterior, ou seja, os estudantes não conseguiram ativar na memória a lembrança de como resolver a questão.

Exemplos de estudantes que utilizaram os termos adequadamente:

Aluno 3: A função de onda é dada por: $\psi_{1,0,0} = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{0,0}(\theta) \cdot \Phi_0(\phi)$, onde $R_{n,l}(r)$ é a parte radial e $\Theta_{l,m}(\theta)$, $\Phi_0(\phi)$ é a parte angular. A função de onda para o átomo de hidrogênio no estado fundamental é dada por:

$\psi_{1,0,0} = R_{1,0}(r) \cdot \Theta_{0,0}(\theta) \cdot \Phi_0(\phi)$, que podemos representar com ψ_{1s}

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

Aluno 21: Segundo Born, a probabilidade pode ser calculada como: $\psi^* \psi = P$

Essa probabilidade depende do elemento dr e é definido como:

$$P = \int_V \Psi^* \Psi dV$$

Logo

$$\psi^* \psi = \left(\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}\right)^2 = \frac{1}{\pi^3} e^{-2r/a_0}$$

Substituindo o valor de $\Psi^* \Psi$ na integral e fazendo o limite de integração de 0 a a_0 (porque a região de nosso interesse é a que está entre 0 e a_0)

Aluno 14: A função de onda atribuída ao átomo hidrogenóide é expressa por $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot \theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)$, como o elétron encontra-se no orbital 1s, temos que: $n=1$, $l=0$ e $m=0$. Logo: $\psi_{1,0,0} = R_{1,0}(r) \cdot \Theta_{0,0}(\theta) \cdot \Phi_0(\phi)$.

O valor da probabilidade pode ser interpretado a partir da densidade de probabilidade, dada por: $P = \int_V \Psi^* \Psi dV$

Fazendo as referidas substituições e sendo $dv = r^2 \cdot dr \cdot \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\phi$, temos:

$$P = \int_0^{+\infty} R^2(r) \cdot \theta^2(\theta) \cdot \Phi^2(\phi) r^2 \cdot dr \cdot \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\phi$$

Sabe-se que o valor de θ varia de 0 a π , ϕ varia de 0 a 2π e as funções são independentes entre si, temos:

$$P = \int_0^{\pi} R^2(r) r^2 dr \int_0^{2\pi} \Phi^2(\phi) d\phi \int_0^{\pi} \theta^2(\theta) \sin\theta d\theta.$$

A maneira de fazer essa questão está em um exemplo no Ball (2005, p.282-283) um dos livros utilizados como referência na disciplina Química Quântica I e nota-se a partir das tabelas 10 e 11 que os estudantes tiveram dificuldades em determinar os limites de integração. Esse fato acarreta em um valor de probabilidade encontrado não condizente com a região mais provável de encontrar o elétron. Na Tabela 12, estão apresentadas as expressões encontradas com os limites de integração utilizados pelos estudantes.

Na Tabela 12, é possível notar um decréscimo no número de termos utilizados pelos estudantes o que sinaliza uma baixa memorização dos passos de resolução e demonstra que os estudantes não tomaram consciência desse conceito.

Tabela 12: Expressões encontradas após a substituição pelo elemento de volume

Expressões utilizadas	quantidade
$P = \int_0^{\infty} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 dr$	4
$P = \int_0^5 \int_0^{\pi} \left(\frac{1}{\pi^2 a_0^2} \right)^2 \sin\theta d\theta e^{-2r/a_0} r^2 dr$	2
$P = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{a_0} e^{-2r/a_0} r^2 dr$	3
$P = \int_0^5 \int_0^{\pi} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} dv$	4
$P = \int_0^{\pi} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 dr$	1
$P = \int_0^{\pi} \left(\frac{1}{\pi^2 a_0^2} \right)^2 \sin\theta d\theta e^{-2r/a_0} r^2 dr$	1

Abaixo, estão alguns exemplos de respostas do Aluno 3, Aluno 21 e Aluno 14, eles encontraram as seguintes expressões após as substituições:

Aluno 3: $P = \int_V \Psi_{1s} \Psi_{1s} dV$ sendo a função de onda normalizada e considerando apenas a parte radial da função de onda, temos:

$$P = \int_0^{\infty} \left[2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-r/a_0} \right]^2 r^2 dr$$

$$P = \int_0^{0,5} \frac{4}{a_0^3} \cdot e^{-2r/a_0} r^2 dr$$

Retirando a constante da integral, temos:

$$P = \frac{4}{a_0^3} \int_0^{0,5} e^{-2r/a_0} r^2 dr$$

$$P = \frac{4}{a_0^3} \left[e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(\frac{r^2}{(-2)} \right) - \left(\frac{2r}{(-2)^2} \right) + e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(\frac{2}{(-2)^3} \right) \right]_0^{0,5} \dots P=32,24\%$$

O Aluno 21, encontrou as seguintes expressões:

$$P = \int_0^{a_0} \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a_0} dr$$

$$P = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{a_0} e^{-2r/a_0}$$

$$P = P = \frac{1}{2\pi a_0^2} e^{-2}$$

Aluno 14: Para a função normalizada, temos que

$$\int_0^{2\pi} \Phi^2(\phi) d\phi = \int_0^\infty \theta^2(\theta) \operatorname{sen}\theta d\theta = 1$$

Logo,

$$P = \int_0^\pi R^2(r) r^2 dr$$

Dado que $\psi_{1,0,0} = \frac{1}{r^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$ temos:

$$P = \int_0^{a_0} \left(\frac{1}{r^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \right)^2 r^2 dr$$

Como a distância ao núcleo é menor ou igual a a_0 , temos:

$$P = \int_0^{a_0} \frac{1}{r^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} r^2 dr = \int_0^{a_0} \frac{1}{a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 dr = \frac{1}{a_0^3} \int_0^{a_0} e^{-2r/a_0} r dr$$

$$= \frac{1}{a_0^3} \left[e^{-\frac{2r}{a_0}} \frac{1}{\left(\frac{-2}{a_0}\right)^2} \left(\frac{-2r-1}{a_0}\right) \right]_0^{a_0}$$

Os resultados obtidos pelos estudantes foi consequência das escolhas e das substituições inadequadas. Estes resultados foram quantificados e apresentados na Tabela 13, a seguir:

Tabela 13: Valores de probabilidades encontradas pelos estudantes

Valores de probabilidades encontrados	quantidade
$P=510699182(11,18.10^{-29})$	1
$P=3,8$	2
$P = \frac{1}{\pi^4 a_0^{9/4}} e^{-r^2/ea_0^2} 4\pi a_0^3 \frac{1}{3}$	2
$P = \frac{1}{0,5 \cdot 2\pi} 2\pi \cdot 2$	1
$P=1$	1
$P=0,2$ a $0,28\%$	1
$P=25\%$ a $32,24\%$	2
$P=0,005$	1
$P=1,46.10^{-3}$	2
$P = \frac{1}{2\pi a_0^2} e^{-2}$	1
$P=79,5$	1
$P=52,77\%$	1

Como é possível observar na Tabela 13, apenas um estudante conseguiu determinar a probabilidade 32,25% e foi apresentada pelo Aluno 3, que afirma o seguinte:

Aluno 3: Não é adequado considerar o raio atômico do hidrogênio como $a_0 = 53 \text{ pm}$ ou $0,53 \text{ \AA}$, pois o valor de probabilidade encontrado foi 32,24% que está muito distante de 100%, ou seja, é um valor muito pequeno. Logo, podemos concluir que a probabilidade de encontrar o elétron no orbital 1s de um átomo de hidrogênio a uma distância do núcleo menor ou igual a 53 pm ou 0,53 *foi* 32,24% que é um valor muito pequeno, logo não é adequado considerar o raio atômico do hidrogênio como 53 pm ou 0,53 \AA .

Os outros dois estudantes apresentados a seguir, não utilizaram os termos conforme a teoria:

Aluno 21: É adequado, pois o valor da probabilidade será menor do que um, o que indica que há uma coerência.

Aluno 14: $P \approx 0,28\%$

Para $\psi_{1,0,0} = \frac{1}{r^{1/2} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$, não é admitido considerar o raio atômico do hidrogênio a_0 , pois a probabilidade foi muito baixa ($P = 0,28\%$)

Podemos concluir que nessa questão os estudantes em sua maioria ainda estão entre o nível do pensamento sincrético e o pensamento por complexo, pois existe uma falta de clareza no uso dos termos e na linguagem utilizada. Além disso, nota-se que eles, mesmo possuidores das ferramentas necessárias para a solução do problema, não sabem utilizá-las de modo adequado.

4.4.2. Análise da questão 3

A última questão da avaliação de aprendizagem foi respondida por trinta e cinco alunos matriculados na disciplina. E pedia o seguinte:

3. Explique como os seguintes conceitos se relacionam e contribuem para explicar o modelo atômico de orbitais: quantum de energia; dualidade onda-partícula; relações de incerteza entre momento e posição; função de onda e sua interpretação probabilística.

Considerando o discutido no Referencial Teórico e o explicitado pelo professor nas suas aulas, temos como possível resposta:

Considerando o átomo um sistema quântico, pois seus elétrons apresentam algumas propriedades ditas quantizadas. Os elétrons num átomo se encontram distribuídos em vários níveis de energia, cuja diferença entre dois valores é um quantum de energia.

O átomo, assim como outros sistemas quânticos, exibe comportamento dual, ou seja: alguns fenômenos exigem que seu comportamento seja considerado como corpuscular; outros, exigem comportamento ondulatório.

No modelo atômico de orbitais os elétrons encontram-se em movimento em volta do núcleo em trajetórias indeterminadas. A determinação da trajetória de um elétron exige o conhecimento exato do valor da sua posição e do seu momento (ou velocidade) em um dado instante. Porém, as relações de incerteza da posição e do momento ($\Delta q_i \cdot \Delta p_i \cong h$) informam ser impossível medir ambas grandezas com exatidão e simultaneamente. Diz-se, então, que os elétrons do átomo se movem em uma região em volta do núcleo.

O comportamento ondulatório do átomo e do elétron levou Schrödinger a propor uma equação de onda para calcular sua energia. A solução da Equação de onda é chamada de função de onda. As funções de onda, expressas em coordenadas esféricas, são fatoráveis em parte radial, $R(r)$, e parte angular, $Y(\theta, \phi)$.

Considera-se que o produto da função de onda por seu conjugado, $\Psi^*\Psi$, dá a densidade de probabilidade, dP , de encontrar o elétron em um elemento de volume, dV , situado no espaço, tal que, $\Psi^*\Psi = dP/dV$. Com base nesta interpretação, costuma-se considerar os gráficos dos produtos das partes angulares das funções de onda para o átomo de hidrogênio pelos seus conjugados, Y^*Y , em coordenadas esféricas, como as regiões nas quais os elétrons têm maior probabilidade de serem encontrados em volta dos núcleos dos átomos. Tais regiões são denominadas orbitais.

Os termos mais utilizados pelos estudantes na questão 3 da avaliação, foram tabelados (Tabela 14):

Tabela 14 – Classificação das respostas dos estudantes quanto ao tipo de conceito

CATEGORIAS	QUANTIDADE
Os elétrons num átomo se encontram distribuídos em vários níveis de energia, cuja diferença entre dois valores é um quantum de energia.	26
O comportamento dual, ou seja, comportamento seja considerado como corpuscular; outros, exigem comportamento ondulatório.	27
O Princípio da Incerteza como: Grandezas do movimento; Ente em movimento; Simultaneidade da medida; Interferência da medida; Relação entre precisão das grandezas	29
Os conceitos de orbital como: Função de onda para um elétron; Região do espaço onde a probabilidade de encontrar o elétron é maior.	26
Born associou a probabilidade ao quadrado do módulo da função de onda, $\psi^*\psi$, interpretando-o como a densidade de probabilidade de se encontrar o sistema em dada região do espaço.	20
Incompleto	12

A categoria na qual os estudantes apresentaram mais termos foi a relacionada ao Princípio da Incerteza e a categoria na qual eles apresentaram maior dificuldade foi em utilizar a Interpretação Probabilística da função de onda. Para uma melhor análise, as respostas dos estudantes foram divididas em 5 partes relacionadas a cada categoria expressa na Tabela 14. Neste trabalho será analisada apenas a categoria relacionada ao conceito de orbital e interpretação probabilística da função de onda.

Na tabela 15 estão listados o termos utilizados pelos estudantes na questão 3:

Tabela 15: Termos utilizados pelos estudantes na questão 3 com referência ao conceito de orbital e interpretação probabilística

Termos utilizados	Quantidade
Função de onda	26
Probabilidade	26
Região no espaço	24
Orbitais	26
Encontrar um elétron	24
Estado do elétron/sistema	8
Interpretação probabilística	24

Com relação ao conceito de orbital como função de onda ou a região do espaço onde a probabilidade de encontrar o elétron é maior, temos as respostas do aluno 8 na questão 3 e no pré-teste respectivamente:

Aluno 8: [...] Heisenberg determinou que não se pode fazer a medição do trajetória e velocidade de uma partícula, simultaneamente, sem associar uma incerteza a uma delas. Conhecendo todas essas descobertas, Schrödinger obteve uma equação diferenciável, com base no comportamento dual da matéria, que nela possuíam funções de onda que ao serem resolvidas, apareciam números quânticos que caracterizavam os estados do sistema. A partir de todas essas teorias, surge a teoria dos orbitais, que, segundo a qual, a energia do elétron varia de maneira quantizada, em múltiplos inteiros do número quântico n , o número quântico principal, utilizando o conceito de energia quantizada. Também segundo a teoria dos o conceito de energia quantizada. Também segundo a teoria dos orbitais, levando em consideração a interpretação probabilística, definiu-se orbitais como a região no espaço onde encontrar um elétron possui uma alta probabilidade, utilizando o princípio da incerteza de Heisenberg. Como se pode perceber, a teoria dos orbitais possui grandes contribuições de várias teorias até então já postulados, sendo a mesma a teoria mais utilizada para se explicar os fenômenos atualmente.

A resposta dada pelo Aluno 8 no teste de sondagem:

Aluno 8: Eu sei que tem a ver com os orbitais e a probabilidade maior dos elétrons estarem naquela região. Orbital é a região de maior probabilidade de se encontrar o elétron.

Podemos inferir após comparar as respostas dadas pelo estudante nos dois momentos (teste de sondagem e a avaliação) que, após as aulas e depois de receber o auxílio do professor e dos colegas, conseguiu resolver os problemas propostos de forma mais elaborada e com uso de mais termos.

Diante das respostas obtidas pode se concluir que a metodologia utilizada pelo professor foi adequada, pois proporcionou uma melhora na maneira dos estudantes se expressarem e colocarem no papel o que estava no campo dos pensamentos. Além disso, fica claro a importância do professor nesse desenvolvimento obtido pelos estudantes.

É importante destacar também que nessa resposta a maioria dos estudantes conseguiu atingir o nível do pensamento por conceitos, fato que pode ser observado pela quantidade de termos e pela linguagem utilizada por eles.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O desenvolvimento do presente estudo possibilitou uma análise das concepções prévias dos estudantes da disciplina de química quântica da UFBA, do semestre de 2016.1. Além disso, esta pesquisa possibilitou a obtenção de dados mais consistentes sobre o processo de formação de conceito de orbital, parte na qual me debrucei.

De um modo geral, a turma em estudo, em sua grande maioria, era de bacharelandos que estavam semestralizados. No entanto, a turma tinha um grupo de sete alunos que eram formandos e dois eram repetentes. A turma iniciou com trinta e sete estudantes e chegou ao final do semestre com trinta. Os estudantes eram bastante participativos, principalmente nas aulas de resolução de exercícios e a convivência com o professor era harmoniosa. Ao final do semestre um grupo de dez alunos solicitou ao professor a reativação da disciplina Química Quântica II (que não era ensinada há mais de 10 anos por falta de interessados) e uma parte destes entrou no grupo de pesquisa de Química Teórica, que faz uso dos conceitos aprendidos na disciplina.

Um dos temas abordados nesse trabalho versa sobre o ensino de química para o ensino médio e o ensino superior. Inicialmente, defendemos que o estudante do ensino médio deve entrar em contato com os principais modelos do átomo: modelo de Dalton, Thomson, Rutherford e Bohr, com um destaque maior ao modelo atômico de orbitais. E que o ensino do conceito de orbital deve ter uma ênfase probabilística da mecânica quântica. Também deve ser mostrado aos estudantes os resultados obtidos com uso da mecânica quântica na solução de problemas de química, em oposição ao modelo de Bohr. Além disso, ao não ensinar esse conceito para os estudantes estaremos deixando-os de fora da discussão a respeito dos modelos atômicos modernos e dos avanços proporcionados por estes modelos.

Por fim, uma maneira interessante de abordagem do modelo de orbitais seria dividir em dois momentos (1º ano e 3º ano), sendo uma abordagem mais superficial no 1º ano e uma mais aprofundada no 3º ano. Porém, se o professor decidir por fazer essa discussão apenas no 3º ano não é problemático, pois permitiria o uso desse conceito em algumas situações de reatividade de orgânicos. No 3º ano também é

possível fazer algumas discussões filosóficas pertinentes a esse conceito como o realismo científico, por exemplo.

O ensino do conceito de orbital no ensino superior deve ser posterior aos conceitos básicos da química (substância, reações químicas, ligações químicas entre outros) e os estudantes devem conhecer mais sobre a ciência química, sua linguagem e sua utilidade para o desenvolvimento da sociedade. No início do curso de química devem ser reforçados os conceitos aprendidos no ensino médio de forma mais aprofundada, com uma perspectiva histórica e epistemológica dos conceitos da química. A discussão sobre a química ser redutível a física quântica deve ser evitada, pois, a química já é uma ciência estabelecida e que gera muitos produtos. Outro ponto salutar é que os professores da graduação em química devem se preocupar com o ensino da química em todos os seus aspectos, tanto os qualitativos quanto os quantitativos e os epistemológicos também, pois a formação do químico deve ser abrangente.

O ensino do conceito de orbital como região do espaço apresenta alguns aspectos problemáticos. Entre eles está a possibilidade de se imaginar erroneamente que o movimento eletrônico esteja restrito ao espaço limitado pelo gráfico do esférico harmônico. Outro aspecto é que não há razão para crer que o espaço onde se move o elétron seja restrito, pois dessa forma significaria que a natureza só poderia ser compreendida de um modo específico. Ademais os gráficos de Y^*Y não podem ser considerados fotografias de posições dos elétrons, pois as relações de incerteza entre posição e momento mostram a impossibilidade de se obter tais imagens. Um outro equívoco é se pensar que o elétron permanece mais tempo na região do gráfico, porque a probabilidade de encontrá-lo ali seria maior, pois as expressões dos orbitais não dependem do tempo e correspondem a estados estacionários.

Enfim, a interpretação dos orbitais como lugar no espaço tornou-se um instrumento químico importante, tanto na pesquisa quanto no ensino. Mas, a interpretação do formalismo do modelo atômico de orbitais pelos químicos não autoriza inferir que orbitais são locais concretos, definidos no espaço nos quais os elétrons se encontram.

O teste de sondagem com perguntas abertas conseguiu mostrar uma visão geral de como o conceito de orbital estava na memória dos estudantes. Pois, se o sistema de conceitos relacionado ao orbital estivesse bem internalizado os estudantes conseguiriam aplicar em uma situação prática. Porém, ficou evidenciado que os

estudantes não tinham clareza a respeito dos dois conceitos referentes ao termo orbital. O conceito de orbital como "região do espaço onde é maior a probabilidade de encontrar o elétron" e suas variações foi o conceito mais lembrado pelos estudantes. Um fato que corrobora a ideia de falta de clareza do conceito, é o surgimento de conceitos híbridos e que utilizavam os termos de forma inadequada. Esse fato está em consonância com o que dizem alguns autores a respeito do ensino do conceito de orbital nas disciplinas de química geral ou química introdutória.

A questão sobre a interpretação probabilística da função de onda feita na sondagem foi respondida de forma satisfatória pelos estudantes, pois eles utilizaram os termos necessários para as repostas, porém apenas um estudante utilizou os termos de forma adequada dentro de um sistema de conceitos.

Os estudantes que utilizaram os termos e uma linguagem adequada podem ser considerados como pensando por conceitos, pois o estudante conseguiu utilizar os termos de forma sistemática e consciente. No teste de sondagem notou-se que a maioria dos estudantes se apresentava dentro do pensamento por complexos, pois utilizaram os termos com algum critério e já tinham desenvolvido a abstração e generalidade, também é possível identificar alguns estudantes que ainda estavam dentro do pensamento sincrético do conceito de orbital atômico.

Ao observarmos as respostas dadas na avaliação é possível identificar que o caso mais crítico foi a questão 2 da prova, pois a maioria dos estudantes apresentaram os termos de forma não sistemática, o que caracteriza um pensamento por complexos. Isso ocorreu mesmo com os exercícios feitos em sala de aula com uma questão semelhante à da prova. Nas outras duas questões analisadas neste trabalho tivemos uma passagem do nível do pensamento por complexos para o pensamento por conceitos na maioria das repostas dos estudantes.

Dada a importância do conceito de orbital, torna-se necessária uma reflexão a respeito da forma e do momento em que deve ser ensinado esse conceito, para que os estudantes tenham um maior contato com o conceito, de modo que o mesmo se torne lógico e possibilite um uso adequado por parte do estudante e do futuro pesquisador. Uma discussão levantada nesse trabalho leva em conta o momento que esse conceito deve ser ensinado e como o ensino de química deveria ser tratado no ensino superior, ficando como uma sugestão para os cursos de química.

Através das respostas dos estudantes no teste de sondagem, e na avaliação foi possível perceber um desenvolvimento conceitual dos estudantes em relação ao

conceito de orbital e aos outros conceitos pertinentes ao entendimento desse conceito. Da análise do vídeo foi possível retirar como informação mais importante a maneira que o professor atuava na zona de desenvolvimento iminente dos estudantes e também a grande importância das interações sociais na sala de aula para o desenvolvimento das funções superiores de cada estudante.

Sobre o emprego do conceito de orbital na solução dos problemas por parte dos estudantes podemos concluir que eles não sabiam diferenciar os dois conceitos e com o passar do tempo eles passaram entender melhor o conceito. Isso pode ser confirmado pela quantidade de termos utilizados na questão 3 analisada neste trabalho, denotando um maior domínio do conceito, ou seja, uma tomada de consciência do conceito de orbital por parte dos estudantes.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANTUNES, M.T. (ed.). Ser protagonista: química. 2. ed. São Paulo: SM, 2013. V.1.
- AUTSCHBACH, J. Orbitals: Some Fiction and Some Facts. **Journal of Chemical Education**. v89, n8. p1032-1040, 2012.
- BALL, D.W. Físico-Química, Volume1, Cengage Learning, 2005.
- BARDIN, Laurence. Análise de conteúdo. 3. ed. Lisboa: Edições 70, 1977.
- BARRADAS-SOLAS, F.; SÁNCHEZ GÓMEZ P.J. Orbitals in chemical education. An analysis through their graphical representations. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 2014, 15, 311
- BELLAS, R.R.D; GONZALEZ, I.M; SILVA, J.L.P.B. Mapas conceituais em perspectiva histórico-cultural. In: Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 10, 2015, Águas de Lindóia. **Anais...** Águas de Lindóia: ABRAPPEC, 2015. On line.
- BERRY, K. O. What should we teach them in high school? **Journal of Chemical Education**. 1986.
- BERRY, R. S. Atomic Orbitals. **Journal of Chemical Education**. v. 43, 6, The University of Chicago- Chicago, Illinois, 1966.
- BENT, H. A. Should orbitals be x-rated in beginning chemistry courses? **Journal of Chemical Education**, v. 61, n. 5, p. 421, 1984.
- BORN, M. The statistical interpretation of quantum mechanics. **Nobel Lecture**, v. 11, p. 1942-1962, 1954.
- _____. **Atomic Physics**. 2. ed. London: Blackie & Son, 1937.
- _____. **Atomic Physics**. 8. ed. London: Blackie & Son, 1969.
- BUNGE, A.V. - Introdução a Química Quântica. Editora Edgard Blucher LTDA, São Paulo. p.41-58, 1977.
- BROWN T. L.; BURDGE J. R.; BURSTEN B.E. **Química a Ciência Central**. 9.ed. Pearson, 2005.
- CARVALHO, M, A. A. S. et al. A formação do conceito de consciência em Vygotsky¹ e suas contribuições à Psicologia. *Arquivos brasileiros de psicologia*, v. 62, n. 3, p. 13-22, 2010.
- CERVELLATI, R.; PERUGINI, D. The understanding of the atomic orbital concept by Italian high school students. **Journal Chemical Educacion**, v. 58, n. 7, p. 568, 1981.
- COELHO, E.P. Estruturalismo: Antologia de Textos Teóricos, Ed. Martins Fontes, 1965.
- COULSON, C. A.; LONGUET-HIGGINS, H. C. The electronic structure of conjugated systems I. General theory. *Proceedings of the Royal Society London A*, v. 191, n. 1024, p. 39-60, 1947.
- DUARTE, A. B.; HADDAD, A. B.; GUITARRARI, R. **Realismo & antirrealismo**. Seropédica: Editora do PPGFIL -UFRRJ, 2016
- EDMISTON, C. The nature of the chemical bond—Once more (1). **Journal of Chemical Education**, v. 69, n. 7, p. 600, 1992.
- EISBERG, R. e RESNICK, R. **Física quântica. Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. ELSEVIER. EDITORA CAMPOS. 9ª EDIÇÃO. RIO DE JANEIRO, RJ, 1994.
- FERREIRA, M.M.C.; PORTO, E.G. Uma Química Quântica Visual: unindo o útil ao agradável. **Revista Química Nova**, v.16, n.6, p.593, 1993.

FONSECA, M. R. M. Química. São Paulo: Ática, V. 1., 2013.

GERHARDT, T.E.; SILVEIRA D. T. **Métodos de pesquisa**. Universidade Aberta do Brasil – UAB/UFRGS. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2009.

GILLESPIE, Ronald J. What is wrong with the general chemistry course? **Journal Chemical Education**, v. 68, n. 3, p. 192, 1991.

GRAHAM SOLOMONS, T. W.; FRYHLE C.B. **Química Orgânica**, LTC, 10ª edição. v.1,2012.

GRECA, I. M; FREIRE Jr, O. Teaching introductory quantum physics and chemistry: caveats from the history of science and science teaching to the training of modern chemists. *Chemical Educational Research Practice*, v.15, p.286,2014

HARDY-VALÉE, B. *Que é um Conceito?* Editora: Parábola,2013

HAWKES, S. J. What chemistry do our students need to learn? **Journal Chemical Education** v. 66, n. 10, p. 831, 1989.

HERZBERG, G; SPINKS, J. W. T. *Atomic spectra and atomic structure*. Courier Corporation, 1944.

HEWITT, P. G. *Física Conceitual*. Editora Bookman, 2015.

HUMPHREYS, Colin J. Electrons seen in orbit. **Nature**, v. 401, n. 6748, p. 21-22, 1999.

JACOBY, M. Picture-perfect orbitals. *Chemical & engineering news*, v. 77, n. 36, p. 9, 1999.

JAMMER, M. *The Philosophy of Quantum Mechanics: The Interpretations of Quantum Mechanics in Historical Perspective*. New York: Wiley-Interscience, 1974.

LEUTWYLER, K. Observing Orbitals - **Scientific American**.

<http://www.scientificamerican.com/article/observing-orbitals/> acessado em 14/05/2016

LIMA, M.M; SANTOS, E.S; SILVA, J.L.P.B. Modelo Atômico Quântico em Coleções de Química Aprovadas no PNL D 20 parte II: Indeterminação De Trajetórias E Orbitais. In: Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 10, 2015, Águas de Lindóia. **Anais...** Águas de Lindóia: ABRAPEC, 2015. On line.

LIMA, M.M; SILVA, J.L.P.B. Um sistema de conceitos para o ensino de orbital atômico. In Encontro Nacional de Ensino de Química ,18,2016, Florianópolis.

Anais... Florianópolis: SBQ, 2016. On line.

LOPES, C. V. M. Modelos atômicos no início do século XX: da física clássica à introdução da teoria quântica. 2009. Tese (Doutorado em História das Ciências) – Pontifícia Universidade de Católica de São Paulo. São Paulo.

LUCCI, M. A. *La propuesta de Vygotsky: la psicología sociohistórica*. 2011.

LÜDKE, Menga e ANDRÉ, Marli E. D. A. *Pesquisa em educação: abordagens qualitativas*. São Paulo: EPU, 1986

LÚRIA, A.R. **Curso De Psicologia Geral: Introdução Evolucionista à Psicologia**. Tradução de Paulo Bezerra. v.1,2ª Edição. Rio de Janeiro: Civilização Brasileira ,1991.

MCWEENY, Roy. **Coulson's valence**. Oxford University Press, USA, 1979.

MORAES, R. Uma tempestade de luz: A compreensão possibilitada pela análise textual discursiva. *Ciência & Educação*, v. 9, n. 2, p. 191 -211, 2003

MORTIMER, Eduardo Fleury; MACHADO, Andréa Horta. *Química*. 2. ed. São Paulo: Scipione, 2013. V. 1.

MORWICK, James J. Should orbitals be taught in high school? **J. Chem. Educ**, v. 56, n. 4, p. 262, 1979.

- MULLIKEN, Robert S. Electronic Structures of Polyatomic Molecules and Valence. II. General Considerations, **PHYSICAL REVIEW**, v. 41. p. 49-71, 1932.
- _____. **Spectroscopy, molecular orbitals, and chemical bonding. Laboratory of Molecular Structure and Spectra**, University of Chicago, 1967.
- _____. Chemical bonding. **Annual review of physical chemistry**, v. 29, n. 1, p. 1-31, 1978.
- OGILVE, J.F. The nature of the chemical bond—1990: There are no such things as orbitals! **Journal of Chemical Education**, v. 67, n. 4, p. 280, 1990.
- OLIVEIRA, M.K. **Vygotsky: aprendizado e desenvolvimento: um processo sócio-histórico**. São Paulo, Ed. Scipione, 1997
- PAULING, L.; BRIGHT WILSON Jr, E. **Introduction Quantum Mechanics with Applications to Chemistry**. MCGRAW-HILL, New York and London, p.132-150, 1935.
- PAULING, L. The nature of the chemical bond—1992. **Journal of Chemical Education**, v. 69, n. 7, p. 519, 1992.
- PESSOA JR, O. Realismo e Verdade. **Filosofia da Física Clássica**. Curso ministrado pelo Depto. de Filosofia, FFLCH, USP para o 3o ano de Licenciatura de Física, IFUSP, 2014. Cap III. p.16-21.
- PRESTES, Z. Quando não é quase a mesma coisa: traduções de Lev Semionovitch Vygotski no Brasil. Campinas, SP: Autores Associados, 2012.
- RAMOS, L.C; SANTOS, J.C; SILVA, J.L.P.B. Modelo Atômico Quântico em Coleções de Química Aprovadas no PNLD 2015 parte I: quantum de energia, dualidade onda-partícula e números quânticos. In: Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 10, 2015, Águas de Lindóia. **Anais...** Águas de Lindóia: ABRAPPEC, 2015. On line.
- RAMOS, L.C; SILVA, J.L.P.B. Modelo quântico do átomo: uma análise do ensino das noções de *quantum* de uma grandeza e comportamento dual da energia e da matéria. In Encontro Nacional de Ensino de Química, 16, 2012, Salvador. **Anais...** Salvador: SBQ, 2012. On line.
- SILVA, J.L.P.B; CUNHA, M.B.M. Para compreender o modelo atômico quântico atômico. In Encontro Nacional de Ensino de Química, 14, 2008, Curitiba. **Anais...** Curitiba: SBQ, 2008. On line.
- REGO, C.R. (1998). Vygotsky: uma perspectiva histórico-cultural da educação. 5. ed. Petrópolis, Rio de Janeiro: Vozes, 1998.
- ROZENTALSKI, E.F., PORTO, P.A. Uma questão não consensual no ensino de química – o caso dos orbitais. IX Congresso Internacional sobre Investigación en Didáctica de las Ciencias, 2013.
- SANTOS, W.L.P; MÓL, G. de S. (coord.) Química cidadã. 2. ed. São Paulo: AJS, 2013. V. 1, V. 3.
- SCERRI, E. The nature of the chemical bond—Once more (3). **Journal of Chemical Education**, v. 69, n. 7, p. 602, 1992.
- _____. The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues. *Philosophy of Science*, p. S76-S88, 2001.
- _____. Have orbitals really been observed? **Journal of Chemical Education**, v. 77, n. 11, p. 1492, 2000.
- SCHROEDER, E. Conceitos espontâneos e conceitos científicos: o processo da construção conceitual em VYGOTSKY. Atas de pesquisa em educação – PPGE/ME FURB v. 2, nº 2, p. 293-318, maio/ago. 2007
- SILVA, J.L.P.B. Teoria Histórico-Cultural Da Formação De Conceitos, (trabalho digitado), [s.d].

- SIMONS, J. There are no such things as orbitals-Act two! *Journal of Chemical Education*, v. 68, n. 2, p. 131, 1991.
- SOMMERFELD, A. **Atomic structure and spectral lines**. London: Methuen, 1923.
- SLATER J. C. Directed valence in polyatomic molecules. **Physical Review**, v. 37, n. 5, p. 481, 1931.
- TABER, K. S. Learning Quanta: Barriers to Stimulating Transitions in Student Understanding of Orbital Ideas. **Wiley Periodicals**, Inc.Sci Ed.89:94 – 116, 2005.
- TOASSA, G. Conceito de consciência em Vigotski. **Psicologia USP**, v. 17, n. 2, p. 59-83, 2006.
- TRIPP, D. **Pesquisa-ação: uma introdução metodológica**. *Educ. Pesqui.* [online]. 2005, vol.31, n.3, pp.443-466.
- TSAPARLIS, G. Atomic orbitals, molecular orbitals and related concepts: Conceptual difficulties among chemistry students. *Research in Science Education*, v. 27, n. 2, p. 271-287, 1997
- 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*, 31:7, 895-930,2009.
- VAN VLECK, J. H; SHERMAN, A. The Quantum Theory of Valence. *Reviews of modern physics*. vol. 7, 1935. Harvard University, University of Wisconsin
- VIGOTSKI, L. S. **A Construção do Pensamento e da Linguagem**. 2. ed. São Paulo: WMF Martins Fontes, 2001.
- VYGOTSKY, L.S. A formação social da mente: o desenvolvimento dos processos psicológicos superiores. 5.ed. São Paulo (Brasil): Martins Fontes,1991.
- VYGOTSKY, L.S. et alii. *Linguagem, desenvolvimento e aprendizagem*. 11ª edição, São Paulo (Brasil):Ícone,2010.
- WHITE, H. E. Pictorial Representations of the Dirac Electron Cloud for Hydrogen-Like Atoms. **Physical Review**, v. 38, n. 3, p. 513, 1931.
- _____. **Introduction to Atomic Spectra** McGraw-Hill, 1934
- ZANELLA, A.V. Zona de desenvolvimento proximal: análise teórica de um conceito em algumas situações variadas. **Temas em psicologia**, v. 2, n. 2, p. 97-110, 1994.
- ZUO, JM. M O'Keefe, JCH Spence. Direct observation of d-orbital holes and Cu–Cu bonding in Cu₂O. **Nature**, v. 401, n. 6748, p. 49-52, 1999.
- _____. Have orbitals really been observed? **Journal of Chemical Education**, v. 78, n. 7, p. 877, 2001.
- ZURER, P. et al. **Chemistry's top five achievements in 1999?** *Chemical & engineering news*, v. 77, n. 48, p. 38-38, 1999.

ANEXOS

ANEXO A: Objetivos da disciplina Química Quântica QUIA49 - 3ª Unidade

Formalismo da teoria quântica (texto próprio).

Objetivos:

Empregar corretamente a terminologia própria da álgebra linear utilizada na teoria quântica e explicar os significados dos termos: equação diferencial linear homogênea, combinação linear de funções, superposição de estados, independência linear, colapso da função de onda, redução da superposição de estados; vetor, espaço vetorial, álgebra linear; transformação linear, observável, operador, autovalor de operador, autovetor de operador, equação do autovalor ou do autovetor, operador hamiltoniano, comutador de operadores, valor médio de um observável.

Reconhecer uma combinação linear de soluções da equação de Schrödinger como solução da mesma equação.

Explicar uma superposição de estados como um conjunto de vários estados prováveis para o sistema.

Explicar que a medição introduz uma perturbação que reduz a superposição de estados a um único estado.

Explicar o conceito de vetor como elemento de um espaço vetorial.

Explicar um vetor como representante do estado de um sistema.

Explicar o conceito de operador em álgebra linear.

Explicar conceito de autovalor de um operador.

Explicar conceito de autovetor de um operador.

Reconhecer uma equação de autovalor (equação de autovetor).

Reconhecer a equação de Schrödinger como uma equação de autovalor.

Explicar porque para cada observável deve haver uma equação de autovalor.

Explicar a analogia entre equação de autovalor e processo de medição.

Explicar o conceito de observável.

Reconhecer os operadores da posição, do momento, da energia potencial, da energia cinética e da energia total (hamiltoniano).

Explicar o conceito de comutador de operadores.

Explicar a relação entre comutação de operadores e incerteza da medição.

Calcular relações de incerteza a partir do comutador de operadores.

Explicar o conceito de valor médio de um observável.

Calcular o valor médio de um observável.

Equação de Schrödinger: resolução para o átomo de hidrogênio (Peixoto: artigo QN; soluções da equação: texto próprio).

Objetivos:

Reconhecer a complexidade da resolução da ES para o átomo de hidrogênio.

Deduzir as expressões das soluções específicas da ES por substituição dos números quânticos nas expressões gerais.

Calcular a energia de um elétron em dado nível de energia.

Explicar as diferenças e as semelhanças entre os modelos atômicos de Bohr-Sommerfeld e o modelo atômico de orbitais.

Funções de onda para átomos hidrogenóides (equações: texto próprio; livro: Cruz).

Objetivos:

Conceituar orbital como função de onda para um elétron em um átomo.

Construir gráficos da parte radial e da parte angular (esféricos harmônicos) dos orbitais em coordenadas cartesianas e coordenadas polares esféricas.

Explicar as interpretações probabilísticas da parte radial e da parte angular dos orbitais.

Explicar o conceito de orbital como lugar do espaço.

Calcular a probabilidade de encontrar o elétron em um volume definido (volume duma camada esférica de espessura Δr e em uma esfera de raio r).

Calcular o valor mais provável da distância entre elétron e núcleo do átomo em dado nível de energia.

Explicar a grandeza do raio atômico com base na probabilidade de encontrar o elétron a dada distância do núcleo.

Explicar o conceito de hibridização de orbitais.

Construir orbitais híbridos como combinações lineares de outros orbitais (linearmente independentes ou não).

Relacionar orbitais híbridos com geometria molecular.

Explicar as limitações da interpretação realista de orbital como lugar do espaço.

ANEXO B: Modelo da avaliação

QUIA49 - QUÍMICA QUÂNTICA I - 3ª PROVA		2016.1
NOME:		DATA:

1. Descreva o movimento do elétron de um átomo de hidrogênio no estado fundamental segundo o modelo de orbitais e segundo o modelo atômico de Bohr.
 - 1.1. Explique as diferenças entre as duas descrições, com base no princípio da incerteza e na interpretação probabilística da função de onda.
2. Com base no valor da probabilidade de se encontrar o elétron no orbital 1s de um átomo de hidrogênio a uma distância do núcleo menor ou igual a a_0 , para qualquer ângulo, explique se é adequado, ou não, considerar o raio atômico do hidrogênio como a_0 .
3. Explique como os seguintes conceitos se relacionam e contribuem para explicar o modelo atômico de orbitais: quantum de energia; dualidade onda-partícula; relações de incerteza entre momento e posição; função de onda e sua interpretação probabilística.
4. Entregar a questão 5 da lista Exercícios 5.
5. Deduza as expressões dos esféricos harmônicos $2p_0$, $2p_{+1}$ e $2p_{-1}$ a partir da expressão geral para as funções de onda de átomos hidrogenóides e mostre que as combinações lineares $(2p_{+1} + 2p_{-1})$ e $(2p_{+1} - 2p_{-1})$ podem ser designadas por $2p_x$ e $2p_y$, respectivamente.

ANEXO C- Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO

O **Estudo do Ensino da Teoria Quântica para Químicos** (doravante referido como **Estudo**) é um projeto de investigação sobre estratégias de ensino da teoria quântica para químicos e a consequente avaliação na aprendizagem dos estudantes.

O **Estudo** é conduzido por professores e estudantes do Grupo de Pesquisa em Ensino de Ciências e Formação de Professores da UFBA, vinculado ao Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências das UFBA/UEFS.

O/A Sr/a. é convidado/a a participar do **Estudo**, o que envolve:

1 - Permitir aos pesquisadores registrar por escrito, em gravações de áudio e de imagens as aulas e atividades da disciplina QUIA49 - Química Quântica I, bem como facultar o acesso aos seus trabalhos escolares e avaliações de aprendizagem, autorizando-lhes fotocopiá-los para fim de pesquisa.

2 - Fornecer entrevista(s) aos pesquisadores do **Estudo** a respeito do ensino e da aprendizagem da teoria quântica. As entrevistas serão gravadas e transcritas para obtenção de informações necessárias à pesquisa. As gravações e transcrições serão guardadas em segurança até o fim do **Estudo**, quando serão destruídas.

Sua participação é inteiramente voluntária, sem qualquer pagamento. O/A Sr/a. poderá deixar de responder a qualquer pergunta durante a entrevista, bem como deixar de participar da pesquisa a qualquer momento.

Todas as informações obtidas do/a Sr/a. serão confidenciais, às quais só terão acesso os pesquisadores do **Estudo**. Serão usadas apenas para os fins da pesquisa. A publicação dos resultados da pesquisa poderá conter trechos das entrevistas, dos trabalhos escolares e das avaliações, porém, mantendo o sigilo a respeito da real identidade dos entrevistados. Quando necessário, serão empregados nomes fictícios e/ou codificados para identificar os entrevistados.

Caso concorde em participar desta pesquisa, por favor, preencha a tabela das informações abaixo e assine este documento.

Este Termo de Consentimento Livre e Esclarecido é assinado em duas vias, uma para o/a Sr/a e outra para o **Estudo**. Caso deseje maiores esclarecimentos, solicitar ao/à entrevistador/a.

Declaro que compreendi as informações apresentadas neste documento e dou meu consentimento para participação no **Estudo**.

Nome	
Telefone(s)	
E-mail	

Salvador, ___ / ___ / _____.

Assinatura: _____

Pesquisador/a	
Assinatura	