

A compreensão de conceitos de química quântica no ensino superior

Silas Goulart da Cunha^{1*} (PG), Diego de Vargas Dias¹ (FM), Livia Streit¹ (PQ).

*silas.cunha@ufrgs.br**

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Campus do Vale. Av. Bento Gonçalves no 9500, Agronomia, Porto Alegre.

Palavras-Chave: química quântica, estrutura eletrônica.

Área Temática: Ensino, Avaliação e Aprendizagem

Resumo: Neste trabalho, as concepções de estudantes universitários de cursos de química foram investigadas por meio de questionários compostos por questões representacionais e conceituais de química quântica, identificando obstáculos de aprendizagem e monitorando o desenvolvimento do aluno. Os dados foram coletados por meio de dois questionários, um no início e outro no final do semestre. Não foi possível notar uma melhoria. Os estudantes tiveram melhor desempenho com questões representacionais em ambos os questionários. As médias de acertos para os Q1 e Q2 foram 45,0 e 23,3%, respectivamente. Alguns obstáculos apresentados pelos alunos foram: diferenciar conceitos quânticos e clássicos; definição de orbital; dualidade partícula-onda e função de onda; princípio da incerteza de Heisenberg; compreensão do diagrama de energia; e associar um modelo mental do átomo com características macroscópicas. Os resultados sugerem um processo de aprendizagem mecânica de conceitos relacionados à química quântica, opostos à aprendizagem significativa.

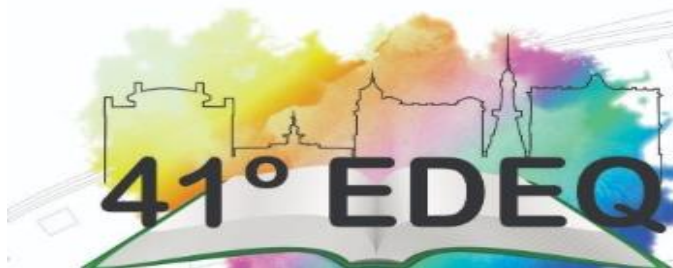
INTRODUÇÃO

A química quântica é apresentada para os estudantes nos momentos iniciais do ensino de química no Ensino Médio através dos modelos atômicos. O tempo limitado dispendido para o ensino desses modelos e a grande abstração de alguns deles, principalmente aqueles envolvendo conceitos quânticos, dificultam a aprendizagem dos estudantes, limitando que os alunos consigam relacionar tais modelos com o mundo macroscópico (MELO; NETO, 2013). Dessa forma, surgem diversos problemas no entendimento de conceitos da química quântica. O desenvolvimento da mecânica quântica ocorreu no início do século XX, com o objetivo de estudar e compreender sistemas na escala atômica (DIRAC, 1958). O uso desses conceitos, aliados com os conceitos de química dão origem à química quântica (DIAS, 1980).

É possível listar diferentes problemas para o ensino-aprendizagem da química quântica. Isso ocorre devido ao grande grau de abstração que os estudantes devem ter para compreender alguns dos conceitos básicos. Como consequência, os estudantes tendem a preferir os modelos mais concretos (HARRISON; TREAGUST, 1996), como os modelos que surgiram antes do

Realização

Apoio



desenvolvimento da mecânica quântica. Alguns conceitos importantes da química quântica são:

Representação do átomo: uma representação mental do átomo considerando conceitos quânticos deve ser trabalhada após o ensino de conceitos de quantização de energia e probabilidade. Os estudantes devem conseguir aliar esses dois conceitos ao imaginar um átomo, como foi descrito por Allred e Bretz (2019a) no estudo da representação mental para o átomo de hélio com estudantes do ensino superior.

Partícula-onda: esse conceito pode ser descrito como uma combinação dos conceitos clássicos de partícula e de onda para uma escala atômica (ATKINS; PAULA, 2010). O efeito fotoelétrico pode evidenciar o comportamento de partícula de uma onda eletromagnética, visto que a onda transfere momento para uma partícula, como uma colisão clássica (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 2011). Por outro lado, o experimento de Davisson-Germer consegue mostrar o comportamento ondulatório de partículas como elétrons, prótons ou nêutrons (ATKINS; PAULA, 2010).

Função de onda: Schrödinger, após ser incentivado a apresentar um seminário sobre a associação entre onda e partícula, desenvolveu uma equação diferencial parcial linear que descreve um sistema quântico, conhecida como equação de Schrödinger (BLOCH, 1976). As soluções obtidas dessa equação são as funções de onda do sistema (MCQUARRIE; SIMON, 1997). Uma função de onda é capaz de descrever partículas sob o olhar da mecânica quântica (LEVINE, 2014), ou seja, descrever a dualidade partícula-onda.

Princípio da incerteza: o princípio da incerteza de Heisenberg descreve a impossibilidade da determinação, simultânea e com precisão, do momento e da posição de uma partícula-onda. A ideia é que em uma medida simultânea, quanto mais precisa for a posição, maior será a incerteza do momento (MCQUARRIE; SIMON, 1997).

Orbital atômico: é possível definir orbital de duas formas diferentes, matemática e físico-química (LIMA; SILVA, 2019):

I) Matemática: orbital atômico é uma função de onda espacial de um elétron em um átomo (LEVINE, 2014), ou seja, é uma função matemática e não pode ser vista ou medida (OGILVIE, 2011);

II) Físico-química: relaciona o orbital atômico como uma região espacial ao redor do núcleo em que existe a probabilidade de se encontrar um ou dois elétrons (LIMA; SILVA, 2019).

Este trabalho tem como objetivo verificar as concepções dos conceitos de química quântica de estudantes universitários de cursos de química.



METODOLOGIA

Com base nas ementas e planos de ensino disponíveis para os cursos de química (Licenciatura em Química, Bacharelado em Química e Bacharelado em Química Industrial) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), selecionou-se quatro diferentes turmas de disciplinas que abordam conceitos da química quântica. São elas:

- Duas turmas de Química Inorgânica I, denominadas nesse trabalho como Química Inorgânica I A (QI1A) e Química Inorgânica I B (QI1B);
- Uma turma de Química Inorgânica III (QI3);
- Uma turma de Química Quântica (QQ).

O trabalho foi dividido em duas partes com aplicação de um questionário em cada parte. Os questionários foram validados pelo Grupo de Pesquisa em Ensino de Química do Instituto de Química da UFRGS. Optou-se pelo uso de questionários com o objetivo de comparar as respostas dos participantes da pesquisa (FLICK, 2013). Cada pergunta foi analisada e classificada como um dado qualificável do tipo nominal (GRAY, 2012). As perguntas estão baseadas em duas habilidades dos estudantes: textual e visual. A integração da compreensão conceitual e visual auxilia os estudantes na aprendizagem de conceitos da química quântica (DANGUR et al., 2014). Dessa forma as perguntas foram divididas em duas categorias:

- Categoria Representação (CR): as questões nessa categoria têm a finalidade de avaliar a compreensão dos estudantes sobre a química quântica através de representações, ilustrações e modelos, comparando a relação do conceito com o que o estudante imagina dele;

- Categoria Quântica (CQ): as questões envolvem os conceitos de química quântica com uma abordagem matemática. Através dessas questões, é possível perceber se os conceitos quânticos estão sendo interpretados como clássicos.

As respostas foram analisadas de acordo com a análise de conteúdo de Bardin (2010).

Questionário 1 (Q1): o primeiro questionário foi aplicado nas quatro turmas no início do semestre letivo de 2019/2, com objetivo de avaliar os conhecimentos prévios dos estudantes. As perguntas desse questionário foram adaptadas de trabalhos anteriores (ALLRED; BRETZ, 2019b; DANGUR et al., 2014; KALKANIS; HADZIDAKI; STAVROU, 2003). Todos os estudantes que responderam o Q1 aceitaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. Para esse questionário, foram 75 participantes.

Questionário 2 (Q2): o segundo questionário foi realizado no final do semestre letivo de 2019/2. Devido às provas finais, a turma QI3 não participou do

Realização

Apoio

Q2. Dessa vez, procurava-se avaliar como os estudantes desenvolveram os conceitos trabalhados desde o início do semestre. Novamente, todos os participantes do Q2 aceitaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. Para esse questionário, foram 46 participantes.

As perguntas de cada questionário abordam os conteúdos conforme o Quadro 1.

Quadro 1: tópicos abordados em cada questionário

Tópico	Questões do Q1	Questões do Q2
Representação do átomo	2a, 2b, 2c, 7a e 7b	1
Orbital	3, 5 e 8c	3a e 3b
Diagrama de energia	6	2
Dualismo partícula-onda	1	4
Princípio da incerteza	4	-
Observáveis macroscópica	-	5

RESULTADOS

As figuras 1, 2, 3 e 4 mostram os resultados para cada tópico em ambos os questionários: partícula-onda, orbital, diagrama de energia e representação do átomo, respectivamente.

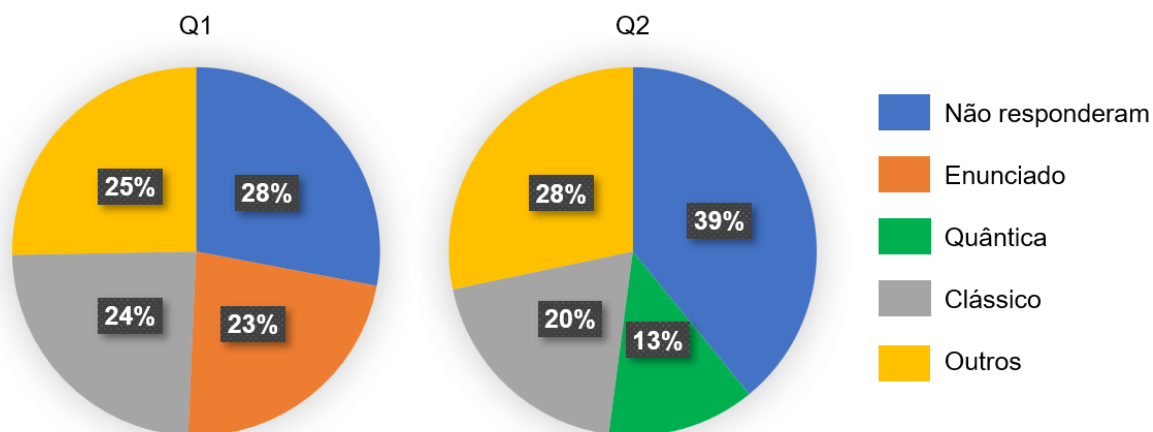


Figura 1: Tópico partícula-onda

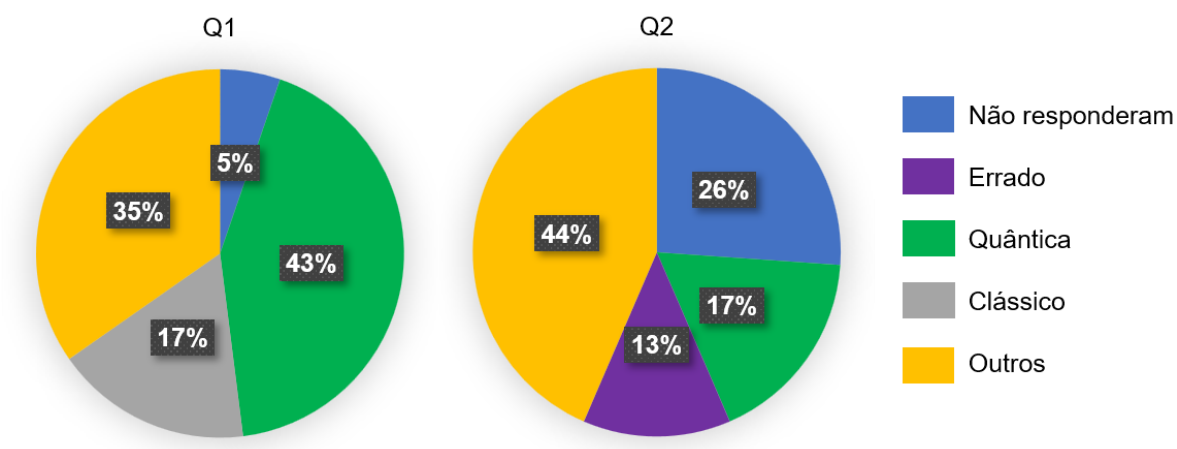


Figura 2: Tópico orbital

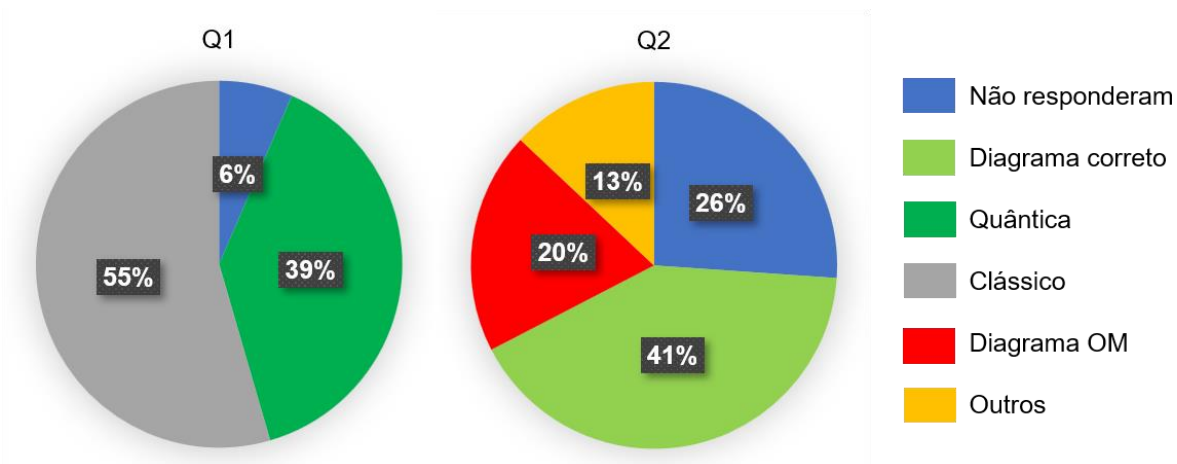


Figura 3: Tópico diagrama de energia

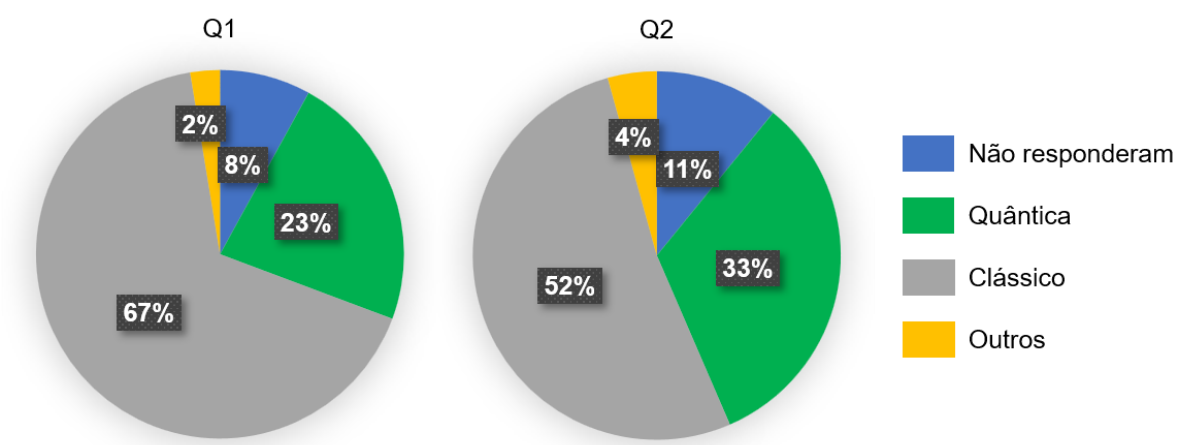


Figura 4: Tópico representação do átomo

Realização

Apoio

Os resultados são apresentados para cada categoria, considerando os dois questionários:

Categoria Quântica (CQ)

Q1: as principais dificuldades apresentadas pelos estudantes foram relacionadas com os conceitos de partícula-onda e princípio da incerteza de Heisenberg. Também foi possível notar grande dificuldade na interpretação do sinal positivo em uma representação de orbitais moleculares. A média de acertos para essa categoria foi 34,0%. Abaixo é apresentado os resultados para cada tópico:

Partícula-onda: a questão é sobre as propriedades de partícula e onda de prótons, elétrons e nêutrons. Considerando todos os estudantes, 24,0% deles responderam considerando essas propriedades como características clássicas, como no exemplo: “*prótons e nêutrons no núcleo do átomo e os elétrons na ‘volta’*”. Resultados semelhantes foram encontrados por Mannila e colaboradores (2002). Outros 22,7% usaram respostas muito simples, basicamente repetindo o enunciado da pergunta.

Orbital: para esse tópico, 42,7% dos participantes mostraram com suas respostas que entendem o orbital como uma região espacial em que existe maior probabilidade de se encontrar elétrons. Entretanto, 62,5% desses estudantes não utilizaram uma linguagem mais adequada como densidade eletrônica ou probabilidade. Em contraponto, considerando todos os estudantes, 17,3% deles descrevem o orbital de forma clássica como um local físico em que o elétron está: “*onde se encontram os elétrons*”. Esses resultados são semelhantes aos relatados por Taber (2002) e Nakiboglu (2003). Além disso, 13,3% dos estudantes compreendem o orbital como o próprio elétron.

Princípio da incerteza de Heisenberg: para o tópico, 34,7% dos estudantes confundem os conceitos orbital e princípio da incerteza: “*onde podemos determinar a localidade dos elétrons*”.

Diagrama de energia: para esse tópico, a pergunta era fechada, isto é, os estudantes deveriam escolher, entre quatro afirmações, a resposta correta. Entre os participantes, 54,5% deles escolheram opções erradas, que estão relacionadas com conceitos clássicos e 39,0% responderam corretamente.

Q2: os estudantes apresentaram grandes dificuldades, assim como no Q1. A média total de acertos para a categoria foi 22,7%, isto é, ocorreu uma piora quando comparado ao Q1. Abaixo é apresentado os resultados para cada tópico:

Partícula-onda: o objetivo foi investigar o que os estudantes compreendem sobre função de onda. Para todos os estudantes, 19,6% deles responderam a

Realização

Apoio



pergunta usando conceitos clássicos. Comparando com o Q1, não foi possível notar melhora na compressão dos estudantes sobre o tópico partícula-onda. Função de onda é algo que os estudantes encontram com muita frequência quando estudam química quântica, logo, a dificuldade apresentada pelos estudantes é preocupante. Os conceitos que são fundamentais e visto constantemente devem ser compreendidos pelos estudantes.

Orbital: os estudantes apresentaram dificuldades em relacionar o módulo da função de onda ao quadrado com a densidade de probabilidade e, conseqüentemente, com orbital. Considerando os participantes, 17,4% deles responderam adequadamente e 13,0% apresentaram resposta sem relação com a pergunta. Novamente, não foi possível perceber melhora nesse tópico quando se comparam os dois questionários, assim como no trabalho de Dick-Perez e colaboradores (2016). Alguns estudantes mostraram grande dificuldades em diferenciar orbitais atômicos e moleculares.

Diagrama de Energia: grande parte dos estudantes conseguiu montar um diagrama de energia para o lítio de forma adequada (19,6%) ou contendo pequenos erros (21,7%). Contudo, 19,6% deles desenharam um diagrama de orbital molecular. Os estudantes não apresentaram melhoras no entendimento do diagrama de energia em relação aos dois questionários.

Categoria Representação (CR)

Q1: os estudantes apresentaram um desempenho melhor com essa categoria. A média de acertos foi 60,3%. Uma maior média para a CR indica que os estudantes compreendem melhor os conceitos de química quântica através de representações, ilustrações e modelos. O principal erro encontrado foi que os estudantes imaginam o átomo de forma clássica (66,7%), principalmente através do modelo de Bohr (28,0%). Os estudantes apresentam dificuldade em superar o modelo de Bohr e é recomendado mostrar as vantagens de conceitos quânticos frente ao modelo de Bohr (GRECA; FREIRE JR., 2014). Respostas considerando conceitos quânticos apareceram em 22,7% dos participantes. Também foi possível notar alguns outros equívocos: a Teoria do Orbital Molecular é aplicada em moléculas e não em átomos individuais; os elétrons não assumem o formato do orbital; e o orbital não é um local físico onde os elétrons estão localizados.

Q2: os participantes mostraram um desempenho pior do que o Q1. A média de acertos foi 25,0%. As dificuldades apresentadas pelos estudantes não foram superadas ao longo do semestre para a forma como eles imaginam o átomo. Conforme as respostas dos estudantes, foi possível perceber uma melhora com uma maior quantidade de estudantes (32,6%) optando por conceitos quânticos ao descrever como imaginam um átomo, contudo o modelo de Bohr (28,3%) continuou sendo o modelo preferido.

Realização

Apoio



CONCLUSÃO

Nesse trabalho, foi investigado a compreensão de estudantes universitários de química sobre conceitos de química quântica. Os resultados mostram que as turmas mais avançadas nos seus cursos (QQ e QI3) apresentaram desempenho melhor. Além disso, as questões representacionais, isto é, da CR foram aquelas que os estudantes apresentaram mais facilidade em responder, quando comparadas com as questões conceituais (CQ). Através da comparação dos dois questionários, não foi possível perceber melhora na compreensão dos conceitos abordados nesse trabalho, inclusive o desempenho geral foi melhor para o Q1. A média de acertos para o Q1 e Q2 foram 45,0 e 23,3%, respectivamente. Esses resultados podem estar parcialmente relacionados à diferença na forma das sentenças apresentadas nos dois questionários, embora sendo os questionários equivalentes em conteúdo. Além disso, esses resultados indicam uma aprendizagem mecânica durando o semestre, opondo-se à aprendizagem significativa (AUSUBEL, 2000).

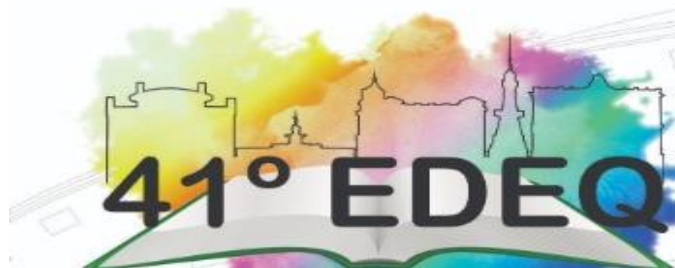
Algumas alternativas para auxiliar no ensino-aprendizagem da química quântica são: não abordar os conceitos através de analogias incompletas ou enganosas (DIDIŞ, 2015); relacionar a química quântica com outras áreas (DESOUZA; IYENGAR, 2013); e preferir o ensino através da integração da teoria, fenômeno e representação (MORTIMER; MACHADO; ROMANELLI, 2000).

REFERÊNCIAS

- ALLRED, Z.; BRETZ, S. University chemistry students' interpretations of multiple representations of the helium atom. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 20, n. 2, p. 358-368, 2019a.
- ALLRED, Z.; BRETZ, S. Development of the quantization and probability representations inventory as a measure of students' understandings of particulate and symbolic representations of electron structure. **Journal of Chemical Education**, v. 96, n. 8, p. 1558-1570, 2019b.
- ATKINS, P.; PAULA, J. **Physical chemistry**. New York: W. H. Freeman and Company, 2010.
- AUSUBEL, D. **The acquisition and retention of knowledge: a cognitive view**. Dordrecht: Springer, 2000.
- BARDIN, L. **Análise de conteúdo**. São Paulo: Edições 70, 2010.
- BLOCH, F. Heisenberg and the early days of quantum mechanics. **Physics Today**, v. 29, n. 12, p. 23-27, 1976.
- DANGUR, V.; AVARGIL, S.; PESKIN, U.; DORI, Y. Learning quantum chemistry via a visualconceptual approach: students' bidirectional textual and visual

Realização

Apoio



understanding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, n. 3, p. 297-310, 2014.

DESOUZA, R.; IYENGAR S. Using Quantum Mechanics To Facilitate the Introduction of a Broad Range of Chemical Concepts to First-Year Undergraduate Students. **Journal of Chemical Education**, v. 90, n. 6, p. 717-725, 2013.

DIAS, J. **Química quântica: fundamentos e métodos**. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1980.

DICK-PEREZ, M.; LUXFORD, C.; WINDUS, T.; HOLME, T. A quantum chemistry concept inventory for physical chemistry classes. **Journal of Chemical Education**, v. 93, n. 4, p. 605-612, 2016.

Didiş, N. The analysis of analogy use in the teaching of introductory quantum theory. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 16, n. 2, p. 355-376, 2015.

DIRAC, P. **The principles of quantum mechanics**. Great Clarendon Street: Oxford University Press, 1958.

FLICK, U. **Introdução à metodologia de pesquisa: um guia para iniciantes**. Porto Alegre: Penso, 2013.

GRAY, D. **Pesquisa no mundo real**. Porto Alegre: Penso, 2012.

GRECA, I.; FREIRE Jr., O. Teaching introductory quantum physics and chemistry: caveats from the history of Science and science teaching to the training of modern chemists. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, n. 3, p. 286-296, 2014.

HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. **Fundamentals of physics**. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc, 2011.

HARRISON, A.; TREAGUST, D. Secondary students' mental models of atoms and molecules: implications for teaching Chemistry. **Science Education**, v. 80, n. 5, p. 509-534, 1996.

JONES, L.; JORDAN, K.; STILLINGS, N. Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 6, n. 3, p. 136-149, 2005.

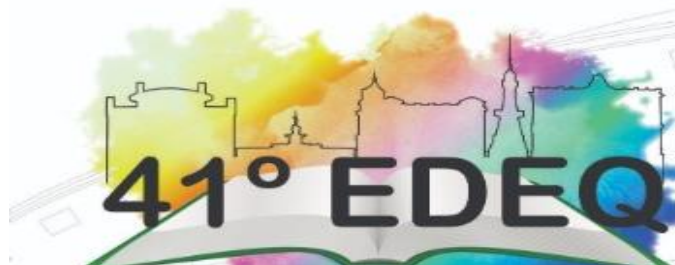
NAKIBOGLU, C. Instructional misconceptions of turkish prospective chemistry teachers about atomic orbitals and hybridization. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 4, n. 2, p. 171-188, 2003.

KALKANIS, G.; HADZIDAKI, P.; STAVROU, D. An instructional model for a radical conceptual change towards quantum mechanics concepts. **Science Education**, v. 87, p. 257-280, 2003.

LEVINE I. **Quantum Chemistry**. Upper Saddle River: Pearson, 2014.

Realização

Apoio



41º Encontro de Debates sobre o Ensino de Química

Celebrar a vida

14 e 15 de outubro de 2022

LIMA, M.; SILVA, J. Orbital atômico: modos de conceituar e ensino. **Scientia Naturalis**, v. 1, n. 3, p. 10-23, 2019.

MANNILA, K.; KOPONEN, I.; NISKANEN, J. Building a picture of students' conceptions of wave- and particle-like properties of quantum entities. **European Journal of Physics**, v. 23, p. 45-53, 2002.

MCQUARRIE, D.; SIMON, J. **Physical chemistry**: a molecular approach. Sausalito: University Science Books, 1997.

MELO, M.; NETO, E. Dificuldades de ensino e aprendizagem dos modelos atômicos em química. **Química Nova na Escola**, n. 35, p. 112-122, 2013.

MORTIMER, E.; MACHADO A; ROMANELLI; L. A Proposta Curricular de Química do Estado de Minas Gerais: Fundamentos e Pressupostos. **Química Nova**, v. 23, n. 2, p. 273-283, 2000.

OGILVIE, J. Is a molecular orbital measurable by means of tomographic imaging? **Foundations of Chemistry**, v. 13, p. 87-91, 2011.

TABER, K. Conceptualizing quanta: illuminating the ground state of student understanding of atomic orbitals. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 3, n. 2, p. 145-158, 2002.

Realização

Apoio



Página
| 10