



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CAMPUS AGRESTE
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE
CURSO DE QUÍMICA-LICENCIATURA

DANIELLE BEATRIZ DE SOUSA

APRENDIZAGEM DOS ORBITAIS MOLECULARES: uma análise a partir da Semiótica
de Peirce

Caruaru
2023

DANIELLE BEATRIZ DE SOUSA

APRENDIZAGEM DOS ORBITAIS MOLECULARES: uma análise a partir da Semiótica
de Peirce

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Coordenação do Curso de
Química-Licenciatura do Campus Agreste da
Universidade Federal de Pernambuco – UFPE,
na modalidade de monografia, como requisito
parcial para a obtenção do grau de licenciado
em Química.

Área de concentração: Ensino de Química

Orientador: Prof. Dr. João Roberto Ratis Tenório da Silva

Coorientadora: Prof^ª. Dr^ª. Roberta Pereira Dias

Caruaru

2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do programa de geração automática do SIB/UFPE

Sousa, Danielle Beatriz de.

Aprendizagem dos orbitais moleculares: uma análise a partir da semiótica de Peirce / Danielle Beatriz de Sousa. - Caruaru, 2023.
57 : il.

Orientador(a): João Roberto Ratis Tenório da Silva

Cooorientador(a): Roberta Pereira Dias

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro Acadêmico do Agreste, Química - Licenciatura, 2023.

Inclui referências, apêndices, anexos.

1. Construção de significados. 2. Semiótica de Peirce. 3. Orbitais moleculares.
I. Silva, João Roberto Ratis Tenório da. (Orientação). II. Dias, Roberta Pereira.
(Cooorientação). III. Título.

370 CDD (22.ed.)

DANIELLE BEATRIZ DE SOUSA

APRENDIZAGEM DOS ORBITAIS MOLECULARES: uma análise a partir da Semiótica
de Peirce

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Coordenação do Curso de
Química-Licenciatura do Campus Agreste da
Universidade Federal de Pernambuco – UFPE,
na modalidade de monografia, como requisito
parcial para a obtenção do grau de licenciado
em Química.

Aprovada em: 11/05/2023

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. João Roberto Ratis Tenório da Silva (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^ª. Dr^ª. Roberta Pereira Dias (Coorientadora)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^ª. M^a. Lucelma Pereira de Carvalho (Examinadora Interna)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Júlio Cosme Santos da Silva (Examinador Externo)
Universidade Federal de Alagoas

Dedico este trabalho àqueles que acreditam em uma educação humana, multidimensional e transformadora.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, devo agradecer aos meus pais, Cleópatra e Edvaldo, por sempre terem investido na minha educação e terem me dado a oportunidade de estar aqui hoje.

Agradeço também aos amigos e colegas que estiveram comigo durante essa caminhada de cinco anos e alguns meses. Emylli, Herick, Jucilayne, Thaís, Vitória e tantos outros: muito obrigada!

Agradeço a todos os professores que participaram da minha formação - enquanto docente e enquanto humana. Destaco Ana Lúcia - que eu conheci lá no início de 2019, em Psicologia da Educação I, e me fez descobrir uma nova paixão: a psicologia; João Tenório, que me fez enxergar o ensino de um modo diferente durante as disciplinas de Metodologia do Ensino de Química e que aceitou embarcar na missão de me auxiliar nesse trabalho e, por fim, minha orientadora de iniciação científica, deste trabalho e de tantos outros projetos, Roberta Dias, que me ajudou muito durante minha graduação e me fez amar a química inorgânica e a química computacional.

No mais, agradeço imensamente a todos que participaram direta ou indiretamente dessa trajetória recheada de experiências dentro e fora da academia.

RESUMO

O presente trabalho teve como objetivo analisar como os estudantes estabilizam significados durante o processo de aprendizagem do conteúdo de orbitais moleculares a partir da semiótica peirceana. Para a coleta de dados, foi aplicado um questionário com dez perguntas referentes às ligações químicas e aos orbitais moleculares. Posteriormente, para a realização da análise, primeiro foram identificados os signos que mediam o processo de aprendizagem dos estudantes dos cursos de Química-Licenciatura e do Bacharelado Interdisciplinar de Ciência e Tecnologia, ambos da Universidade Federal de Pernambuco - Campus do Agreste. Após a identificação dos signos que foram retomados pelos discentes, estes foram classificados mediante as classificações de signos propostas por Charles Sanders Peirce, sendo estas: ícone, índice e símbolo. Assim, a partir dos signos icônicos e simbólicos presentes nos questionários, foi possível concluir que os participantes da pesquisa têm muitos conceitos equivocados previamente estabelecidos sobre a formação de ligações químicas e têm dificuldade de relacionar aspectos teóricos a dados obtidos experimentalmente.

Palavras-chave: semiótica de Peirce; ensino de química; orbitais moleculares; aprendizagem da química; construção de significados; representações químicas.

ABSTRACT

The present work aims to analyze how students establish meaning during the learning process of molecular orbitals content from Peircean semiotics. A questionnaire containing ten questions about chemical bondings and molecular orbitals was used for data collection. After that, to accomplish its analysis, first identified the signs which mediated students' learning process from the Química-Licenciatura and Bacharelado Interdisciplinar de Ciência e Tecnologia courses, both from Universidade Federal de Pernambuco - Campus do Agreste. After identifying the signs that the students retook, they were classified through Charles Sanders Peirce's ratings of signs: icon, index, and symbol. From the icon and symbol signs on the questionnaires, it was possible to conclude that the survey participants have many misconceptions previously established about chemical bondings and have difficulty connecting theoretical aspects to experimental data.

Keywords: Peirce's semiotic; chemistry teaching; molecular orbitals; learning in chemistry; meaning-making; chemical representations.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	11
2	OBJETIVOS.....	13
2.1	OBJETIVO GERAL.....	13
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	13
3	REVISÃO DE LITERATURA.....	14
3.1	SEMIÓTICA DE PEIRCE.....	14
3.2	APRENDIZAGEM COMO CONSTRUÇÃO DE SIGNIFICADOS.....	18
3.3	REPRESENTAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA.....	19
3.4	ORBITAIS ATÔMICOS E MOLECULARES.....	21
3.4.1	Mecânica quântica, estrutura atômica e orbitais atômicos.....	21
3.4.2	Ligações químicas e orbitais moleculares.....	26
3.4.3	Representações, orbitais e semiótica peirceana.....	29
4	METODOLOGIA.....	31
4.1	PARTICIPANTES E CAMPO DE PESQUISA.....	31
4.2	INSTRUMENTOS DE COLETA DE DADOS.....	31
4.3	ANÁLISE DE DADOS.....	32
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	33
5.1	ANÁLISE, IDENTIFICAÇÃO E CLASSIFICAÇÃO DOS SIGNOS.....	35
5.1.1	Análise das respostas dos discentes do Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia.....	35

5.1.2	Análise das respostas dos discentes de Química-Licenciatura.....	38
5.1.3	Relação entre as respostas.....	42
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	46
	REFERÊNCIAS.....	48
	APÊNDICE A – QUESTIONÁRIO APLICADO PARA COLETA DE DADOS.....	51
	ANEXO A – EMENTA DE QUÍMICA GERAL II.....	53
	ANEXO B - EMENTA DE INTRODUÇÃO À QUÍMICA QUÂNTICA.....	55
	ANEXO C - EMENTA DE ESTRUTURA DA MATÉRIA.....	57

1 INTRODUÇÃO

Durante a graduação do curso de licenciatura estuda-se um conjunto de metodologias de ensino em que um de seus objetivos é estudar métodos capazes de auxiliar a proporcionar uma aprendizagem efetiva e coesa ao aluno da educação básica no processo de ensino e aprendizagem. Na prática, contudo, o contexto educacional vivenciado no Brasil mostra que a metodologia predominante ainda é a baseada na “transmissão” de conhecimento, na qual o aluno é um sujeito passivo no seu processo de aprendizagem e, muitas vezes, se vê inclinado ao mecanismo de "decorar" os assuntos abordados para a realização de uma atividade avaliativa, que irá determinar o seu conhecimento sobre o tema.

Sobre o modelo educacional brasileiro, Feynman (1985) afirma que os estudantes das universidades brasileiras, muitas vezes, memorizam conceitos e fórmulas perfeitamente, mas não absorvem nem entendem os significados por trás desses conceitos e fórmulas. Quase 40 anos depois, é possível observar que pouca coisa mudou, mesmo com o desenvolvimento de metodologias de ensino que propõem caminhos alternativos para a aprendizagem. Isso pode ser um reflexo do ensino tradicional que ainda está enraizado no Brasil, limitando a prática docente e, ainda, um obstáculo a ser transposto pelos cursos de formação inicial e continuada de professores das ciências. Ou seja, na prática, pouco tem sido feito, de fato, na aplicação dessas metodologias alternativas, principalmente em áreas específicas, como a da química.

Nesse sentido, a aprendizagem do conceito de orbital molecular é de extrema importância para o entendimento da estrutura da matéria, que é fundamental para a educação química. Contudo, ainda que o entendimento dos orbitais seja muito importante para a compreensão da química, nem sempre a aprendizagem desse conteúdo pode estar sendo efetivada. A utilização de conceitos de mecânica quântica no processo de aprendizagem de orbitais moleculares pode ser um dos fatores que influenciam as dificuldades enfrentadas pelos discentes na assimilação dos conceitos referentes a esse conteúdo. É possível, também, que a aprendizagem acerca da conceituação dos orbitais, por vezes, não se efetive devido a possíveis erros conceituais relacionados às ligações químicas estabelecidos pelos estudantes durante sua vida escolar e acadêmica. Há ainda, um outro fator, explicitado anteriormente: a “decoreba”; os estudantes decoram conceitos, fórmulas e teorias para a realização de uma atividade avaliativa, mas não entendem efetivamente a aplicabilidade daquilo que está sendo estudado. Desse modo, o presente trabalho busca analisar como acontece a estabilização de significados durante o processo de aprendizagem dos conceitos de orbitais moleculares, lançando-se mão da abordagem da semiótica peirceana, associada a questões relativas às

representações no ensino de Química. Sendo assim, esta pesquisa teve como questionamento: “Como ocorre a estabilização de significados no processo de aprendizagem de discentes de Química-Licenciatura e do Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia sobre os orbitais moleculares?”. Ao buscar estudar como ocorre a estabilização de significados no processo de aprendizagem dos discentes sobre os orbitais moleculares a partir da semiótica de Peirce, pensa-se em, posteriormente, analisar as possibilidades e as alternativas para aprimorar o processo de ensino e aprendizagem desse conteúdo tão importante para a construção do conhecimento químico.

Diante do exposto, o trabalho é fundamentado com base em tópicos referentes à Semiótica de Peirce, à aprendizagem como construção de significados, às representações no ensino de química e aos orbitais moleculares. Esses tópicos auxiliarão na posterior discussão dos resultados obtidos através da coleta de dados com estudantes da graduação de Química-Licenciatura e do Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal de Pernambuco - Campus do Agreste (UFPE/CA).

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Analisar a estabilização de significados, de acordo com a semiótica de Peirce, durante o processo de aprendizagem dos conceitos de orbitais moleculares de estudantes dos cursos de Química-Licenciatura e Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar signos que medeiam o processo de estabilização de significados dos discentes, de acordo com a semiótica de Peirce, sobre os conceitos de orbitais moleculares;
- Categorizar os tipos de signos que podem mediar o processo de construção de significados dos conceitos relativos aos orbitais moleculares.

3 REVISÃO DE LITERATURA

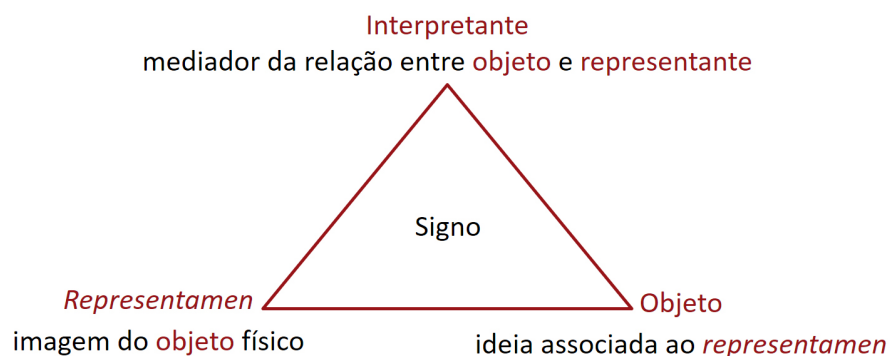
Para fundamentação teórica do trabalho, serão abordados tópicos referentes à Semiótica de Peirce, à aprendizagem como construção de significados, à representação no ensino de química e aos orbitais atômicos e moleculares.

3.1 SEMIÓTICA DE PEIRCE

A semiótica geral teve vários precursores ao redor do mundo, tais como Chomsky, John Lock e Lev Vygotsky. Este trabalho irá focar na semiótica peirceana. Charles Sanders Peirce (1839-1914) foi um cientista estadunidense e um importante contribuidor para a semiótica enquanto ciência. A semiótica, também chamada de Teoria dos Signos, se baseia nos signos. Signos, por sua vez, podem ser qualquer coisa: uma palavra, um sentimento ou algo concreto, por exemplo. A etimologia da palavra semiótica vem do grego *semeîon* (signo) e de *sêma*, que também significa signo ou sinal (NÖTH, 1998). Sendo assim, de modo geral, a semiótica é o campo da ciência relacionado aos signos e aos processos significativos (semiose) tanto na natureza quanto na cultura (NÖTH, 1998).

Para a semiótica peirceana, o conhecimento humano pode ser representado a partir de três conceitos: signo, objeto e interpretante. Para Peirce (2010), o signo é aquilo que representa algo para alguém. Ou seja, o signo é uma representação de algo – que é chamado de objeto. Ainda, para Peirce (2010), o signo cria na mente de alguém um signo (equivalente ou mais desenvolvido) denominado de interpretante. Sendo o interpretante a significação do signo (NÖTH, 1998). Estes três conceitos (signo, objeto e interpretante) formam uma relação triádica entre si (Figura 1). Alguns autores adotam signo e *representamen* como termos correlatos (NÖTH, 1998).

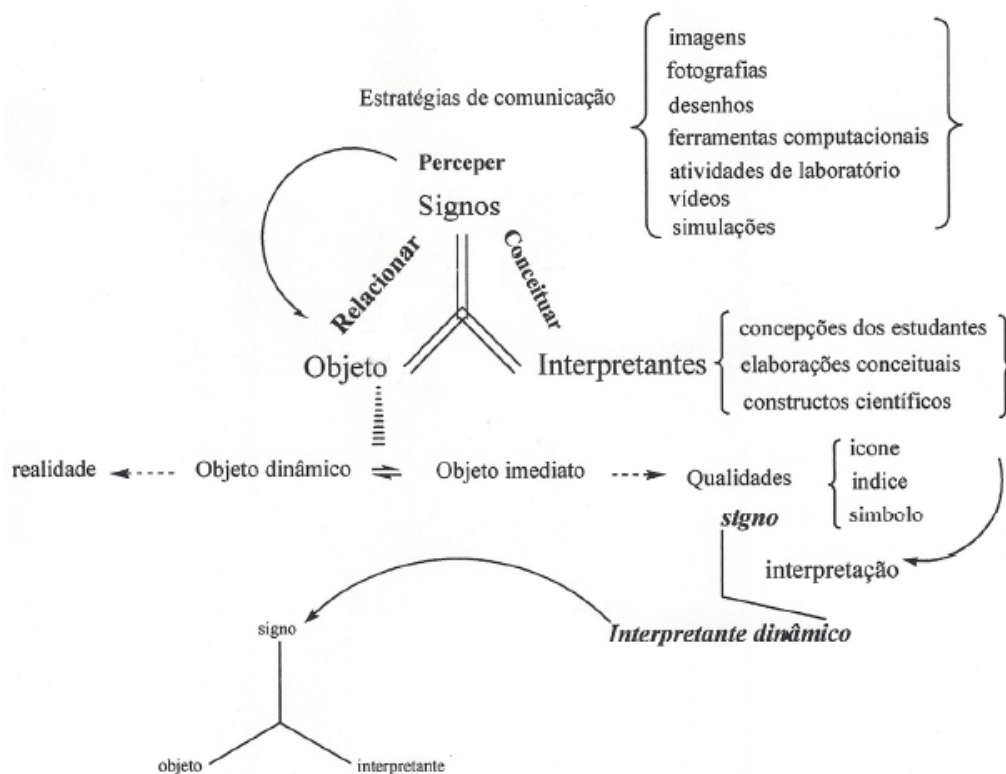
Figura 1 – Relação entre signo, objeto e interpretante na tríade semiótica de Peirce



Fonte: A.muse.arte (2015)

Considerando que um signo é uma representação de um objeto, Santaella (1983) faz a ressalva de que o signo possui limitações. Para Nöth (1998), essas limitações se dão porque o signo existe na mente do receptor e não no mundo exterior. A partir dos signos presentes em sala de aula e a mediação desses, foi proposta por Wartha e Rezende (2015), uma representação de tríade pedagógica (Figura 2).

Figura 2 – Representação da tríade pedagógica em aula de química



Fonte: Wartha e Rezende (2017, p. 194)

A tríade foi construída baseada nas relações entre signos, objeto e interpretante que acontecem dentro da sala de aula. Para Wartha e Rezende (2017), os signos são estratégias de comunicação, os objetos relacionam as qualidades captadas ao real percebido e os interpretantes podem ser concepções dos estudantes, elaborações conceituais ou construtos científicos. Como na semiótica peirceana trabalha-se com signo, objeto e interpretante, a Figura 2 pode acabar causando confusão ao trazer objeto dinâmico e objeto imediato. Contudo, o objeto dinâmico refere-se ao objeto propriamente dito, enquanto o objeto imediato é um signo, por isso suas qualidades são classificadas em ícone, índice e símbolo, que são classificações de signos.

Para uma melhor compreensão da semiótica de Peirce, é imprescindível diferenciar os termos língua e linguagem, uma vez que a semiótica é responsável por estudar as linguagens como um todo e talvez possa existir certa confusão em relação à conceituação desses dois termos. Como definido em Silva (2007),

Por *língua* pode-se entender a língua nativa, materna ou pátria, utilizada cotidianamente para a comunicação de forma escrita e oral. Mas esta comunicação também pode acontecer por intermédio de outras *linguagens*, como imagens, gráficos, sinais, luzes, fenômenos naturais, através do cheiro e do tato, e muitas outras formas, que constituem diferentes formas de *linguagens* (p. 79).

Resumindo, uma língua é uma forma de linguagem, mas as linguagens não se resumem à língua. Sendo assim, a semiótica abrange um campo maior relacionado a todo e qualquer tipo de linguagem, permitindo a descrição, a análise e a interpretação dessas linguagens a partir dos conceitos e dispositivos de indagação criados por Peirce (SANTAELLA, 1983).

Para Peirce, qualquer assunto ou conteúdo pode – e deve – ser estudado sob os olhos da semiótica, como indicado abaixo:

[...] nunca estive em meus poderes estudar qualquer coisa - matemática, ética, metafísica, anatomia, termodinâmica, ótica, gravitação, astronomia, psicologia, fonética, economia, a história da ciência, jogo de cartas, homens e mulheres, vinho, metrologia, exceto como um estudo da Semiótica (PEIRCE, s.d., n.p apud SANTAELLA, 1983, p. 4).

Sendo assim, não deixa de ser pertinente relacionar a semiótica peirceana à educação química. Como existem diferentes tipos de signos, Peirce estabeleceu diferentes classificações triádicas dos tipos de signos (SANTAELLA, 1983). No Quadro 1, há a relação de algumas das principais tricotomias e categorias de Peirce.

Quadro 1 – Tricotomias e categorias da semiótica de Peirce

Categoria do signo	Signo em si mesmo	Signo com seu objeto	Signo com seu interpretante
Primeiridade	Quali-signo	Ícone	Rema
Secundidade	Sin-signo	Índice	Dicente
Terceiridade	Legi-signo	Símbolo	Argumento

Fonte: Santaella (1983, p. 13, adaptado)

A semiótica peirceana é dividida em três categorias, que são chamadas de primeiridade, secundidade e terceiridade (Quadro 1). A primeiridade corresponde à categoria do signo relacionada ao “sentimento imediato e presente das coisas, sem nenhuma relação com outros fenômenos do mundo” (NÖTH, 1998, p. 63). Já a secundidade é a categoria do signo da “comparação, da ação, do fato, da realidade e da experiência no tempo e no espaço” (CP, 1.356-359 apud NÖTH, 1998, p. 64). A terceiridade, por fim, é a categoria do signo da “mediação, do hábito, da memória, da continuidade, da síntese, da comunicação, da representação, da semiose e dos signos” (CP, 1.337/ss apud NÖTH, 1998, p. 64).

Há, ainda, as três tricotomias dos signos. A primeira tricotomia dos signos, que é referente ao signo em si mesmo (PEIRCE, 2010). A segunda tricotomia dos signos está relacionada ao signo possuir relação existencial com o seu objeto ou com um interpretante (PEIRCE, 2010). A terceira tricotomia dos signos é definida pela relação do signo com o seu interpretante, a partir da representação do signo como um signo de possibilidade, de fato ou de razão (PEIRCE, 2010).

Sendo assim, para o presente trabalho, cabe a utilização da segunda tricotomia dos signos. Essa tricotomia dos signos é a da relação do signo com o seu objeto, é composta por três elementos: ícone (primeiridade), índice (secundidade) e símbolo (terceiridade). Os ícones são os signos que se relacionam com seu objeto devido à significação por semelhança visual ou de propriedades (SILVA, 2007). Por exemplo, o “pudim de passas” ao referir-se ao modelo atômico de Thomson. Já os índices são os signos que promovem significação por possuírem ligação física direta com o objeto (SILVA, 2007). Por exemplo, a representação de um sistema reacional em que há liberação de gás, indicando que está ocorrendo um fenômeno químico, se caracteriza como um signo do tipo índice. Por fim, os símbolos são os signos que relacionam-se com o objeto a partir de leis ou convenções e dependem do interpretante,

considerando que é o interpretante que promove a associação ao objeto (SILVA, 2007). Um exemplo disso é a atribuição de símbolos aos elementos químicos na Tabela Periódica. Os símbolos são convenções, tendo seus significados compartilhados dentro da comunidade.

Como a semiótica peirceana será utilizada para analisar a estabilização de significados durante o processo de aprendizagem dos alunos, é pertinente abordar um tópico referente ao processo de aprendizagem, nesse caso, foi adotada a abordagem da aprendizagem como construção de significados.

3.2 APRENDIZAGEM COMO CONSTRUÇÃO DE SIGNIFICADOS

O conceito de aprendizagem pode variar de acordo com a abordagem teórica adotada. Para Zittoun e Brinkmann (2012), a aprendizagem envolve o processo de construção de significados. Aprender algo, para os autores, significa adquirir conhecimento, habilidades ou disposições que permitam que o aprendiz aja, pense e sinta algo que seja importante para si próprio ou para os outros. Sendo assim, a aprendizagem está relacionada ao sentido pessoal e a possível significação que as informações têm para a pessoa. É nesse aspecto que Zittoun e Brinkmann (2012) definem o processo de construção de significados como o processo no qual as pessoas interpretam situações, eventos, objetos ou discursos a partir do seu conhecimento e experiência previamente adquiridos. Para esses autores, aprendizagem como construção de conhecimento é uma expressão que enfatiza que, em qualquer situação de aprendizagem, as pessoas procuram sentido nas situações baseadas na similaridade dessa situação com situações anteriores. Silva (2018) afirma que “o conhecimento é sempre construído, ou reconstruído no processo de ensino e aprendizagem, com inovações que emergem do conhecimento estabelecido anteriormente” (p. 67). Ignelzi (2000), ainda, diz que como a nova experiência e a aprendizagem são interpretadas a partir das construções da realidade, caso essas informações não se encaixem na construção de significados, podem acabar sendo ignoradas. Por vezes, as informações não são completamente descartadas e ignoradas, mas acabam se estabelecendo enquanto conceitos equivocados. Para Nakhleh (1992), quando conceitos equivocados são detidos na estrutura cognitiva do estudante, eles irão interferir na aprendizagem posteriormente. Para a autora,

O estudante deve então conectar novas informações a uma estrutura cognitiva que possui aprendizagem inapropriada. Por isso, a nova informação não pode ser conectada apropriadamente à sua estrutura cognitiva e, assim, uma fraca

compreensão - ou compreensões equivocadas do conceito irão ocorrer (NAKHLEH, 1992, p. 191, tradução nossa)

É nesse contexto que Bringle e Hatcher (1999) falam sobre a necessidade da prática e da reflexão da prática no processo de aprendizagem, considerando que, muitas vezes, os estudantes encontram dificuldades para generalizar o conhecimento prévio, uma vez que os conteúdos são apresentados a partir de um contexto específico. Os autores, ainda, indicam que basta modificar a natureza do problema ou o contexto ao qual está sendo aplicado que os estudantes tendem a falhar. Como indicado pelos autores:

[...] Estudantes são ensinados um modo particular de conteúdo, eles são ensinados exemplos de como resolver tipos particulares de problemas, e então eles praticam resolver esses tipos de problemas. Entretanto, quando a natureza do problema é variada, ou quando problemas similares são encontrados em diferentes contextos, os estudantes falham em generalizar o conhecimento anterior a essas novas circunstâncias ou situações (BRINGLE; HATCHER; 1999, p. 179, tradução nossa)

Ainda sobre o processo de aprendizagem, Ignelzi (2000) ressalta que as pessoas constroem seu entendimento de modos diferentes, ou seja, as pessoas aprendem de modos e em níveis diferentes. É nesse sentido que aparecem os signos, uma vez que conceitos são construídos a partir da mediação de signos (SANTOS; SILVA, 2019). Sendo assim, os signos são imprescindíveis para a construção de significados e, conseqüentemente, para o processo de aprendizagem. Para Santos e Silva (2019), “a aprendizagem é caracterizada, também, pela capacidade do estudante de externalizar significados através de signos que fazem parte do contexto científico, explicando fenômenos e relacionando ideias, sendo a linguagem o sistema simbólico mais utilizado para externar tais significados” (p. 232).

Desse modo, tratando-se do processo de aprendizagem da química, é necessário um tópico que aborde a temática voltada à representação no ensino de química, considerando-se a importância das representações para a química e para o processo de ensino e aprendizagem de química.

3.3 REPRESENTAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA

De acordo com Hoffmann e Laszlo (1991), representação é uma transformação simbólica da realidade. As representações estão presentes em tudo. Na química não é

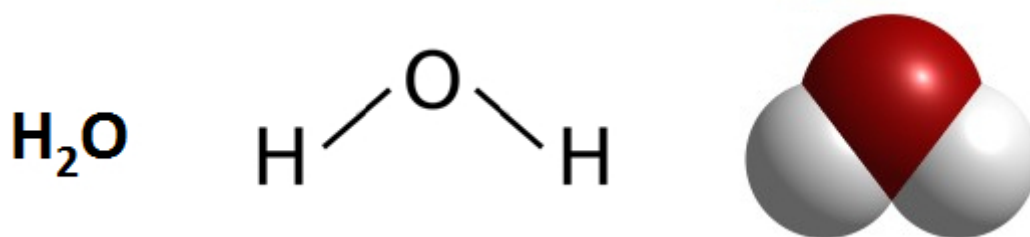
diferente, considerando que a química é uma série de representações e interpretações de fenômenos da natureza. Sendo assim, é possível perceber a importância das representações para a química. De acordo com Rozentski e Porto (2015), as representações permitem que o químico manipule, por meio delas, átomos, íons e moléculas tanto no papel quanto em softwares de simulação, além de permitir que faça previsões de fenômenos ao nível macroscópico, evidenciando assim a importância das representações para a compreensão e a aprendizagem da química.

Para Wartha e Rezende (2011), a ideia de representação está relacionada à procura de formas de aprender o “real” através de sistemas de significação. Wartha e Rezende (2017) trazem que, para a semiótica peirceana, representação é mediação; na qual a “realidade é mediada pelas interações entre signos (signo, objeto e interpretante)” (p. 191). Assim, para Wartha e Rezende (2011), a semiótica peirceana pode contribuir na compreensão do processo de pensamento, uma vez que o mundo é representado e interpretado através de signos. E, ainda, que é possível pensar “a sala de aula como um espaço de percepção (signos) sobre entes químicos (objetos) na elaboração conceitual (interpretante)” (WARTHA; REZENDE, 2017, p. 193) a partir dessas considerações de Peirce. Mortimer (1996) trata da importância de uma representação para a química, enfatizando esse caráter representacional.

Todas essas considerações nos levam a concluir que a fórmula química da água — H_2O — é um importante instrumento para explicar várias de suas propriedades, inclusive as mais notáveis e incomuns. No entanto, a fórmula nada mais é que uma representação da substância. Como tal devemos usá-la, apropriando-nos das informações que ela pode nos fornecer mas tomando o cuidado de não confundi-la com a realidade mesma da substância água, muito mais complexa e profunda do que aquilo que duas letras do alfabeto e um número permitem antever (p. 21).

A partir do trecho, é possível notar a importância das representações para a química e o ensino de química: trata-se de um instrumento para auxiliar na construção de significados. A água, mencionada por Mortimer (1996), pode ser representada de diferentes formas, como mostrado na Figura 3. Na figura está representada a fórmula química da água, um esquema das ligações formadas na molécula da água e uma estrutura gráfica em três dimensões. Semioticamente falando, esses signos podem ser representados em símbolo, símbolo e ícone, respectivamente. Essas diferentes representações são utilizadas para auxiliar no processo de ensino e aprendizagem de conteúdos específicos.

Figura 3 – Formas de representação da molécula da água



Fonte: Ciceco (2021)

Gois e Giordan (2007) afirmam que utilizar simbologias de modo apropriado faz parte do conhecimento químico, considerando que trata-se de uma ciência que trabalha com a matéria a nível submicroscópico e nanoscópico. Contudo, sobre as simbologias utilizadas no ensino de química, para Wartha e Rezende (2011):

O conhecimento de fórmulas, equações, ligações e mecanismos de reações não deveriam ser o objetivo principal no ensino e aprendizagem de Química. Do nosso ponto de vista, seria mais importante o desenvolvimento da imaginação, em função das evidências observadas, dos dados analisados e da capacidade de criar modelos explicativos por meio da capacidade de representar átomos, moléculas e transformações químicas, por exemplo, e usá-los na construção do conhecimento químico sobre determinado fenômeno (p. 276).

Ou seja, como já mencionado, as representações são muito importantes para o ensino de química, uma vez que podem, por exemplo, auxiliar na visualização de fenômenos; contudo esse não deve ser o foco principal do ensino da química. Na verdade, as representações são ferramentas para auxiliar na construção do conhecimento químico, considerando que muitas vezes não se trata de algo fácil e simples de ser visualizado, como é o caso dos orbitais moleculares, que serão abordados no próximo tópico.

3.4 ORBITAIS ATÔMICOS E MOLECULARES

O capítulo fará uma breve introdução à Mecânica Quântica, assim como à estrutura atômica e aos orbitais atômicos, que são conteúdos importantes para o entendimento dos orbitais moleculares. Posteriormente será realizada uma discussão sobre as ligações químicas e os orbitais moleculares, assim como sobre a relação entre as representações em química, os orbitais e a semiótica peirceana.

3.4.1 Mecânica quântica, estrutura atômica e orbitais atômicos

A Química, ainda que explique fenômenos macroscópicos observados na natureza, ainda pode ser considerada uma ciência muito abstrata, devido ao fato de trabalhar com aspectos microscópicos da matéria. Muitas vezes, esse fato pode acabar dificultando tanto a aprendizagem quanto o ensino da química. A abstração da química advém das teorias e dos modelos que são criados para explicar os fenômenos observados na natureza. É importante ressaltar que, por se tratar de teorias e modelos, não significa que sejam verdades absolutas, mas sim maneiras encontradas de explicar esses fenômenos.

Nesse sentido, os filósofos gregos buscaram entender a constituição da matéria, chegando ao conceito de átomo, que significa “não divisível”. Sendo assim, a conceituação de átomos surge ainda na Grécia Antiga com os filósofos Demócrito e Epicuro. Apesar disso, para o presente trabalho, nos interessa a partir do modelo atômico de Böhr, que são estudos mais recentes e que começaram a utilizar os conceitos e cálculos de mecânica quântica para compreender e descrever o átomo. No modelo atômico de Bohr, os elétrons (partículas com carga negativa) estão localizados em órbitas circulares em torno do núcleo (carregado positivamente). Nesse modelo, os elétrons podem absorver ou emitir luz, podendo variar da órbita a qual se encontra. A teoria de Bohr funciona bem quando aplicada ao átomo de hidrogênio, contudo falha ao ser aplicada a átomos com dois ou mais elétrons (MIESSLER, 2014). Assim, após algum tempo, percebeu-se que era necessário considerar a natureza de onda do elétron (MIESSLER, 2014). Desse modo, entra-se na equação de Broglie, que é responsável por justificar a natureza de onda do elétron. Para de Broglie, todas as partículas móveis têm propriedades de onda. Ou seja, existe a dualidade da matéria, que pode se comportar como onda e partícula.

Essas considerações implicam em outro princípio fundamental da física, o princípio da incerteza de Heisenberg:

Os elétrons movendo-se em círculos ao redor do núcleo, como na teoria de Bohr, podem ser considerados ondas estacionárias, as quais podem ser descritas pela equação de de Broglie. No entanto, não acreditamos mais que seja possível descrever o movimento de um elétron em um átomo com tanta precisão. Esta é uma consequência de outro princípio fundamental da física moderna, princípio da incerteza de Heisenberg, que afirma que existe uma relação entre as incertezas inerentes na localização e no momento de um elétron (MIESSLER, 2014, p. 14).

De acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg, não é possível descrever com precisão a posição de um elétron, devido ao grau de incerteza na sua localização. Isso implica na impossibilidade de descrever as órbitas precisas dos elétrons, sendo introduzido o conceito de orbitais. Assim, a partir de cálculos computacionais, é possível calcular as regiões de maior densidade eletrônica.

A mecânica quântica reconhece a dualidade onda-partícula da matéria admitindo que, em vez de se deslocar ao longo de uma trajetória definida, uma partícula se distribui pelo espaço como uma onda. Substituindo o conceito clássico de trajetória, na mecânica quântica se utiliza uma função matemática, chamada função de onda Ψ (psi), que foi proposta em 1926 por Erwin Schrödinger, por isso, também é chamada de equação de Schrödinger (equação 1). A mecânica quântica é baseada em alguns postulados, que são:

Postulado I: A função de onda contém todas as informações possíveis do sistema que a representa: $\Psi(r_1, r_2, \dots, t)$.

A interpretação de Max Born para função de onda baseia-se na analogia com a teoria ondulatória da luz.

Postulado II: Para um sistema descrito pela função de onda $\Psi(r)$, a probabilidade de encontrar a partícula no elemento de volume dt em r é proporcional à $|\Psi|^2 dt$.

A interpretação de Born afasta qualquer preocupação acerca do significado de um valor negativo (e, em geral, complexo) de y porque $|\Psi|^2$ é real e nunca será negativo.

Postulado III: A equação diferencial de segunda ordem especial, proposta por Schrödinger, para determinar a função de onda de qualquer sistema. A **equação de Schrödinger independente do tempo** para uma partícula de massa m , movendo-se em uma dimensão e com energia E é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V\Psi = E\Psi \quad (\text{Eq. 1})$$

Onde V é a energia potencial da partícula e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Essa função deve ser contínua, ter uma inclinação contínua, ser unívoca e ser quadraticamente integrável.

Postulado III: Para cada propriedade observável Ω de um sistema, há um operador $\hat{\Omega}$ construído a partir dos seguintes operadores da posição e do momento linear:

$$\hat{x} = x \times \text{_____} \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \quad (\text{Eq. 2})$$

Postulado IV: Se o sistema for descrito por uma função de onda ψ , que é uma autofunção de $\hat{\Omega}$, tal que $\hat{\Omega}\psi = \omega\psi$, então o resultado de uma medida Ω será o autovalor ω .

Uma função dessa forma $\hat{\Omega}\psi = \omega\psi$ pode ser lida como:

$$(\text{Operador})(\text{função}) = (\text{fator constante}) \times (\text{mesma função})$$

Uma equação dessa forma é chamada de **equação de autovalor**, o fator constante é chamado de **autovalor** do operador e a função que ocorre em ambos os lados da equação é chamada de **autofunção** do operador. Se resolvermos a função de onda $\hat{H}\psi = E\psi$, é o mesmo que determinar autovalores e as autofunções do operador hamiltoniano (H), e os autovalores correspondentes são as energias permitidas.

Postulado V: Quando o valor de um observável R é medido para um sistema que seja descrito por uma combinação linear das autofunções de $\hat{\Omega}$, com coeficientes c_k , cada medida fornece um dos autovalores ω_k de $\hat{\Omega}$ com uma probabilidade proporcional a $|c_k|^2$.

Podemos pensar na sobreposição como $\psi = \psi_{\rightarrow} + \psi_{\leftarrow}$, onde o primeiro termo do lado direito da equação representa a partícula com momento linear $+\hbar k$ e o segundo termo da equação representa a partícula com momento linear $-\hbar k$. Se o momento da partícula for medido repetidas vezes em uma longa série de observações, então sua magnitude será $\hbar k$ em todas as medidas. Porém metade das medidas mostrará que a partícula está se movendo para a direita e a outra metade para esquerda. De acordo com a mecânica quântica não podemos prever em que sentido a partícula está se deslocando, podemos dizer que haverá probabilidades iguais de encontrar a partícula se deslocando para a esquerda e para a direita. De forma geral, se sabemos que a função de onda é uma superposição de muitas autofunções do operador $\hat{\Omega}$ correspondente ao observável de interesse, podemos descrevê-la como uma combinação linear:

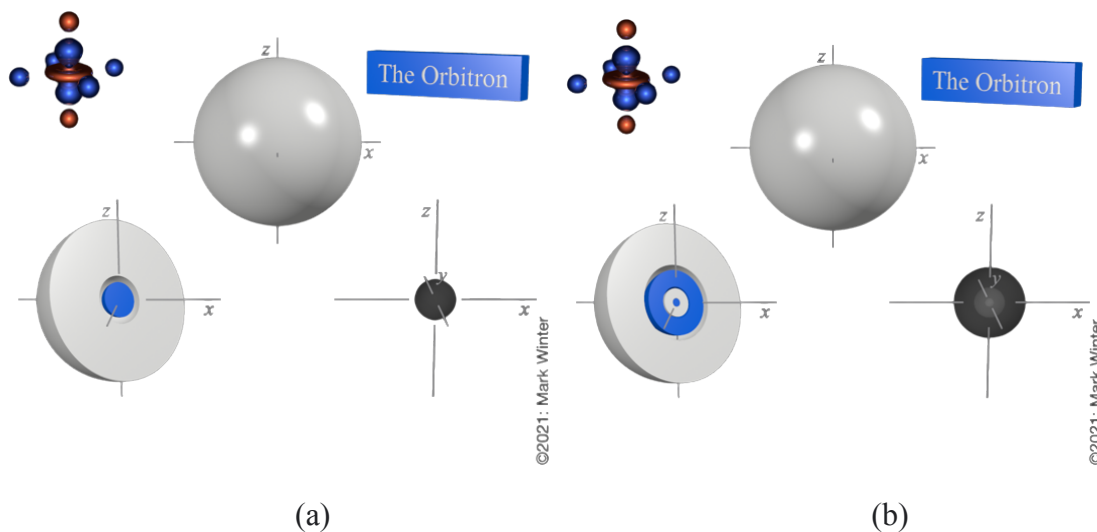
$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \dots = \sum_k c_k\psi_k \quad (\text{Eq. 3})$$

Onde c_k são os coeficientes numéricos e as ψ_k são as diferentes autofunções do operador com $\hat{\Omega}\psi = \omega\psi$.

Essa breve discussão sobre os postulados da mecânica quântica foi necessária para introduzirmos o orbital atômico. Um orbital atômico é uma função de onda de um elétron em um átomo. Cada orbital atômico de um átomo hidrogenóide, que é um átomo formado por um único elétron, $(\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi))$ é definido por quatro números quânticos

identificados por n , l , ml e ms . Talvez uma das fontes da falha da interpretação de orbitais se dê pelo fato de que dizemos que o elétron “ocupa” o orbital quando ele é descrito por uma destas funções de onda. Cada combinação possível dos números quânticos corresponde a um orbital atômico específico. De forma simplificada, pode-se dizer que o número quântico principal n está relacionado ao tamanho dos orbitais (Figura 4).

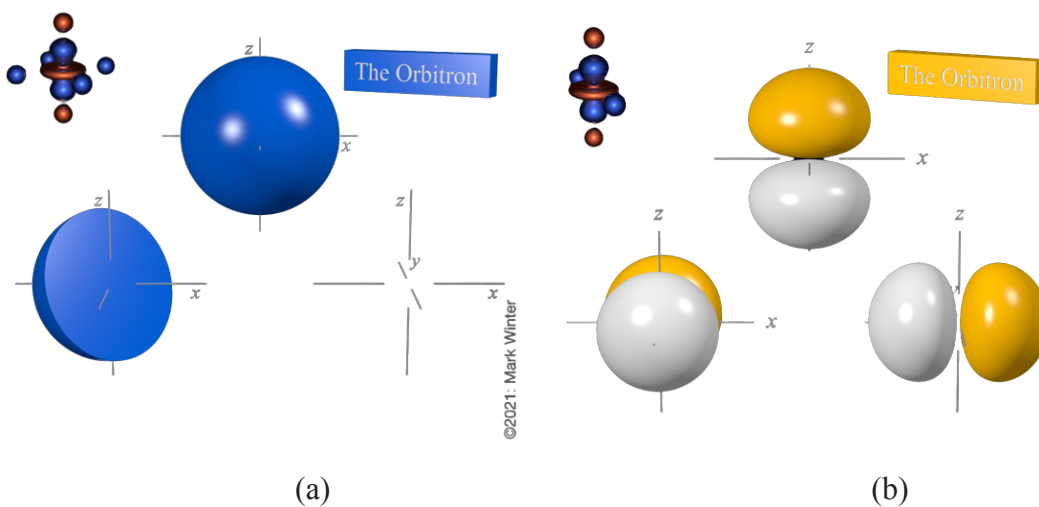
Figura 4 – Representação gráfica dos orbitais atômicos 2s (a) e 4s (b).



Fonte: The Orbitron (2023)

O número quântico secundário, l , está relacionado à forma do orbital (Figura 5).

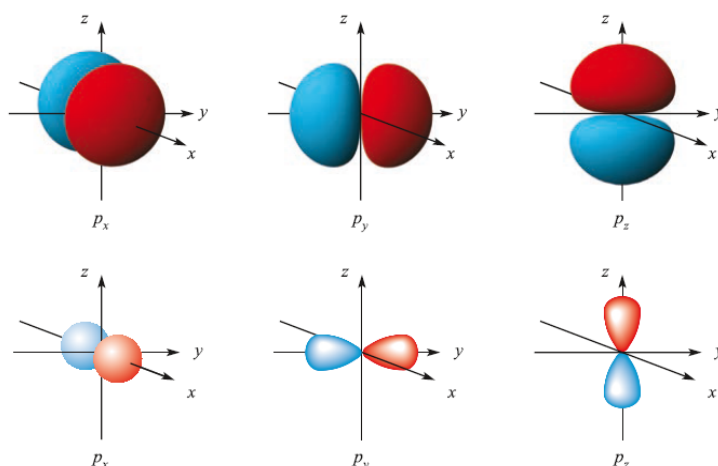
Figura 5 – Representação gráfica dos orbitais atômicos 1s (a) e 2p (b).



Fonte: The Orbitron (2023)

O número quântico m_l , por sua vez, está relacionado à direção do orbital no plano cartesiano (Figura 6).

Figura 6 – Representação gráfica dos orbitais atômicos p_x , p_y e p_z



Fonte: Housecroft; Sharpe (2012, p. 14)

O quarto número quântico, m_s , indica a orientação do spin de um elétron, podendo assumir dois valores possíveis: $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$. A partir da orientação do spin do elétron, é possível obter respostas sobre o caráter magnético do átomo.

Ainda, vale ressaltar que os orbitais atômicos podem ser representados graficamente de muitos modos: diagramas de superfícies limites, gráficos de Ψ e de Ψ^2 em função da distância ao núcleo, diagramas de “nuvens de densidade eletrônica” e mapas de densidade eletrônica constante. Essas representações são muito úteis, uma vez que colaboram na “visualização” e compreensão de como os orbitais atômicos se combinam para formar as ligações químicas (BARROS, 1992).

3.4.2 Ligações químicas e orbitais moleculares

O entendimento acerca das ligações químicas é um dos pilares fundamentais da Química. Os modelos de química quântica do átomo e da ligação atômica, como a Teoria da Ligação de Valência (TLV) ou Teoria do Orbital Molecular (TOM), que são particularmente desafiadores para os alunos dos primeiros períodos devido à sua natureza abstrata e seus exigentes requisitos matemáticos (BOUAYAD *et al*, 2014; PARTANEN, 2018; TABER, 2005). No entanto, esses tópicos são muito fundamentais para a compreensão da química de

fronteira, por exemplo. Sendo assim, há necessidade de medidas de apoio aos estudantes de química, principalmente àqueles dos primeiros semestres do curso.

Poucas teorias tiveram o impacto que a TOM teve na química. Essa teoria muitas vezes é ensinada desde as disciplinas introdutórias dos primeiros períodos de cursos de graduação até as mais avançadas disciplinas de cursos de pós-graduação.

A TOM tem suas origens conceituais em Mulliken (1928) e Hund (1928) que a desenvolveram para entender, de forma qualitativa, o papel da mecânica quântica na interpretação de espectros moleculares. Foi formulado em uma forma matemática por Hartree (1928), Fock (1930) e Slater (1929, 1930), que deduziram as equações que têm como suas soluções os orbitais moleculares imaginados por Mulliken e Hund. Ela se tornou uma teoria molecular prática nas mãos de Roothaan (1951) e Hall (1951) que mostraram como se poderia resolver as equações de Hartree-Fock para uma molécula poliatômica geral, expandindo os orbitais moleculares em termos de funções hidrogenóides.

Esse foi um avanço monumental, pois permite determinar de uma vez por todas os orbitais moleculares e suas energias e avaliar a precisão quantitativa do conceito de orbitais moleculares e iniciar o desenvolvimento sistemático de teorias mais precisas e que agora dominam o cenário da química computacional (JESSEN, 1999).

Como a TOM é uma teoria quantitativa bem definida (conhecida comumente como teoria Hartree-Fock-Roothaan), ela pode fazer previsões quantitativas que podem ser comparadas com experimentos.

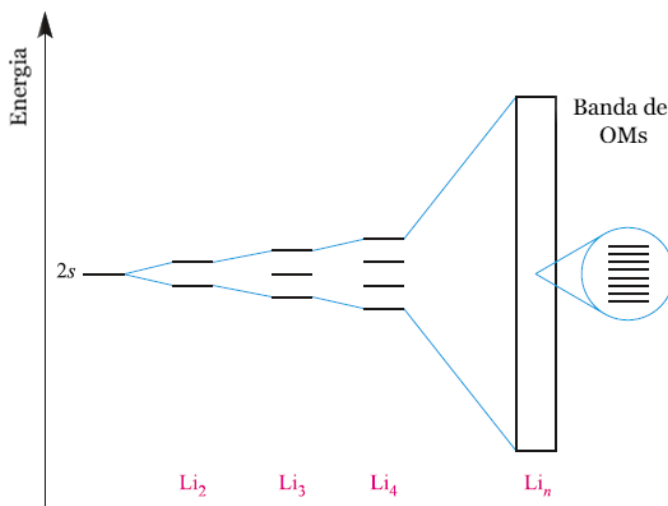
Ainda assim, a TOM é de extrema importância para o entendimento das ligações químicas, uma vez que possibilita uma explicação mais detalhada e aprofundada dos fenômenos relacionados à formação de uma ligação química. É importante ressaltar que, ainda que inicialmente essa teoria seja trabalhada para casos mais simples, como moléculas diatômicas e homonucleares, ela pode ser aplicada a qualquer tipo de ligação química, inclusive a casos mais complexos. A Teoria do Orbital Molecular surge para explicar fenômenos e completar lacunas deixadas pelos modelos anteriores. Essa teoria permite responder questões relacionadas às variações de comprimento e de energia de ligação a partir da perda ou ganho de elétrons; à como as energias de ionização das moléculas e dos íons podem ser comparadas às energias de seus átomos constituintes; além de conseguir justificar algumas observações experimentais (BARROS, 1992).

A TOM também pode ser aplicada para explicar a formação e as propriedades de ligações iônicas e metálicas. Tratando-se de ligações iônicas, Miessler (2014) explica que:

[...] conforme os átomos que formam ligações diferem mais em eletronegatividade, a diferença de energia entre os orbitais atômicos interagindo também aumenta, e a concentração de densidade de elétrons é cada vez mais tendente para o átomo mais eletronegativo nos orbitais moleculares ligantes. No limite, o elétron é transferido completamente para o átomo mais eletronegativo, para formar um íon negativo, deixando um íon positivo com um orbital de alta energia não ocupado. Quando dois elementos com uma grande diferença de eletronegatividade (como Li e F) se combinam, o resultado é uma ligação iônica. No entanto, em termos de orbitais moleculares, podemos tratar um par de íons como fazemos com um composto covalente (p. 137).

Já em relação às ligações metálicas, a TOM é aplicada à Teoria de Bandas, cujo conceito básico é considerar as energias dos orbitais moleculares como um conjunto de átomos de metal. Assim, um diagrama de OMs, ao descrever uma ligação metálica, é caracterizada por ter orbitais moleculares (bandas) muito próximos em energia (HOUSECROFT; SHARPE, 2012), como representado na Figura 7.

Figura 7 – Diagrama de banda de orbitais moleculares para o lítio metálico



Fonte: Housecroft; Sharpe (2012, p. 183, adaptado)

Ainda que seja utilizada uma abordagem qualitativa da Mecânica Quântica, para compreender bem os conceitos por trás da Teoria do Orbital Molecular, é necessário ter uma base teórica boa sobre alguns conceitos de mecânica quântica, assim como algumas implicações desses conceitos. O entendimento do conceito de orbital atômico, por exemplo, parte de implicações da mecânica quântica e é muito importante para a compreensão dos

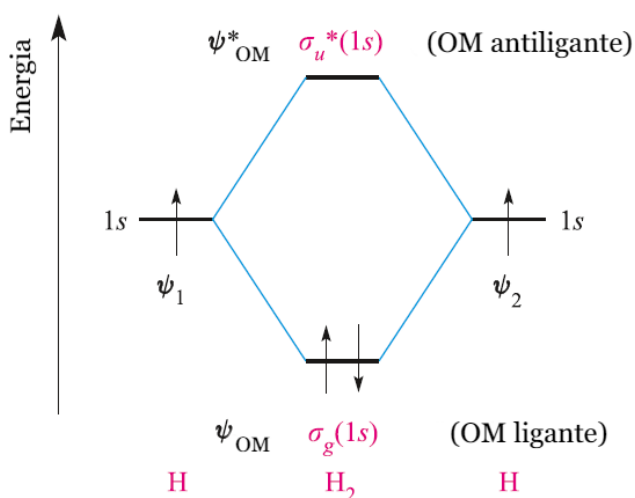
orbitais moleculares, considerando que um orbital molecular é formado a partir de combinações lineares de orbitais atômicos (CLOA).

Sendo assim, algumas características presentes nessa teoria e provenientes dos conceitos e cálculos de mecânica quântica podem acabar dificultando o entendimento de TOM, considerando que certas representações provenientes dos modelos anteriores estão enraizadas na mente dos estudantes. Por isso, é muito importante enfatizar que tanto TOM quanto teorias e modelos anteriores são representações que possibilitam explicações sobre os fenômenos naturais e, ainda que aquela representação sirva muito bem para explicar um fenômeno, continua sendo uma representação e não necessariamente representa fielmente a realidade. É nesse sentido que o próximo subtópico relaciona as representações na química, os orbitais e a semiótica peirceana.

3.4.3 Representações, orbitais e semiótica peirceana

As representações estão presentes por toda a química, como discutido previamente no tópico 3.3. Os diagramas, que são gráficos em duas dimensões, são representações muito utilizadas na química, principalmente quando se trata de orbitais, sejam atômicos ou moleculares. Os gráficos são classificados como signos icônicos, ou seja, são signos que possuem similaridade na aparência com o seu objeto.

Figura 8 – Diagrama de orbitais moleculares para a formação da molécula de H_2



Fonte: Housecroft; Sharpe (2012, p. 35, adaptado)

Para Rozentalski e Porto (2018), os diagramas são caracterizados por serem complementares à linguagem textual, sendo assim, são signos que podem contribuir para o processo de significação do conteúdo. Rozentalski e Porto (2018) consideram os diagramas de energia como ferramentas de raciocínio, considerando que permitem a obtenção de informações sobre a ligação, energias e reatividade química do composto.

Para Rozentalski e Porto (2015), um ícone é caracterizado por permitir a obtenção de novas informações sobre o seu objeto. Desse modo, os gráficos de orbitais moleculares são signos icônicos que permitem a obtenção de informações sobre a energia na formação da molécula e a natureza magnética do composto, por exemplo. É possível perceber isso na Figura 8, que é uma representação para a formação da molécula de gás hidrogênio (H_2), nesse caso, trata-se de um diagrama de orbitais moleculares. Como mencionado, a partir desse diagrama, é possível obter informações sobre a ordem de ligação do composto, o tipo de ligação formada na molécula e a natureza magnética do composto.

A partir do diagrama de orbitais moleculares, é possível realizar o cálculo da ordem de ligação (Eq. 4), que permite concluir o número de ligações formadas. No diagrama de orbitais moleculares, os orbitais moleculares ligantes (OMLs) são representados por σ e π , enquanto os orbitais moleculares antiligantes (OMALs) são representados por σ^* e π^* .

$$\text{Ordem de ligação} = \frac{1}{2} [(\text{n}^\circ \text{ de elétrons em OMLs}) - (\text{n}^\circ \text{ de elétrons em OMALs})] \quad (\text{Eq. 4})$$

Essas informações são obtidas a partir dos signos estabelecidos presentes no diagrama. Contudo, só é possível tirar essas conclusões caso o estudante tenha aprendido a interpretar o gráfico. Caso contrário, trata-se apenas de vários símbolos sem significado.

A seguir, apresentaremos a metodologia deste projeto, caracterizando a pesquisa e discutindo as etapas e instrumentos para coleta e análise dos dados.

4 METODOLOGIA

Quanto à natureza da pesquisa, trata-se de uma pesquisa básica, uma vez que não possui uma aplicação prática prevista. É uma pesquisa de abordagem qualitativa, pois utiliza técnicas de análise de dados e objetiva-se gerar resultados a partir dos significados do fenômeno estudado (SILVA, 2017). Além disso, possui caráter descritivo, considerando que o foco da pesquisa é identificar e analisar os signos presentes na estabilização de significados de um conteúdo. Para Gil (2008), uma pesquisa descritiva tem como objetivo descrever características relacionadas a um fenômeno, assim como estabelecer relações entre variáveis.

4.1 PARTICIPANTES E CAMPO DE PESQUISA

A pesquisa foi realizada com discentes dos cursos de Química-Licenciatura e do Bacharelado Interdisciplinar de Ciência e Tecnologia do Campus do Agreste da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE/CA) que tenham cursado previamente, pelo menos, um dos seguintes componentes curriculares:

- Química Geral II;
- Introdução à Química Quântica;
- Estrutura da Matéria.

Considerando que se trata de uma pesquisa para analisar a estabilização de significados durante o processo de aprendizagem dos orbitais moleculares, é imprescindível que os participantes da pesquisa tenham tido contato prévio com esse conteúdo, por isso o pré-requisito de ter cursado Química Geral II, Introdução à Química Quântica ou Estrutura da Matéria, que são disciplinas que contêm esse conteúdo em suas respectivas ementas (anexos A, B e C). Pelo caráter exploratório da pesquisa, não há restrição do número total de participantes, contanto que atendam aos pré-requisitos exigidos.

4.2 INSTRUMENTOS DE COLETA DE DADOS

Para coleta de dados foi utilizado um questionário (APÊNDICE A), que possui perguntas direcionadas a verificar o conhecimento construído pelos alunos de Química-Licenciatura durante as disciplinas de Química Geral II e/ou Introdução à Química Quântica e dos alunos do Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia durante a

disciplina de Estrutura da Matéria. A partir do questionário, pretende-se identificar os signos que mediarão o processo de estabilização de significados dos discentes sobre os orbitais moleculares, assim como categorizar os tipos de signos que mediarão o processo de construção de significados dos conceitos relativos aos orbitais moleculares.

4.3 ANÁLISE DOS DADOS

Para realização da análise dos dados obtidos através do questionário disponibilizado aos discentes de Química-Licenciatura e do Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia serão utilizadas as categorias de Peirce, nas quais podem-se classificar os signos em ícone, índice e símbolo.

Sendo assim, para análise dos dados, iremos analisar a:

- 1) Identificação dos signos relevantes na aprendizagem: serão observados no questionário quais signos são retomados na explicação de fenômenos em determinadas perguntas. Partindo-se do pressuposto de que os signos são algo natural dos seres humanos e sempre vão aparecer, independente da resposta estar correta ou não;
- 2) Categorização dos signos: partindo dos critérios propostos por Peirce, os signos identificados anteriormente serão classificados em (SILVA, 2007):
 - a) símbolo: é o signo que se relaciona com o objeto partindo de leis ou convenções;
 - b) ícone: é um tipo de signo que se relaciona ao objeto por semelhança visual ou de propriedades;
 - c) índice: é o signo que possui ligação física direta com o objeto.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O número total de participantes da pesquisa foi 29, sendo 12 participantes do curso de Química-Licenciatura e 17 do curso de Ciência e Tecnologia (BICT). Para manter o anonimato dos participantes da pesquisa, estes serão identificados por letras genéricas e aleatórias durante a análise e discussão dos resultados da pesquisa. Os discentes de Química, da disciplina de estágio IV, eram de variados períodos e, em sua maioria, viram o conteúdo há mais tempo quando comparado aos discentes de Ciência e Tecnologia, que eram todos do segundo período do curso e tinham visto o conteúdo no período anterior (Quadro 2).

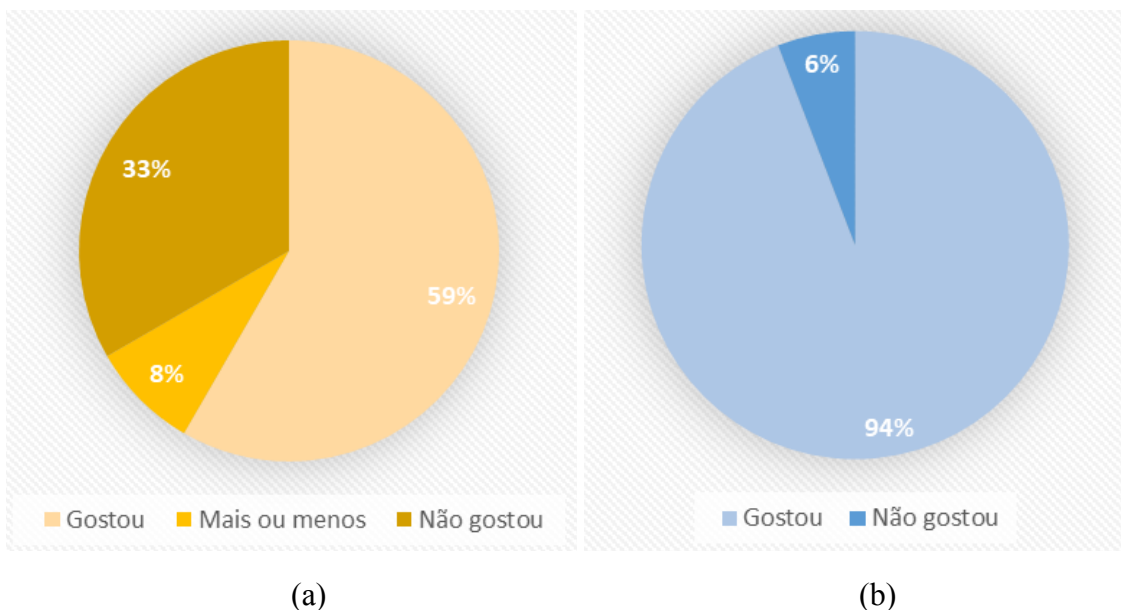
Quadro 2 – Perfil dos participantes da pesquisa

Curso	Disciplina(s) cursadas	Período(s)	Total de participantes
Química-Licenciatura	Química Geral II Introdução à Química Quântica	8º ao 13º	12
Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia	Estrutura da Matéria	2º	17

Fonte: Dados da pesquisa (2023)

Uma das perguntas do questionário aplicado foi direcionada a entender se os discentes tinham alguma afinidade pelas disciplinas ou pelo conteúdo referente aos orbitais moleculares. Como mostrado no Gráfico 1, quase 80% dos alunos que responderam ao questionário afirmou ter certa afinidade ou interesse pelo conteúdo. A maior parcela de alunos que gostou do conteúdo está presente no curso de Ciência e Tecnologia, no qual 90% dos alunos afirmou ter gostado do conteúdo e/ou da disciplina de Estrutura da Matéria.

Gráfico 1 – Afinidade com o conteúdo e/ou disciplina das turmas de Química (a) e Ciência e Tecnologia (b).



Fonte: Dados da pesquisa (2023)

Apesar disso, muitas dificuldades foram apontadas, entre elas: a compreensão de conceitos novos e abstratos; o entendimento do diagrama de energia dos orbitais moleculares; a estrutura das moléculas e a falta de base de química no ensino médio. As dificuldades apontadas fazem sentido, considerando que se trata de um conteúdo bastante abstrato e que está relacionado à Mecânica Quântica. Além disso, trata-se de uma abordagem completamente diferente daquela que está enraizada na mente dos estudantes. Por exemplo, um aluno afirmou ter dificuldade em visualizar os orbitais ao nível macroscópico e seu funcionamento real. Isso é um demonstrativo de que os alunos têm dificuldade na abstração que a mecânica quântica exige, além de não compreender que os orbitais são um resultado gráfico de uma função matemática e que podemos estimar seu formato espacial através de softwares computacionais desenvolvidos para plotar funções matemáticas. Porém, o orbital não é um observável físico que possa ser medido experimentalmente, desse modo, não é possível “visualizar” os orbitais, uma vez que eles são apenas representações gráficas de uma função matemática que descreve o estado quântico de um elétron num átomo. De toda forma, os orbitais ocupam um papel de destaque dentro da química, sendo utilizados para uma compreensão mais aprofundada e detalhada da estrutura quântica da matéria.

A partir dos signos utilizados pelos discentes em suas respostas, foi possível perceber na prática algumas das dificuldades apontadas pelos alunos. Os dados coletados indicam que os significados que estão de acordo com o ponto de vista científico não foram devidamente

estabilizados. Por exemplo, os alunos tiveram dificuldade em explicar a formação das ligações químicas, independente da abordagem escolhida.

5.1 ANÁLISE, IDENTIFICAÇÃO E CLASSIFICAÇÃO DOS SIGNOS

A análise a seguir será apresentada dividindo os dois grupos de participantes. Como já afirmado, o questionário foi útil para identificar uma série de dificuldades de aprendizagem e erros conceituais. Tal resultado pode refletir possíveis problemas de abordagens do conteúdo em sala de aula ou uma falta de base de conceitos básicos para estruturação de noções advindas da mecânica quântica. De toda forma, como são estudantes que já passaram pelas disciplinas que abordam o conteúdo, foi possível identificar uma não estabilização dos significados, visto que aparentemente os estudantes conseguiram nota suficiente para passar na disciplina, mas, meses depois, não conseguem mobilizar o conhecimento que foi aprendido. Essa identificação foi possível graças aos signos que foram classificados nas respostas dos estudantes, os quais refletiam significados diferentes daqueles que são aceitos dentro do contexto científico.

No que diz respeito aos signos, os estudantes majoritariamente utilizaram-se da linguagem escrita para responder, ou seja, signos de natureza simbólica. Poucos estudantes utilizaram signos simbólicos que representassem modelos, esquemas ou processos. Além disso, também não foi observada com frequência a utilização de ícones e índices. O uso majoritário da linguagem escrita para responder às questões pode apontar para uma dificuldade em se recorrer a outros tipos de signos simbólicos, icônicos e indexais para explicar os fenômenos abordados. Essa dificuldade pode estar relacionada a um problema de interpretação e aprendizagem de esquemas, fórmulas químicas moleculares, gráficos e outros modelos úteis na explicação de fenômenos em nível quântico.

5.1.1 Análise das respostas dos discentes do Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia

A partir das mais variadas respostas dos alunos de Ciência e Tecnologia, é possível perceber que, por vezes, os alunos se prenderam a certos tipos de ligação química. Por exemplo, de forma geral observou-se o uso equivocado de conceitos, como o de ligação covalente. A quinta questão do questionário foi direcionada à explicação da formação de ligações químicas. Na Figura 9, é possível notar uma conceituação equivocada, quando um

dos discentes (Participante A) escreve “a forma dos compostos interagirem”; o que está acontecendo, na verdade, é a interação dos átomos, combinando-se e formando ligações químicas. Isso indica uma possível confusão entre conceitos básicos como elemento, composto e mistura. Na segunda resposta, outro discente (Participante B) responde de forma genérica, afirmando que as ligações químicas são responsáveis pela formação de moléculas. De fato, pode ocorrer a formação de uma molécula, mas não necessariamente apenas moléculas, considerando que existem compostos iônicos e metálicos. Do total de 17 respostas, 13 apresentaram dificuldade de conceituação sobre a formação de uma ligação química ou se prenderam a um tipo específico de ligação química.

Figura 9 – Concepções dos estudantes sobre a formação de ligações químicas (Participante A acima e B abaixo)

5. Como você explicaria a formação de ligações químicas?

É a forma dos compostos de interagirem entre si, para adquirir estabilidade.

5. Como você explicaria a formação de ligações químicas?

São responsáveis pela formação das moléculas (através da combinação de átomos)

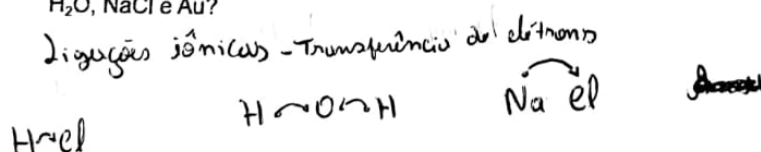
Fonte: Dados da pesquisa (2023)

Ainda em relação às ligações químicas, mas sobre o caráter representacional delas, na sexta questão, foi solicitado que os alunos representassem a ligação química entre os átomos de alguns compostos. Oito alunos de Ciência e Tecnologia tiveram problemas de interpretação da questão e/ou dificuldade para representar as ligações químicas que foram estabelecidas entre os compostos fornecidos. Além disso, existiu uma notável dificuldade para representar a ligação metálica, que não foi representada por nenhum aluno; e também foram misturadas diferentes representações, como é possível notar a partir dos signos utilizados na Figura 10 (Participantes C e D). A seta, utilizada em algumas representações, é um signo simbólico, que, tratando-se de uma ligação química, indica a transferência de elétrons de um átomo para outro. A transferência de elétrons, de modo simplificado, é característica de ligações iônicas.

A partir das respostas, é possível observar que a seta também foi utilizada para representar ligações covalentes em ambas as respostas. O ouro, por sua vez, só teve o seu símbolo representado. A ligação metálica poderia ter sido representada a partir de um diagrama de bandas (Figura 7), por exemplo.

Figura 10 – Representações propostas para diferentes compostos (Participante C acima e Participante D abaixo)

6. Como você representaria a ligação química entre os átomos dos seguintes compostos: HCl, H_2O , NaCl e Au?



6. Como você representaria a ligação química entre os átomos dos seguintes compostos: HCl, H_2O , NaCl e Au?



Fonte: Dados da pesquisa (2023)

Ao solicitar aos discentes para relacionar propriedades e/ou aplicabilidade da TOM com dados experimentais das moléculas, mesmo que as perguntas direcionassem os alunos, de certo modo, para a utilização da TOM na justificativa das perguntas, os alunos de Ciência e Tecnologia não utilizaram a teoria para explicar ou se detiveram apenas aos dados experimentais disponibilizados nas questões. Quatro alunos citaram conceitos relacionados à TOM, mas sem conseguir estabelecer ligações ou justificativas satisfatórias, como mostrado na Figura 11, na qual, em sua resposta, o participante E provavelmente estava se referindo ao cálculo da ordem de ligação (Eq. 4). É importante ressaltar que para realizar o cálculo da ordem de ligação, além de necessitar da fórmula, também é necessário montar um diagrama de energia dos orbitais moleculares, de modo que se possa saber quais elétrons estão nos orbitais ligantes e quais estão nos orbitais anti-ligantes.

Figura 11 – Relações entre a teoria e dados experimentais (Participante E)

7. Como é possível prever, teoricamente, o comprimento da ligação (mais curta ou mais longa, por exemplo)? Relacione com os dados experimentais: CH (109 pm) e do OH (98 pm).

Provavelmente com a TOM porém não lembro a fórmula. $r_{OH} = 2 \cdot (CH - OH)$

Fonte: Dados da pesquisa (2023)

Afinal como os alunos do BICT viram esse assunto já no 1º período, eles poderiam ter simplesmente relacionado o menor comprimento de ligação da ligação OH com a maior força de ligação e, de alguma forma, com a formação de orbitais moleculares ligantes (OML) de menor energia.

De modo geral, os alunos de Ciência e Tecnologia mostraram fazer certas conexões nas perguntas feitas no questionário e ter certa memória de conceitos referentes ao conteúdo, porém havia muitos conceitos equivocados estabelecidos, como foi mostrado em algumas das respostas. Essas dificuldades podem ter muitos motivos, como o fato de que muitos alunos não tiveram uma boa base em química no ensino médio. Na disciplina de Estrutura da Matéria alguns conceitos foram revisitados, mas modificar conceitos previamente estabelecidos na estrutura cognitiva dos estudantes é uma tarefa difícil. Principalmente considerando que a aprendizagem é baseada na “decoreba” para realização de atividades avaliativas, o que acaba por dificultar a modificação e estabilização de novos significados.

5.1.2 Análise das respostas dos discentes de Química-Licenciatura

Já no curso de Química-Licenciatura, quatro alunos explicaram a formação de uma ligação química a partir da TOM (Figuras 12 e 13). Os outros oito alunos, no entanto, escolheram não responder e/ou utilizaram explicações sobre a formação da ligação química de ensino médio. Além disso, também foi possível notar conceitos errados na elaboração das respostas.

Figura 12 – Concepções dos estudantes sobre a formação de ligações químicas (Participante F)

5. Como você explicaria a formação de ligações químicas?

Através da interação entre os elétrons presentes nos orbitais de cada molécula que buscam a estabilidade interagindo e formando ligações que melhor se adequam ao modelo mais estável de energia.

Fonte: Dados da pesquisa (2023)

As ligações químicas, de fato, acontecem a partir de interações favoráveis energeticamente entre os elétrons e os núcleos diretamente envolvidos, ou seja, a força de repulsão entre os elétrons na distância ótima de ligação é superada pela força de atração entre os núcleos e elétrons envolvidos. A consequência matemática da TOM é a formação de orbitais moleculares ligantes com energia sempre menor do que a energia dos orbitais atômicos dos átomos isolados. Algumas outras respostas dadas pelos discentes indicam signos que foram estabilizados erroneamente ou parcialmente, como por exemplo, explicar a formação de ligação química apenas como uma combinação de átomos para formação de moléculas.

Figura 13 – Concepções dos estudantes sobre a formação de ligações químicas (Participante G)

5. Como você explicaria a formação de ligações químicas?

- As ligações químicas acontecem a nível de orbitais atômicos ou moleculares.
- Também existem as lig. iônicas, covalentes e metálicas.

Fonte: Dados da pesquisa (2023)

É possível perceber que o discente quis utilizar a TOM para explicar a formação de uma ligação química, mas sem se aprofundar na sua justificativa. Ao complementar com “também existem as lig. iônicas, covalentes e metálicas”, nos permite inferir que o discente não conseguiu relacionar os orbitais moleculares como uma forma de explicar a formação desses tipos de ligações. Comumente, essa teoria é aplicada a ligações covalentes. Estendendo-se a ligações metálicas – sob o nome de Teoria de Bandas – e pode ser aplicada a ligações iônicas (MIESSLER, 2014; HOUSECROFT; SHARPE, 2012). Vale ressaltar que

atualmente, não deveria haver necessidade dessa divisão tão rígida entre os tipos de ligação química em estudos mais avançados, como em cursos de química. Essa divisão entre os tipos de ligação vem de uma simplificação planejada para a utilização de modelos bem simples e restritos para cursos de química e/ou ciências do ensino fundamental ou de disciplinas mais superficiais do ensino superior.

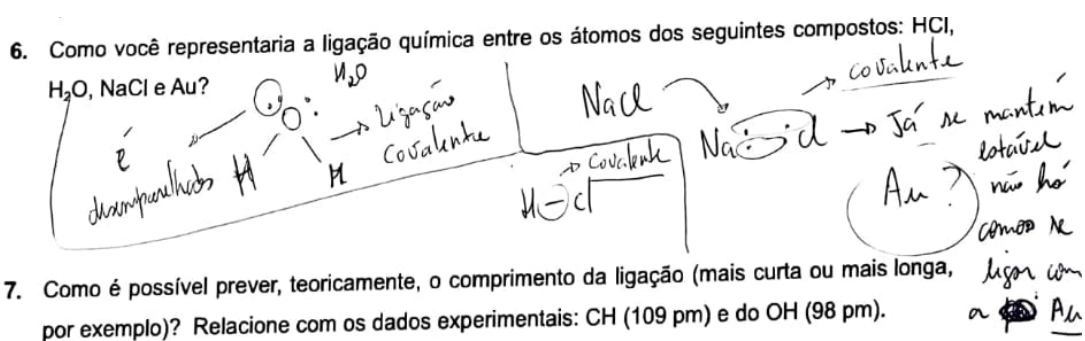
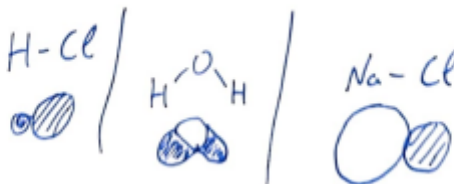
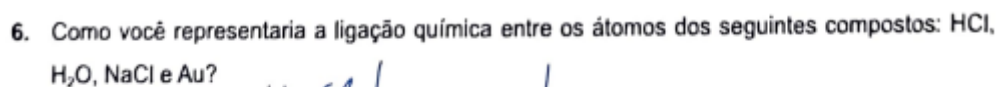
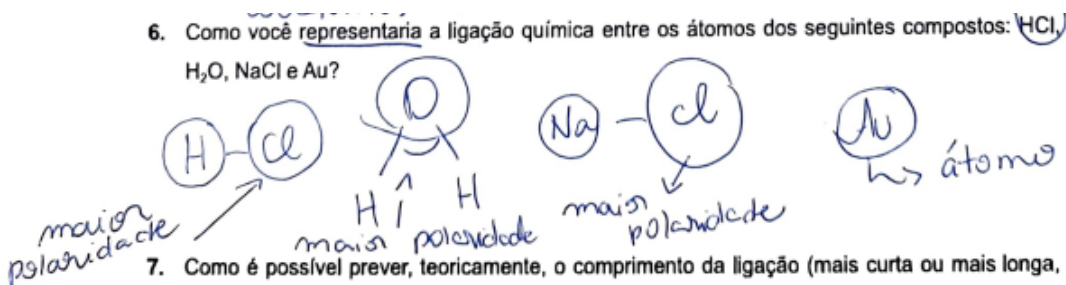
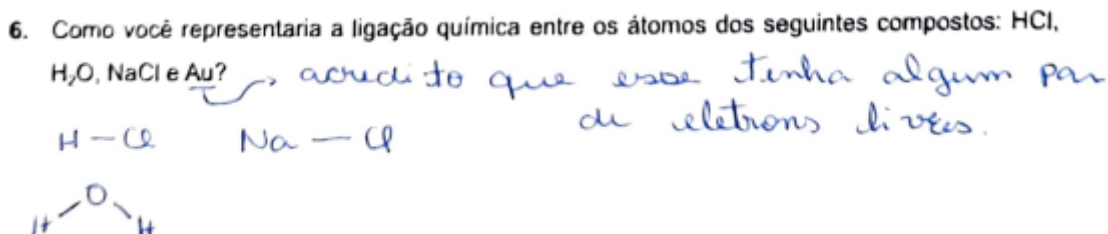
Na Figura 14, há respostas relacionadas à representação da ligação química em alguns compostos. Como é possível perceber, a ligação entre o sódio e o cloro foi representada erroneamente, na qual os participantes H, I, J e K utilizaram uma representação direcionada a ligações covalentes para representar uma ligação que é predominantemente iônica. Já em relação à ligação química presente no ouro, ou não foi representada ou foi indicado que se tratava apenas de um átomo (consequentemente não teria uma ligação química estabelecida). Na quarta resposta, referente ao participante K, é interessante perceber a utilização de setas com legendas para indicar signos simbólicos na química, ou seja, signos que foram estabelecidos por convenções, como os pares eletrônicos. Isso pode ser um indicativo de que, apesar de ser uma convenção na química, o signo não se estabilizou completamente para a pessoa, havendo uma necessidade de complementar com a utilização de outros signos.

É interessante notar que o participante H, na Figura 14, colocou a legenda “acredito que tenha algum par de elétrons livres” referente ao ouro. As ligações metálicas, por vezes, são pouco trabalhadas ou resumidas a um “mar de elétrons”, sendo, nessa representação, os elétrons livres responsáveis pela condutividade elétrica característica das ligas metálicas. De todo modo, o discente não conseguiu fazer a representação de uma ligação metálica. As ligações, em sua maioria, foram representadas a partir de signos simbólicos.

Na resposta do participante I (segunda resposta) é possível perceber que houve uma mescla de signos icônicos e simbólicos também, na qual os elementos químicos foram representados a partir de suas respectivas simbologias, mas também foram feitos círculos de diferentes tamanhos para representar os diferentes átomos, caracterizando assim signos icônicos. Na terceira resposta, contudo, o participante J utilizou dois tipos diferentes de signos para representar as ligações químicas; além dos signos simbólicos, que são convenções, foram utilizados também signos icônicos. Os signos icônicos são aqueles que representam seu objeto por semelhança visual ou de propriedades (SILVA, 2007). Sendo assim, os círculos de diferentes tamanhos e tracejados são signos icônicos, uma vez que foram utilizados para representar os átomos de diferentes elementos químicos e a formação de ligações químicas. Na quarta resposta, referente ao participante K, apareceu ainda, a representação de elétrons,

que também trata-se de um símbolo, uma vez que, na Química, convencionou-se que pontos distribuídos ao redor de um átomo são utilizados para representar seus elétrons de valência.

Figura 14 – Representações propostas para diferentes compostos (Participantes H, I, J e K de cima para baixo)



Fonte: Dados da pesquisa (2023)

As respostas obtidas indicam que poucos significados foram estabilizados acerca dos orbitais moleculares e, tratando-se de um grupo de alunos que está em um curso específico de química e em períodos bem mais avançados do que o grupo de estudantes analisados anteriormente (5.1.1), esperava-se respostas mais completas. Mesmo assim, alguns conceitos

errôneos referentes à formação de ligações químicas foram apresentados, o que mais uma vez pode recair na questão da ‘decoreba’, fazendo com que esses conceitos básicos acabem caindo no esquecimento rapidamente em consequência do modo como foram estudados.

5.1.3 Relação entre as respostas

De modo geral, é notável que há muitos conceitos equivocados estabelecidos na mente dos estudantes. Mesmo que você estude e veja o conteúdo sob outra perspectiva, com o passar do tempo, vai caindo no esquecimento e os signos previamente estabelecidos são retomados.

Há hipóteses que podem ser levantadas quanto a essa dificuldade dos discentes em relacionar a Teoria do Orbital Molecular com as perguntas realizadas, que, muitas vezes, foram respondidas sem justificativas plausíveis. Isso pode se justificar, por exemplo, pela dificuldade dos alunos em entender e interpretar o diagrama de energia dos orbitais moleculares, que é um instrumento de extrema importância que permite retirar várias respostas das perguntas contidas no questionário.

Além disso, é possível justificar algumas dessas falhas considerando que algumas pessoas que responderam ao questionário tiveram contato com o conteúdo há bastante tempo; enquanto outras estão em um curso que não é voltado para a aprendizagem de química especificamente. Sem contar que, pela complexidade do conteúdo, ver esse tópico apenas uma vez não se mostra o suficiente para entender e modificar concepções previamente estabelecidas.

Nas respostas, como foi possível perceber, foram encontrados erros conceituais tanto referentes aos termos utilizados quanto aos conceitos que foram usados erroneamente nas justificativas dadas pelos participantes da pesquisa. Na Figura 15, há um demonstrativo disso, na qual o participante L confunde os termos “elétrons” e “íons”, que, apesar de serem coisas diferentes, o aluno estabeleceu como equivalentes. Outro exemplo, é quando o participante M fala sobre “receber mais moléculas para se estabilizar”. Em momento algum, em uma ligação química, está acontecendo o recebimento de moléculas para estabilização; o que acontece é justamente a formação de moléculas ou compostos como modo de estabilizar. Isso acontece no nível dos elétrons.

Figura 15 – Relações entre a teoria e dados experimentais (Participantes L e M)

8. Os orbitais moleculares permitem prever a força de uma ligação. Considere: NO^- , NO e NO^+ . Qual dessas moléculas/ions forma a ligação mais fraca? Justifique.

NO^+ , devido a ter menos 1 π bond, portanto uma ligação π

8. Os orbitais moleculares permitem prever a força de uma ligação. Considere: NO^- , NO e NO^+ . Qual dessas moléculas/ions forma a ligação mais fraca? Justifique.

NO devido ao fato de que ele precisa receber mais moléculas para se estabilizar

Fonte: Dados da pesquisa (2023)

Ninguém tentou justificar o comprimento da ligação e a força da ligação baseada na ordem de ligação. Ainda que, de certo modo, muitas justificativas estivessem relacionadas, como ao considerar apenas a perda ou o ganho de elétrons como indicativo da mudança do tamanho da ligação. O ganho e a perda de elétrons estão relacionados com o comprimento e a força da ligação – como indicado por Barros (1992), a TOM permite obter respostas que estão relacionadas com as variações de comprimento e de energia de ligação a partir da perda ou ganho de elétrons.

As perguntas 7, 8 e 9 do questionário foram direcionadas a relacionar dados experimentais com a TOM. Pretendia-se que os discentes fossem capazes de utilizar os meios de TOM que permitem prever o comprimento e a força de uma ligação – isso poderia ser realizado a partir da utilização de um diagrama de energia de orbitais moleculares, a distribuição eletrônica e o cálculo da ordem de ligação. Como essas perguntas não geraram resultados satisfatórios e passíveis de análise a partir dos objetivos do trabalho, as poucas – e insatisfatórias – respostas dessas perguntas não foram incluídas na análise. Entretanto, vale salientar que, majoritariamente, tratavam-se de perguntas mais complexas, o que pode ter ocasionado essa falta de respostas. Além disso, como mencionado anteriormente, por vezes, os alunos se detiveram aos dados fornecidos nas perguntas, o que também pode estar atrelado ao nível de dificuldade dessas questões.

É importante, ainda, analisar os resultados obtidos a partir da décima pergunta. Diferentemente das perguntas anteriores, nela, foram fornecidos dois diagramas de energia de

orbitais moleculares e os participantes da pesquisa deveriam escolher o mais apropriado para descrever a formação da molécula de gás oxigênio (O_2) e, em seguida, responder questões sobre o caráter magnético da molécula, o porquê dela não absorver na região do infravermelho e o porquê dos diferentes diagramas indicados na questão. Essa análise, portanto, deve ser dividida em duas partes:

- 1) escolha do diagrama e distribuição eletrônica; e
- 2) respostas dos questionamentos.

Do total de 29 participantes da pesquisa, apenas 13 realizaram a distribuição eletrônica (seja correta ou incorretamente), sendo seis de Ciência e Tecnologia e sete de Química. Além disso, entre as respostas, é possível perceber muitos erros nas distribuições eletrônicas realizadas, como na Figura 16. O oxigênio tem seis elétrons na sua camada de valência, sendo dois no orbital 2s e quatro no orbital 2p, contudo o participante H só representou dois elétrons nos orbitais atômicos de cada oxigênio que participa da formação da molécula de O_2 . Sendo assim, um indicativo da dificuldade apontada pelos discentes nessa questão de compreensão dos diagramas de energia.

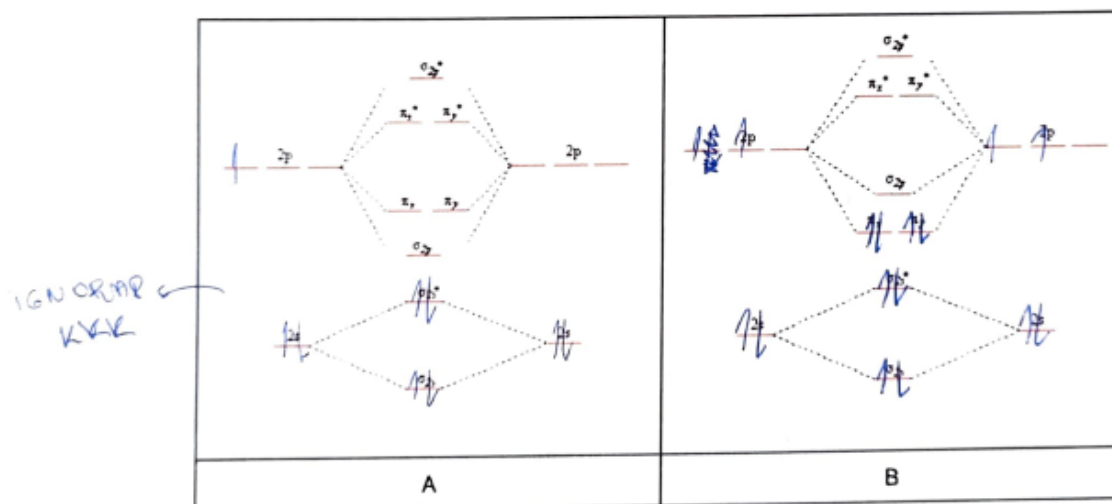
A partir do diagrama é que seria possível responder os questionamentos acerca do caráter magnético da molécula, por exemplo. Os discentes, em sua maioria, escolheram não preencher os diagramas disponibilizados ou preencheram parcialmente apenas. Considerando que os diagramas são signos icônicos muito importantes no processo de significação dos orbitais moleculares, a não utilização de diagramas por parte dos participantes da pesquisa pode ter dificultado ainda mais a resposta das questões 7 até a 10. Os diagramas de energia permitem obter informações sobre a ligação, energias e reatividade química do composto (ROZENTALSKI; PORTO, 2018). Em um diagrama de energia temos muitos signos simbólicos, como os elétrons representados por setas e convencionou-se que $\uparrow\downarrow$ representam elétrons emparelhados e $\uparrow$ representa um elétron desemparelhado. Além disso, temos os orbitais (atômicos e moleculares), que na Figura 16 são representados pelos traços vermelhos. Cada orbital possui um símbolo específico, mas resumidamente, são classificados em orbitais σ e π (orbitais moleculares ligantes) e σ^* e π^* (orbitais moleculares antiligantes - que são indicados pela presença de asterisco).

Ainda em relação à resposta do participante H, mas sobre os outros questionamentos da décima questão, o discente não tinha memórias acerca do caráter magnético da molécula (que é determinado a partir dos elétrons emparelhados ou desemparelhados nos orbitais HOMO – *highest orbital molecular occupied*, que em português é orbital molecular ocupado de maior energia) e também sobre a questão da molécula não absorver na região do

infravermelho. Tratando-se das diferenças representacionais entre os dois gráficos fornecidos (que há uma inversão de orbitais moleculares), o participante relacionou à eletronegatividade do oxigênio.

Figura 16 – Resposta da décima questão (Participante H)

10. Qual dos dois diagramas você acha mais apropriado para descrever abaixo a formação da molécula de O_2 . (O tem $Z = 8$)? Faça a distribuição dos elétrons no diagrama.



a) Qual é o caráter magnético dessa molécula? Por quê?

NÃO HEMBR

b) Por que essa molécula não absorve na região do infravermelho?

NÃO HEMBR.

c) Por que os gráficos acima apresentam diferenças na sua representação?

ACHO QUE PENA ELETRONEGATIVIDADE DO OXIGÊNIO, HÁ MUDANÇA NO DIAGRAMA

Fonte: Dados da pesquisa (2023)

De modo geral, a partir das respostas obtidas, é possível notar a dificuldade que os estudantes tiveram em estabilizar significados referentes à formação de ligações químicas e à aplicação da Teoria do Orbital Molecular para obtenção de informações sobre os compostos dados. Ou seja, os estudantes têm muitas concepções e elaborações conceituais equivocadas.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

De modo geral, pelo caráter exploratório e qualitativo da pesquisa, muitas respostas foram deixadas de fora. No total, foram 245 respostas de 290 perguntas. Por não se tratar de uma pesquisa quantitativa e sim uma pesquisa qualitativa, apenas algumas respostas foram selecionadas para a análise. Contudo, de certo modo, as respostas apresentaram um padrão – referindo-se às concepções errôneas dos estudantes, como foi apresentado no tópico de resultados e discussão.

Os dados obtidos vão de encontro ao que Nakhleh (1992) afirmou em relação à modificar a natureza do problema e, conseqüentemente, o aluno não conseguir responder. Sendo assim um indicativo de que não houve aprendizagem de fato.

Desse modo, os resultados da pesquisa permitem a abertura de caminhos para pensar tanto em alternativas de ensino desse conteúdo em trabalhos futuros, mas também pensar na forma que a química está sendo lecionada e se está sendo efetiva. A discussão acerca desse tópico é muito complexa, mas não deixa de ser importante e imprescindível visando uma melhoria significativa no modelo educacional brasileiro. Ainda que a pesquisa tenha sido feita localmente, foi possível perceber um padrão – que já havia sido notado por Feynman (1985) muitas décadas atrás. Isso permite que o estudo seja levado em frente em outras instituições e outras localidades, seja focado no conteúdo dos orbitais moleculares ou não. Uma ressalva importante é que eu faria mudanças significativas no questionário a ser aplicado. Mantendo, contudo, o caráter de todas as perguntas. Talvez até ampliaria, para coletar dados sobre aspectos que passaram despercebidos, como questões sobre a utilização de softwares computacionais, considerando que trata-se de uma estratégia de comunicação (Figura 2) que pode ser utilizada para auxiliar no processo de significação do conteúdo.

A Semiótica de Peirce foi um instrumento essencial na pesquisa, considerando que se partiu do pressuposto de que signos surgem ao se retomar um conteúdo. A partir da identificação e análise dos signos presentes nas respostas pudemos obter conclusões sobre a aprendizagem dos discentes. Além disso, os signos estão presentes por toda parte e são muito úteis para compreender o caráter representacional da química. Sendo assim, os signos foram uma ferramenta importante para identificar e analisar as respostas. Assim como para atribuir significado às simbologias e expressões utilizadas pelos alunos. Os signos que apareceram, devido à natureza do conteúdo, foram signos icônicos e simbólicos. A maior parte dos signos

utilizados foram signos simbólicos, uma vez que estes aparecem na escrita durante todo o processo de significação e também nas representações simbólicas.

Identificando-se os principais tópicos e problemas que os alunos enfrentam na significação de um conteúdo, é possível trabalhar em cima disso. Sendo assim, em trabalhos futuros, poderia ser explorada a utilização de softwares computacionais como estratégia de comunicação e ferramenta de ensino e aprendizagem desse conteúdo e como esses softwares poderiam auxiliar na estabilização de significados dos conceitos referentes à estrutura da matéria.

No mais, a proposta dessa pesquisa é justamente ser algo provocador. Ao se objetivar analisar a aprendizagem sobre um tópico tão importante quanto as bases da estrutura da matéria e se concluir que pouca ou quase nenhuma aprendizagem aconteceu de fato, evidencia-se a necessidade de mudanças. A culpa não pode, no entanto, recair-se apenas sobre o modo de ensino dos professores ou o modo de aprendizagem dos alunos. É um problema estrutural da educação no Brasil.

REFERÊNCIAS

- AS IMAGENS da química. Disponível em:
<https://www.ciceco.ua.pt/?menu=335&language=eng&tabela=geral>. Acesso em: 17 dez. 2021.
- ANDRADE, M. M. **Introdução à Metodologia do Trabalho Científico**. 10. ed. São Paulo: Ed. Atlas, 2010.
- BARROS, H. **Química Inorgânica: uma introdução**. Belo Horizonte: Ed. UFMG, 1992.
- BOAUYAD, A. KADDARI, F. LACHKAR, M.; ELACHQAR, A. Quantum Model Chemical Bonding: Barriers and Learning Difficulties. **Procedia-Soc. Behav. Sci.**, v. 116, pp. 4612–4616, fev. 2014. Disponível em:
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877042814010118>. Acesso em: 17 out. 2022.
- BRINGLE, R. HATCHER, J. Reflection in Service Learning: Making Meaning or Experience. **Evaluation/Reflection**, v. 23, 1999. Disponível em:
<https://digitalcommons.unomaha.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=1024&context=slceeval>. Acesso em: 06 fev. 2023.
- FEYNMAN, R. **Só pode ser brincadeira, Sr. Feynman**. 1. ed. Rio de Janeiro: Intrínseca, 2019.
- FOCK, V. Z. Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. **Physik**, v. 61, n. 126, 1930.
- GIL, A. C. **Métodos e técnicas de Pesquisa Social**. 6. ed. São Paulo: Editora Atlas, 2008.
- GOIS, J. GIORDAN, M. Semiótica na Química: a teoria dos signos de Peirce para compreender a representação. **Química Nova na Escola**, n. 7, dez. 2007. Disponível em:
https://www.academia.edu/23774245/Semiótica_na_química_a_teoría_dos_signos_de_Peirce_para_compreender_a_representação. Acesso em: 23 ago. 2022.
- HALL, G. G. The Molecular Orbital Theory of Chemical Valency. VIII. A Method of Calculating Ionization Potentials. **Proc. Roy. Soc. A**, 205, 541, 1951.
- HARTREE, D. R. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. **Proc. Cambridge. Phil. Soc.**, v. 24, n. 89, 1928.
- HOFFMANN, R. LASZLO, P. Representation in Chemistry. **Angewandte Chemie**, v. 30, n. 1, 1991.
- HOUSECROFT, C. E. SHARPE, A. G. **Inorganic Chemistry**. 4. ed. England: Pearson Education, 2012.

HUND, F. Z. Zur Deutung der Molekelspektren. IV. **Physik**, v. 51, n. 759, 1928.

IGNELZI, M. Meaning-Making in the Learning and Teaching Process. **New Directions for Teaching and Learning**, n. 82, 2000. Disponível em:

<https://pressbooks.uiowa.edu/app/uploads/sites/215/2021/06/Ignelzi-Meaning-Making.pdf>.

Acesso em: 06 fev. 2023.

JENSEN, F. **Computational Chemistry**. New York: John Wiley & Sons, 1999.

MIESSLER, G. L. *et al.* **Química Inorgânica**. 5. ed. São Paulo: Pearson Education, 2014.

MORTIMER, E. F. O significado das fórmulas químicas. **Química nova na escola**, n. 3, maio 1996. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc03/conceito.pdf>. Acesso em: 17 dez. 2021.

MULLIKEN, R. S. The Assignment of Quantum Number of Electrons in Molecules. I. **Phys. Rev.**, v. 32, 1928.

MULLIKEN, R. S. Electronic States and Band Spectrum Structure in Diatomic Molecule. VII. **Phys. Rev.**, v. 32, 1928.

MULLIKEN, R. S. The Assignment of Quantum Number of Electrons in Molecules. II. Correlation of Molecular and Atomic Electron States. **Phys. Rev.**, v. 32, 1928.

NAKHLEH, M. Why Some Students Don't Learn Chemistry. **J. Chem. Educ.**, v. 69, n. 3, 1992. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ed069p191>. Acesso em: 29 mar. 2023.

NÖTH, W. **Panorama da semiótica**: de Platão a Peirce. 2. ed. São Paulo: Ed. Annablume, 1998.

ROOTHAAN, C. C. J. New Developments in Molecular Orbital Theory. **Rev. Mod. Phys.**, v. 23, pp. 69-89, 1951.

ROQUE, Maria Isabel. Design, a outra ciência dos signos. A.muse.arte, 07 nov. 2015.

Disponível em: <<https://amusearte.hypotheses.org/1075>>. Acesso em: 31 maio. 2023.

ROZENTALSKI, E. PORTO, P. A. Imagens de orbitais em livros didáticos de Química Geral no século XX: uma análise semiótica. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 20, n. 1, pp. 181-207, 2015. Disponível em: <https://ienci.if.ufrgs.br/index.php/ienci/article/view/65>. Acesso em: 20 set. 2022.

ROZENTALSKI, E. PORTO, P. A. Diagramas de energia de orbitais em livros didáticos de Química Geral: uma análise sob o viés da semiótica Peirceana. **Ciênc. Educ.**, v. 24, n. 2, pp. 449-466, 2018. Disponível em:

<https://www.scielo.br/j/ciedu/a/FQwGQrBMr9TKGcBxzBytm3N/abstract/?lang=pt>. Acesso em: 20 set. 2022.

SANTAELLA, L. **O que é semiótica?** São Paulo: Brasiliense, 1983.

SANTOS, J. SILVA, J. A construção de significados do conceito de solubilidade consoante a mediação semiótica: uma análise a partir de uma intervenção didática. **Experiências em**

Ensino de Ciências, v. 14, n. 3, 2019. Disponível em: <https://fisica.ufmt.br/eenciojs/index.php/eenci/article/view/235>. Acesso em: 19 abr. 2023.

SHRIVER, D. F. ATKINS, P. W. **Química Inorgânica**. 3. ed. Bookman, 2003.

SILVA, A. J. H. **Metodologia da pesquisa científica**: conceitos gerais. Universidade Estadual do Centro-Oeste. Paraná: Gráfica Unicentro, 2017.

SILVA, J. G. **Desenvolvimento de um ambiente virtual para estudo sobre representação estrutural em química**. 2007. Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007. Disponível em: <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/81/81132/tde-23042013-123423/pt-br.php>. Acesso em: 20 out. 2022.

SILVA, J. R. R. T. **Memória e aprendizagem: construção de significados sobre o conceito de substância química**. 2018. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2018. Disponível em: <https://repositorio.ufpe.br/handle/123456789/30378>. Acesso em: 20 out. 2022.

SLATER, J. C. The Theory of Complex Spectra. **Phys. Rev.**, v. 34, 1929.

SLATER, J. C. Cohesion in Monovalent Metals. **Phys. Rev.**, v. 35, 1930.

PARTANEN, L. Student-centred active learning approaches to teaching quantum chemistry and spectroscopy: Quantitative results from a two-year action research study. **Chem. Educ. Res. Pract.**, v. 19, pp. 885–904, maio 2018.

PEIRCE, C. S. **Semiótica**. 4. ed. São Paulo: Perspectiva. 2010.

TABER, K. S. Learning quanta: Barriers to stimulating transitions in student understanding of orbital ideas. **Sci. Ed.**, v. 89, pp. 94–116, 2005.

THE ORBITRON. Disponível em: <https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>. Acesso em: 17 out. 2022.

WARTHA, E. J. REZENDE, D. B. OS NÍVEIS DE REPRESENTAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA E AS CATEGORIAS DA SEMIÓTICA DE PEIRCE. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 16, n. 2, pp. 275-290, 2011. Disponível em: <https://www.if.ufrgs.br/cref/ojs/index.php/ienci/article/view/230>. Acesso em: 17 dez. 2021.

WARTHA, E. J. REZENDE, D. B. As representações no ensino de química na perspectiva da semiótica peirceana. **Chemical Education in Point of View**, v. 1, n. 1, 2017. Disponível em: <https://revistas.unila.edu.br/eqpv/article/view/886>. Acesso em: 11 ago. 2022.

WARTHA, E. J. REZENDE, D. B. A elaboração conceitual em química orgânica na perspectiva da semiótica Peirceana. **Ciênc. Educ.**, v. 21, n. 1, pp. 49-64, 2015. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/ciedu/a/Yr6gdcwP6GZdhGntLL3cvRy/?lang=pt>. Acesso em: 10 ago. 2022.

ZITTOUN, T. BRINKMANN, S. Learning as Meaning Making. **Encyclopedia of the Sciences of Learning**, pp. 1809-1811, 2012. Disponível em: <https://core.ac.uk/download/pdf/20657132.pdf>. Acesso em: 15 set. 2022.

APÊNDICE A – QUESTIONÁRIO APLICADO PARA COLETA DE DADOS

Este questionário é importante para o desenvolvimento da pesquisa referente ao Trabalho de Conclusão de Curso de Danielle B. de Sousa, discente de Química-Licenciatura na UFPE/CA.

1. Qual é o seu curso? Você se encontra em qual período?

2. Marque as disciplinas que você já cursou (é necessário que você tenha finalizado a disciplina e sido aprovado nela).

- ☐ Química Geral II
☐ Introdução à Química Quântica
☐ Estrutura da Matéria

3. Você gostou dessa(s) disciplina(s) e/ou do conteúdo referente aos orbitais moleculares?

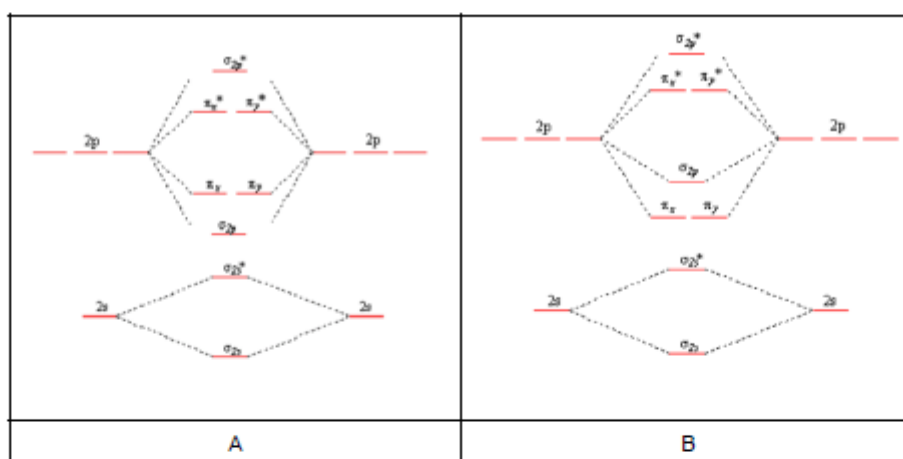
4. O que você considera que foram suas maiores dificuldades quando estava estudando conteúdos referentes aos orbitais moleculares?

5. Como você explicaria a formação de ligações químicas?

6. Como você representaria a ligação química entre os átomos dos seguintes compostos: HCl, H₂O, NaCl e Au?

7. Como é possível prever, teoricamente, o comprimento da ligação (mais curta ou mais longa, por exemplo)? Relacione com os dados experimentais: CH (109 pm) e do OH (98 pm).

8. Os orbitais moleculares permitem prever a força de uma ligação. Considere: NO^- , NO e NO^+ . Qual dessas moléculas/íons forma a ligação mais fraca? Justifique.
9. O tamanho da ligação I - I no I_2 (fase gasosa) é 267 pm, enquanto no íon $[\text{I}_3]^+$ é 268 pm e no íon $[\text{I}_3]^-$ é de 290 pm. Como você justificaria, teoricamente, esses resultados experimentais?
10. Qual dos dois diagramas você acha mais apropriado para descrever abaixo a formação da molécula de O_2 . (O tem $Z = 8$)? Faça a distribuição dos elétrons no diagrama.



- a) Qual é o caráter magnético dessa molécula? Por quê?
- b) Por que essa molécula não absorve na região do infravermelho?
- c) Por que os gráficos acima apresentam diferenças na sua representação?

ANEXO A – EMENTA DE QUÍMICA GERAL II



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA PARA ASSUNTOS ACADÊMICOS
DIRETORIA DE DESENVOLVIMENTO DO ENSINO**

PROGRAMA DE COMPONENTE CURRICULAR

TIPO DE COMPONENTE (Marque um X na opção)

☒ Disciplina ☐ Atividade complementar ☐ Monografia	☐ Prática de Ensino ☐ Módulo ☐ Trabalho de Graduação
--	---

STATUS DO COMPONENTE (Marque um X na opção)

☒ OBRIGATÓRIO	☐ ELETIVO	☐ OPTATIVO
---	----------------------------------	-----------------------------------

DADOS DO COMPONENTE

Código	Nome	Carga Horária Semanal		Nº de Créditos	C. H. Global	Período
		Teórica	Prática			
QUIM0080	Química Geral II	60		4	60	3

Pré-requisitos	QUIM0076 Química Geral I	Co-Requisitos		Requisitos C.H.	
----------------	-----------------------------	---------------	--	-----------------	--

EMENTA

Cinética química. Modelos atômicos e teoria atômica. Tabela periódica e propriedades periódicas. Ligação Química (iônica, covalente e metálica). Interações intermoleculares. Sólidos e Líquidos. Química Nuclear.

OBJETIVO (S) DO COMPONENTE

Introduzir os conceitos gerais da Química. Interpretar, quantitativamente e qualitativamente os fenômenos químicos. Estudar as leis básicas que regem a cinética química, a teoria atômica moderna, as ligações

químicas e os princípios da radioatividade. Reconhecer os conceitos fundamentais de Química Geral, integrando-os com aspectos do cotidiano.

METODOLOGIA

A dinâmica das aulas será desenvolvida em aulas expositivas (quadro e *data show*), com discussão e apresentação utilizando modelos atômicos. Exercícios de verificação de aprendizagem e resolução de listas de exercícios.

Todas as atividades serão apoiadas na bibliografia básica e estarão referidas a uma bibliografia de apoio.

AVALIAÇÃO

A avaliação se processará por meio de provas escritas, exercícios, frequência e outras atividades.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1 – CINÉTICA QUÍMICA

- 1.1 – Velocidade de reação;
- 1.2 – Leis de velocidade e ordem de reação;
- 1.3 – Leis integradas de primeira e de segunda ordem. Tempo de meia-vida;
- 1.4 – Modelos de reações; Efeito da temperatura; Teoria das colisões; Teoria do complexo ativado; Reações elementares; Velocidade e equilíbrio; Catálise.

2 – MODELOS ATÔMICOS E TEORIA ATÔMICA

- 2.1 – Teoria atômica moderna;
- 2.2 – Lei de Planck; Efeito fotoelétrico;
- 2.3 – Espectroscopia atômica;
- 2.4 – Modelo de Bohr; Dualidade onda-partícula;
- 2.5 – Estrutura eletrônica dos átomos. Orbitais atômicos.

3 – TABELA PERIÓDICA

- 3.1 – Classificação dos elementos;
- 3.2 – Propriedades e tendências periódicas.

4 – LIGAÇÕES QUÍMICAS

- 4.1 – Ligação iônica;
- 4.2 – Ligação covalente;
 - 4.2.1 – Geometria molecular;
 - 4.2.2 – Teoria da ligação de valência e Teoria do orbital molecular.

5 – FORÇAS INTERMOLECULARES E ESTADOS FÍSICOS DA MATÉRIA (SÓLIDOS E LÍQUIDOS)

ANEXO B – EMENTA DE INTRODUÇÃO À QUÍMICA QUÂNTICA



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA PARA ASSUNTOS ACADÊMICOS
DIRETORIA DE DESENVOLVIMENTO DO ENSINO**

PROGRAMA DE COMPONENTE CURRICULAR

TIPO DE COMPONENTE (Marque um X na opção)

☒ Disciplina ☐ Atividade complementar ☐ Monografia	☐ Prática de Ensino ☐ Módulo ☐ Trabalho de Graduação
--	---

STATUS DO COMPONENTE (Marque um X na opção)

☒ OBRIGATÓRIO
 ☐ ELETIVO
 ☐ OPTATIVO

DADOS DO COMPONENTE

Código	Nome	Carga Horária Semanal		Nº de Créditos	C. H. Global	Período
		Teórica	Prática			
QUIM0106	Introdução à Química Quântica	30		2	30	8

Pré-requisitos	QUIM0098 Químico-Física II	Co-Requisitos		Requisitos C.H.	
----------------	-------------------------------	---------------	--	-----------------	--

EMENTA

Princípios da mecânica quântica. Estrutura atômica e espectros atômicos. Estrutura molecular.

OBJETIVO (S) DO COMPONENTE

Introduzir os conceitos da Teoria Quântica. Estudar as aplicações da Teoria Quântica à estrutura atômica e estrutura molecular.

METODOLOGIA

A dinâmica do componente curricular será desenvolvida por meio de aulas teóricas expositivas, utilizando quadro branco e Datashow, com discussão do conteúdo e resolução de exercícios. Sendo também a dinâmica das aulas complementadas por consulta bibliográfica, por parte dos alunos, a bibliografia básica.

AValiação

O processo de avaliação da disciplina será realizado por meio de provas escritas, listas de exercícios e frequência.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1 – TEORIA QUÂNTICA: INTRODUÇÃO E PRINCÍPIOS

- 1.1 – Falhas da mecânica clássica;
- 1.2 – Dualidade partícula-onda;
- 1.3 – O princípio da incerteza;
- 1.3 – A equação de Schroedinger;
- 1.4 – Interpretação de Born para a função de onda.

2 – TEORIA QUÂNTICA: SISTEMAS MODELOS

- 2.1 – Partícula numa caixa;
- 2.2 – Movimento em duas ou três dimensões;
- 2.3 – Oscilador harmônico;
- 2.4 – As funções de onda do oscilador harmônico;
- 2.5 – Rotação em duas dimensões;
- 2.6 – Rotação em três dimensões.

3 – ESTRUTURA ATÔMICA E ESPECTROS ATÔMICOS

- 3.1 – Estrutura e espectros dos átomos hidrogenóides;
- 3.2 – Estruturas dos átomos poli-eletrônicos;

4 – Estrutura Molecular

- 4.1 – Teoria da ligação de valência;
- 4.2 – Teoria do orbital molecular.

ANEXO C – EMENTA DE ESTRUTURA DA MATÉRIA



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO PRÓ-REITORIA PARA ASSUNTOS ACADÊMICOS DIRETORIA DE DESENVOLVIMENTO DO ENSINO

PROGRAMA DE COMPONENTE CURRICULAR

TIPO DE COMPONENTE

☒ Disciplina ☐ Atividade Complementar ☐ Trabalho de Graduação	☐ Estágio ☐ Módulo
---	---

STATUS DO COMPONENTE

☒ OBRIGATÓRIO	☐ ELETIVO	☐ OPTATIVO
---	----------------------------------	-----------------------------------

Código	Nome	Carga Horária		Nº. de Créditos	C. H. Global	Período
		Teórica	Prática			
NICEN	Introdução à Estrutura da Matéria	60	00	04	60	1º

Pré-requisitos		Co-Requisitos		Requisitos C.H.	
----------------	--	---------------	--	-----------------	--

EMENTA

Adquirir conhecimento, intuição e habilidade matemática em situações físicas envolvendo: Radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico e efeito Compton; Modelos atômicos e níveis de energia dos átomos com base na teoria quântica; Princípio de Incerteza de Heisenberg; Dualidade onda-partícula; A equação de Schrödinger; Solução de potenciais simples utilizando a equação de Schrödinger e suas consequências; As soluções da equação de Schrödinger para o átomo de Hidrogênio; Números quânticos e níveis de energia da estrutura atômica; Spin e princípio de exclusão de Pauli e regras de seleção; Descrição de átomos por meio da teoria quântica; Teoria da ligação de valência; Teoria do Orbital Molecular; Tipos de interações entre as moléculas; Interações moleculares em gases, líquidos e sólidos; Propriedades físicas de líquidos e sólidos com base nas interações entre seus constituintes; Materiais Inorgânicos; Materiais para as novas tecnologias.

Estima-se que o aluno tenha um número de 04 horas semanais de trabalho extraclasse para um bom aproveitamento da disciplina.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Bases experimentais da Teoria Quântica. Quantização de Energia e Momento Angular. Modelo de Bohr. Dualidade onda-partícula. Relação de incerteza de Heisenberg. Equação de Schrödinger: função de onda, soluções de potenciais unidimensionais simples. Tunelamento. O átomo de Hidrogênio. Números quânticos, níveis de energia, spin e princípio de exclusão de Pauli. Fundamentos Quânticos de ligação química; Teoria da ligação de valência; Teoria do Orbital Molecular; Interações intermoleculares; Introdução à física da matéria condensada: Estruturas Cristalinas, Teoria de bandas e propriedades dos materiais. Materiais Inorgânicos e o planejamento de materiais para novas tecnologias; As formas de estruturação da matéria, suas consequências e aplicações tecnológicas.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA