



Orbital atômico: modos de conceituar e ensino

Marcio Matos Lima^{1*}, José Luís de Paula Barros Silva²

¹Mestrando do Programa do Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências UFBA/UEFS, Salvador/Feira de Santana, Bahia/Brasil; ²Professor da Universidade Federal da Bahia, Departamento de Físico-Química, Salvador, Bahia/Brasil. *marciolimatos@yahoo.com.br.

Recebido em: 30/03/2019 Aceito em: 15/04/2019 Publicado em: 31/05/2019

RESUMO

Este trabalho teve como objetivo compreender os modos de conceituar orbital atômico por estudantes do Curso de Química de uma Universidade do Nordeste do Brasil, após seu ensino em disciplinas introdutórias de Química Geral e Química Orgânica. Adotamos como referencial teórico a Teoria Histórico-Cultural e os conceitos Matemático e Físico-Químico de orbital atômico, ambos empregados na Química e no Ensino de Química. Encontramos três modos de conceituar orbital atômico, os quais denominamos: modo Matemático, modo Físico-Químico, modo Híbrido. Houve predominância do modo Físico-Químico, supostamente pela maior influência do ensino da Química Orgânica, no qual é empregado. Também se pode supor que sua maior concretude contribua para a maior aprendizagem. Notamos a falta de clareza dos estudantes a respeito da existência de dois conceitos referentes ao termo orbital atômico. Aqueles que tinham percepção das características dos dois conceitos procuraram fundi-las no modo Híbrido de conceituar. Alguns estudantes revelaram pouco conhecimento do conceito. Tais resultados apontam a necessidade de mais atenção ao ensino introdutório do orbital atômico, de tornar explícita a existência de seus dois conceitos e da relação entre os mesmos.

Palavras-chave: Orbital atômico. Modos de conceituar. Ensino de química.

Atomic orbital: conceptualize modes and teaching

ABSTRACT

This work had as objective to comprehend atomic orbitals conceptualize modes by students of Chemistry Course of a Brazil Northeastern University, after its teaching in General Chemistry and Organic Chemistry introductory disciplines. We adopt as theoretical basis Historical-Cultural Theory and the Mathematical and Physical-Chemical concepts of atomic orbital, both used in Chemistry and Chemistry Teaching. We found three atomic orbitals conceptualize modes, which we named as Mathematical mode, Physical-Chemical mode and Hybrid mode. There was predominance of Physical-Chemical mode, supposedly by major influence of Organic Chemistry teaching, in which is employed. Also, is possible to suppose that its major concreteness contributes to major learning. We noted student's lack of clarity about the existence of two concepts concerning the term atomic orbital. Those who had perception of both concepts characteristics try to blend them in Hybrid conceptualize mode. Some students reveal small knowledge of the concept. Such results aims the need of plus attention to introductory teaching of atomic orbital, to make explicit the existence of their two concepts and their relations.

Keywords: Atomic orbital. Conceptualize modes. Chemistry teaching.

INTRODUÇÃO

Muitos conceitos científicos são ensinados no curso de Química e, em sua maioria, são apresentados pelo professor, definidos (quando isso é possível) ou

trabalhados de um modo distante do cotidiano extraescolar do aluno. Dentre tais conceitos o de **orbital atômico** é fundamental para o entendimento da estrutura atômica e molecular, da teoria de ligações químicas, na explicação de mecanismos de reação, entre outros aspectos da Química.

A literatura de Ensino de Química, porém, revela uma controvérsia acerca do ensino do conceito de orbital, tanto nas disciplinas introdutórias do Curso de Química, quanto no Ensino Médio.

De acordo com Morwick (1979), há dois tipos de objeções ao ensino dos orbitais: (1) que o conceito é muito abstrato e deve ser ensinado de modo matematicamente rigoroso; e (2) que se deve ensinar uma Química mais realista: propriedades de materiais, fontes de matérias-primas etc.

Um exemplo dessa oposição pode ser encontrado no trabalho de Bent (1984), o qual advoga que o ensino dos orbitais em cursos introdutórios conduz à aprendizagem mecânica e não produz conhecimento acerca do que a ciência Química é. O autor propõe que o ensino da Química deveria se debruçar inicialmente aos fatos químicos para depois entrar na Química Quântica.

Ogilvie (1990) questiona a existência dos orbitais logo no subtítulo do seu trabalho. Para ele, todo o espaço dedicado aos orbitais e seus derivativos, presentes nos livros didáticos de Química, prejudica o currículo e o tempo de aula, mais do que ensina. Tomando como ponto de partida a ideia de que a importância social da Química se deve aos materiais que produz, defende que este deve ser o foco do ensino, em lugar das moléculas, que seriam de importância secundária. Portanto, o estudo da teoria quântica e a explicação das estruturas e das propriedades dos entes moleculares deveriam ser ensinados em nível mais avançado que o inicial.

Gillespie (1991) também considera que orbitais híbridos e moleculares, assim como outros tópicos são muito abstratos, logo, desnecessários e difíceis para um curso introdutório, embora reconheça sua importância para a formação do químico. Para ele, os conceitos teóricos abordados na Química Geral devem ser os necessários para o estudante fazer um bom curso de Química Inorgânica e Orgânica, mas não, para as disciplinas mais avançadas da Química, que devem ser ensinados mais adiante.

Em defesa do ensino dos orbitais no Ensino Médio, Morwick (1979, p. 262) chama a atenção para o fato de que “a ciência é uma disciplina que exigem um monte de raciocínio abstrato”, em qualquer nível. Logo, esse argumento é inaceitável deixar fora de discussão os modelos atômicos modernos e os avanços que proporcionam. Então a questão não é em que nível ensinar os orbitais, mas, como ensiná-los em cada nível.

Pauling (1992, p. 519), advoga que a química introdutória na universidade “deve enfatizar os aspectos mais simples da estrutura molecular em relação às propriedades das substâncias”. Como temas importantes para esses estudantes, ele defende o ensino das estruturas eletrônicas dos átomos, enfatizando a estrutura do gás nobre, a ligação através do compartilhamento do par de eletrônico, no átomo de carbono tetraédrico, na eletronegatividade, no caráter iônico parcial das ligações químicas e na ideia de ressonância aplicada a molécula do benzeno.

Defendemos que no início do Curso de Química sejam ensinados os conceitos aprendidos no Ensino Médio de forma mais aprofundada, com uma perspectiva

histórica e epistemológica da Química. O conceito de orbital deveria ser ensinado a partir do 2º ano do curso (considerando um curso de 4 anos).

A literatura de Ensino de Química também revela que os estudantes costumam apresentar concepções equivocadas de orbital atômico, às vezes, relacionadas a uma concepção realista ingênua. Tsaparlis e Papaphotis (2009) relatam que alguns alunos tomaram o termo *orbital* como sinônimo de *órbita*, permanecendo com ideias da velha teoria quântica, concebendo os elétrons girando em torno do núcleo atômico, como os planetas ao redor do sol. Muitos alunos não conseguiram perceber a natureza probabilística de orbitais, assumindo uma perspectiva determinista do movimento eletrônico. Para outros, os orbitais eram únicos e representavam um espaço fixo e delimitado. Por fim, entenderam que os orbitais de átomos hidrogenóides eram também válidos para átomos de muitos elétrons.

Taber, (2004) verificou que, mesmo após estudarem o conceito de orbital, estudantes continuavam utilizando a regra do octeto para explicar a ligação química. Dentre as razões para esse comportamento, estão: a dificuldade em formar um conceito adequado de orbitais de elétrons; confusões com as denominações de orbitais; e falta de distinção clara entre orbitais moleculares e orbitais atômicos. A pesquisa aponta para o uso do termo orbital pelos estudantes como substituto para órbitas. Nesse caso - como também verificado por Tsaparlis e Papaphotis (2009) - o ensino prévio serviu como um obstáculo de aprendizagem, pois o modelo atômico de orbitais não conseguiu suplantar o modelo planetário de Bohr.

Autschbach, (2012) destaca que mesmo após terem sido expostos a teoria dos orbitais, os estudantes de química apresentam alguns equívocos conceituais como: considerar o orbital como algo real, os orbitais como elétrons, que orbitais e energia orbital são observáveis. Esses equívocos podem ser percebidos nas discussões científicas elaboradas por eles, principalmente nas explicações de ligações químicas e no uso das energias de orbitais.

Em vista dessa problemática, este trabalho buscou compreender os modos de conceituar orbital de estudantes do Curso de Química de uma Universidade do Nordeste do Brasil, após seu ensino introdutório em disciplina de Química Geral.

TEORIA HISTÓRICO-CULTURAL

De acordo com a Teoria Histórico-Cultural (VIGOTSKI, 2009), o desenvolvimento intelectual atinge a fase dos conceitos por duas vias, dando origem aos conceitos espontâneos e científicos.

Conceitos científicos são aprendidos por meio do ensino, explicitando-se as características do conceito sistematicamente, durante o qual as experiências para o ensino são planejadas a fim de produzir determinados resultados: é esperado que um estudante que aprendeu um conceito de modo científico saiba explicitá-lo e justificar seu emprego em situações diversas.

Conceitos espontâneos são aprendidos por meio de experiências vividas espontaneamente - sem planejamento - com finalidade diversa da aprendizagem, durante as quais se aprendem os termos conceituais e como são empregados. Um

estudante que apende um conceito espontaneamente pode ter dificuldades para explicá-lo e justificar seu emprego.

A aprendizagem de um conceito científico inicia pelo termo conceitual, passa pela compreensão de seu emprego em situações diversas, pela compreensão e verbalização das características do conceito e de suas relações de modo a formar um sistema, o qual possibilita que o emprego do conceito possa ser justificado e previsto em situações diferentes daquelas nos quais aprendeu-o. Trata-se de um processo complexo que requer o contato com o conceito em várias e diversas situações e, obviamente, exige um intervalo de tempo para ocorrer, ao longo do qual o conceito se desenvolve na consciência do aprendiz.

A aprendizagem espontânea de um conceito se limita ao termo conceitual e ao reconhecimento de situações nas quais pode ser usado. Similarmente, requer a experimentação do conceito em várias situações e demanda tempo de aprendizagem.

Os dois tipos de processos encontram-se intimamente conectados e são mutualmente influentes. A aprendizagem e o desenvolvimento dos conceitos científicos dependem das ações envolvidas na aprendizagem dos conceitos espontâneos, que podem ser utilizadas para a aprendizagem planejada. Inversamente, à medida que a formação de conceitos científicos se desenvolve, sua sistematização e conscientização atuam sobre os conceitos espontâneos, abrindo novas possibilidades. É o caso da melhoria na precisão e na articulação da linguagem do senso comum.

Segundo Vigotski (2009), a aprendizagem escolar e o desenvolvimento dos conceitos científicos dependem de um amadurecimento dos conceitos desenvolvidos fora da escola e dos conceitos aprendidos preliminarmente na escola. Por isso, em cada etapa do ensino, é importante sondar os conceitos trazidos pelo estudante antes de mergulhar no novo conceito, pois estes conceitos prévios servirão como mediadores da assimilação do sistema de novos conceitos científicos. Para tanto, é importante identificar o nível de desenvolvimento em que cada estudante se encontra a respeito do conceito que se vai ensinar: se reconhece e emprega o termo conceitual, se sabe explicitar as características do conceito, se sabe justificar seu emprego em dada situação com base nas características do conceito e da situação.

OS CONCEITOS DE ORBITAL ATÔMICO

No modelo atômico de orbitais, entende-se que os elétrons do átomo se distribuem em estados de movimento em volta do núcleo. A resolução matemática da equação de Schrödinger - que é a equação de movimento para sistemas quânticos - aplicada ao movimento eletrônico no átomo fornece um conjunto de funções de onda, representadas pela letra grega psi (Ψ), correspondentes aos seus possíveis estados e os respectivos valores de energia dos estados (BERRY, 1966).

O termo orbital foi introduzido por Robert S. Mulliken (1932, p. 50) como um modo abreviado para se referir a “função de onda orbital para um elétron”. Portanto, um primeiro conceito de orbital atômico é *função de onda para um elétron em um átomo*. Convém chamar a atenção para o fato de que orbital não deve ser confundido com órbita, posto que as trajetórias dos elétrons - seja no interior dos átomos ou em outras situações - não podem ser determinadas (BORN, 1954).

As funções de onda que correspondem aos estados dos átomos hidrogenóides podem ser escritas como um produto de três funções independentes de uma variável, cada, em um sistema de coordenadas esféricas: $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)$. As funções $R(r)$ e $\Theta(\theta)$ são reais, mas, $\Phi(\phi)$ é uma função imaginária para vários estados, produzindo uma função $\Psi^*(r,\theta,\phi)$ complexa, o que afasta a tentativa de considerá-la real (EISBERG; RESNICK,1994). Como a representação gráfica de uma função de três variáveis é impossível no espaço tridimensional, costuma-se representar a função de onda de um átomo hidrogenóide com a sua parte radial, $R(r)$, separada da parte angular, $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta).\Phi(\phi)$, cujo produto é denominado esférico harmônico. As funções $R(r)$ e $\Theta(\theta)$ são reais e $\Phi(\phi)$ pode ser real ou imaginária.

Segundo Born (1954), o produto $\Psi^*\Psi$ dá a densidade de probabilidade de encontrar o sistema em um elemento de volume dV situado no espaço, ou seja: $\Psi^*\Psi = dP/dV$. No caso do elétron num átomo, o produto $\Psi^*\Psi$ dá a densidade de probabilidade de encontrar o elétron em um elemento de volume dV em volta do núcleo atômico. A função de onda Ψ é fatorável em três funções de uma variável, cada, de modo que, o produto $\Psi^*\Psi$ também é fatorável em três produtos de funções de uma variável:

$$\Psi^*(r,\theta,\phi).\Psi(r,\theta,\phi) = R^2(r).\Theta^2(\theta).\Phi^*(\phi).\Phi(\phi)$$

ou

$$\Psi^*(r,\theta,\phi).\Psi(r,\theta,\phi) = R^2(r).Y^*(\theta,\phi)Y(\theta,\phi).$$

Como $dV: r^2.dr \text{ sen}\theta.d\theta d\phi$, a parte radial da função é interpretada como a densidade de probabilidade de encontrar o elétron em um elemento r^2dr em volta do núcleo atômico e, a parte angular, como a densidade probabilidade de encontrar o elétron em um elemento $\text{sen}\theta.d\theta d\phi$ em volta do mesmo núcleo. As representações gráficas da densidade de probabilidade de elétrons geram figuras que foram interpretadas como elementos de volume nos quais os elétrons, em cada estado, teriam probabilidade de serem encontrados no átomo (BORN, 1969).

A interpretação probabilística da função de onda gerou uma segunda conceituação de orbital atômico: “região do espaço em volta do núcleo” atômico ou “volume do espaço em volta do núcleo [atômico] onde o elétron tem maior probabilidade de ser encontrado” (McMURRY, 2005, p. 4). Tal região foi associada não apenas a um, mas, a dois elétrons.

Esse outro significado para o termo orbital atômico obteve muito sucesso na Química, tanto na pesquisa quanto no ensino, principalmente por seu uso nas explicações a respeito da formação de ligações químicas por superposição dessas regiões.

Concluindo, o termo orbital atômico pode ter dois conceitos:

(1) Conceito Matemático: **Função de onda correspondente ao estado de um elétron pertencente a um átomo.** As características do conceito são: função

matemática de onda; correspondência com estado de movimento do elétron; relação com apenas um elétron; o elétron deve pertencer a um átomo.

(2) Conceito Físico-Químico: **Região do espaço (volume) em volta do núcleo atômico onde há probabilidade de encontrar um ou dois elétrons**. Este conceito tem como características: ser parte (região, volume) do espaço; estar em volta do núcleo atômico; corresponder a valores de probabilidade de encontrar [o(s) elétron(s)]; relação com um ou dois elétrons.

METODOLOGIA

O trabalho empregou metodologia qualitativa para levantar os modos de conceituar dos alunos do Curso de Química de Uma Universidade do Nordeste do Brasil, a respeito do conceito de orbital atômico.

Foram escolhidos estudantes da disciplina Química Quântica, pois o conceito de orbital atômico faz parte do seu conteúdo. Esses estudantes já tinham entrado em contato com o tema em disciplinas anteriores de Química Geral, que é um dos requisitos para Química Quântica e em Química Orgânica. Na primeira, adota-se o Conceito Matemático e, na segunda, o Conceito Físico-Químico.

A turma era formada 37 estudantes de Licenciatura e Bacharelado em Química.

Foi aplicado um teste de sondagem contendo várias questões acerca de conceitos a serem ensinados durante o curso da disciplina e, entre elas, a questão cujas respostas nos interessam: **Se tivesse que explicar para alguém que não conhece um orbital atômico, o que diria?**

Antes da aplicação do teste de sondagem, os alunos foram informados e esclarecidos sobre o uso das respostas para fins de pesquisa e assinaram um Termo de Consentimento Livre e Esclarecido, juntamente com os pesquisadores. Também foi solicitado que procurassem informar aquilo que se lembrassem a respeito do orbital atômico, sem preocupação com a correção da resposta, pois esse material serviria como subsídio para as aulas vindouras, nas quais o conceito seria discutido.

As respostas obtidas tiveram seu conteúdo analisado (BARDIN, 1977) conforme o Conceito Matemático e o Conceito Físico-Químico de orbital atômico (ambos discutidos na seção anterior) buscando identificar: (a) os modos de caracterização de cada um dos conceitos de orbital atômico; (b) as relações entre as características de cada um desses conceitos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Era esperado que todos respondessem à questão, pois se tratava de um conceito estudado em disciplinas cursadas anteriormente e recorrente no semestre que os estudantes estavam cursando. As respostas dos estudantes foram classificadas de 5 modos:

- A. **Matemático**: quando as respostas continham apenas termos que expressavam ou lembravam as características do denominado Conceito Matemático, acima.
- B. **Físico-Químico**: quando as respostas continham apenas termos que expressavam ou lembravam as características do Conceito Físico-Químico.

- C. **Híbrido**: quando as respostas continham termos relacionados às características dos dois conceitos acima.
- D. **Outros**: quando as respostas apresentavam outros modos de conceituar orbital.
- E. **Não conceituaram**: quando os estudantes informaram não saber ou não lembrar do conceito de orbital.

O Quadro 1 mostra as quantidades de respostas em cada classe.

Quadro 1 – Classificação das respostas dos estudantes quanto ao modo de conceituar orbital

Modo de conceituar	Quantidade	Percentual
Matemático	8	22
Físico-químico	12	32
Híbrido	6	16
Outros	5	14
Não conceituaram	6	16
Total	37	100

A diferença na quantidade de estudantes que enunciaram o conceito de modo Físico-Químico sugere maior influência do ensino da Química Orgânica.

O fato de ninguém ter apresentado dois conceitos para orbital e a existência das respostas híbridas são indícios do desconhecimento da dupla conceituação de orbital pelos estudantes.

Discutiremos, inicialmente, o modo matemático de conceituar orbital. Apenas 4 estudantes se referiram às quatro características do Conceito Matemático de orbital, embora as relações entre as mesmas nem sempre estejam adequadas, conforme discutido adiante. Dois exemplos, são:

Orbital atômico é uma função de onda que descreve o comportamento do elétron no espaço.

Tentaria explicar dizendo que orbital é uma função de onda que descreve o movimento do elétron em torno do núcleo.

Parece-nos muito pouco em termos de aprendizagem, se considerarmos o esforço dispendido pelos estudantes no estudo e pelos professores no ensino. Há que refletir sobre o que não anda bem nessas atividades.

Quadro 2 - Termos empregados no modo matemático de conceituar orbital.

TERMOS CONCEITUAIS	Quantidade
Característica: Função matemática de onda	
É função de onda	6
É equação matemática	2

Característica: Correspondência com estado de movimento do elétron	
Descreve o movimento do(s) elétron(s)	3
Descreve o comportamento do elétron	1
Descreve propriedades do átomo	1
Característica: Relação com apenas um elétron	
[Relação com] O elétron	2
[Relação com] Elétrons	2
Característica: Elétron pertencente a um átomo	
Elétrons em torno do átomo	1
Elétrons em um átomo	1
Elétron no espaço	1
Elétron em torno do núcleo do átomo	1

O Quadro 2, acima, mostra os termos empregados na conceituação matemática de orbital atômico. Nas linhas com texto centralizado são citadas as características do Conceito Matemático que adotamos como referência.

Notamos que **função de onda** é o termo preponderante nessas respostas. De fato, a função de onda é citada em 30% das respostas. Isso pode ser creditado ao ensino da Química Geral, na qual adota-se o Conceito Matemático de orbital atômico, conforme consta na bibliografia indicada:

*As funções de onda de elétrons em átomos são chamadas de **orbitais atômicos*** (ATKINS; JONES, 2012, p. 23, grifo dos autores).

*Ao resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio encontra-se um conjunto de funções de onda e as energias correspondentes. Essas funções de onda são chamadas **orbitais*** (BROWN et al., 2005, p. 195, grifo dos autores).

Entretanto, 2 estudantes utilizaram a expressão **equação matemática**. Isso sugere que o caráter matemático do conceito foi aprendido por esses estudantes, mas, sem um vínculo muito forte com a terminologia da área. Como se sabe, uma equação matemática não corresponde a uma função matemática, de modo que, o termo é inadequado para conceituar orbital.

A correspondência entre o ente matemático e o estado de movimento do elétron não apareceu nas respostas. Apenas 5 dos 8 estudantes estabeleceram relação entre o ente matemático e o mundo físico-químico, considerando que a função de onda ou a equação matemática descreve algo (ver Quadro 2). São ideias equivocadas, pois não há como obter tais descrições (HEISENBERG, 1949). Contudo, Atkins e Jones (2012, p. 29) afirmam que “A localização de um elétron em um átomo é descrita por uma função de onda conhecida com orbital atômico” e Brown et al., (2005, p. 195) informam que as

funções de onda “descrevem a questão ondulatória do elétron” no átomo. Como tais obras constam da bibliografia da disciplina de Química Fundamental, não é de admirar que os estudantes tenham aprendido tais conceitos, afinal, foram orientados a fazê-lo.

Metade dos estudantes que conceituaram orbital atômico matematicamente não relacionou o conceito a um ou mais elétrons. Podemos supor que não recordassem desse vínculo ou que considerassem a independência do orbital em relação ao elétron. Ambas situações merecem atenção durante o ensino, porque se uma função de onda não estiver vinculada a um elétron, ela representa apenas um estado possível, mas, não provável.

Dois estudantes relacionaram o ente matemático com apenas um elétron. Esse é um aspecto positivo para o ensino do detalhamento do conceito de orbital. Outros dois relacionaram-no com elétrons, sem especificar quantidade, o que foge ao Conceito Matemático.

Por fim, a maioria das respostas não estabeleceu relação entre o elétron e um átomo, como se o termo orbital atômico pudesse ser aplicado a um elétron em qualquer situação. Podemos supor que os estudantes tenham abreviado a resposta por economia linguística, tomando o contexto como suposto e que sejam capazes de reconhecer as situações em que o termo é aplicável ao elétron. Apesar disso, é preciso chamar a atenção para o limite de aplicabilidade desse conceito.

O Quadro 3, abaixo, apresenta as expressões utilizadas pelos estudantes no modo físico-químico de conceituar orbital atômico. Nas linhas com texto centralizado são citadas as características do Conceito Físico-Químico que adotamos como referência.

Quadro 3 - Termos empregados no modo físico-químico de conceituar orbital atômico.

TERMOS CONCEITUAIS	Quantidade
Ser parte (região, volume) do espaço em volta do núcleo	
É uma região do espaço	1
Um local no espaço	2
Região / É a região	6
A casa [...], onde [...] está localizado	1
É o local	1
É a posição	1
Estar em volta do núcleo atômico	
[Local no] espaço atômico	1
[Elétron] na eletrosfera	1
Corresponder a valores de probabilidade de encontrar [o(s) elétron(s)]	
[Região/local] de/com/possui/tem/onde há maior probabilidade de encontrar [um/o elétron]	9
[Região] que é possível encontrar com certa probabilidade [o elétron]	1
[Posição] em que se encontra [o elétron]	1
Relação com um ou dois elétrons	
[Relação com] Um/O elétron	12

Apenas 2 estudantes se referiram às quatro características do Conceito Físico-Químico de orbital atômico, embora as relações entre as mesmas nem sempre sejam as esperadas, conforme discutido abaixo. Essas respostas, são:

É a região de maior probabilidade onde você pode encontrar um elétron, na eletrosfera.

Orbital atômico é um local no espaço atômico o qual possui maior probabilidade de encontrar um elétron.

O termo mais empregado foi **região** (7), embora apenas um estudante tenha explicitado se tratar de **região do espaço**. Nossa suposição é que tal especificidade tenha sido deixada implícita nas respostas, pois, durante as aulas, o termo foi empregado relativamente ao espaço, tanto pelo professor quanto pelos estudantes.

Outros dois termos utilizados foram: **local** (3) e **posição** (1) que, embora lembrem espaço, costumam ser empregados na Físico-Química para denotar um ponto do espaço, definido por um conjunto de valores de coordenadas espaciais, mas não, um volume do espaço.

Por fim, um estudante denominou orbital atômico de **casa** do elétron, expressão inadequada porque seu significado se aplica a seres vivos, e não, ao elétron.

Apenas 2 dos 12 estudantes que conceituaram orbital atômico de modo físico-químico indicaram que a região ou local se situava em volta do núcleo atômico (ver respostas citadas acima). Esse aspecto do conceito é importante, porque não se trata de um volume do espaço situado aleatoriamente, por onde um elétron possa estar transitando. É preciso enfatizar isso durante o ensino.

Note-se que tal característica dos orbitais atômicos também é negligenciada em livros de Química Orgânica, o que pode ser uma possível explicação da sua ausência nas repostas dos estudantes:

*Um **orbital** é a região do espaço onde a probabilidade de se encontrar um elétron é alta* (SOLOMONS; FRYHLE, 2012, p. 21, grifo do autor).

*A região no espaço onde um elétron é provável de ser encontrado é denominada um **orbital*** (MORRISON; BOYD, 2002, p. 6, grifo dos autores; tradução nossa).

Nove, das 12 respostas correlacionaram orbital atômico e a probabilidade de encontrar um elétron, entretanto, as explicações dessa relação variaram — região de / com / o qual possui / em que se tem / onde há probabilidade — caracterizando diferentemente a região ou local citada/o como sendo o orbital atômico.

A grande maioria (9/12) considerou que tal região/local/posição tal probabilidade é a maior. Não há razão teórica para tal afirmação, embora alguns autores, como Solomons e Fryhle (2012) usem a expressão “probabilidade [...] alta” na sua definição de orbital atômico (acima). São dois aspectos que merecem atenção no ensino: o que a região indica e como os valores de probabilidade de encontrar o elétron se distribuem pela região.

Todos os estudantes relacionaram orbital atômico com 1 elétron, apenas. Seria de esperar que relacionassem com 1 ou 2 elétrons.

No modo híbrido de conceituar orbital atômico, os estudantes juntaram características dos conceitos Matemático e Físico-Químico. O Quadro 4 mostra os termos empregados nesse modo de conceituação. Dois exemplos:

É a função matemática que determina o local mais provável de se encontrar elétrons ao redor do núcleo.

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

Quadro 4 - Termos empregados no modo híbrido de conceituar orbital atômico.

TERMOS CONCEITUAIS	Quantidade
É uma/a função de onda	3
É a função matemática	3
[Função] que determina o local	3
[Função] que representa uma determinada região no espaço	1
[Função] cuja interpretação permite saber a região	1
[O local] mais provável de se encontrar [os elétrons]	3
[Região] de probabilidade de localização [do elétron]	1
[Região] que apresenta probabilidade de encontrar [o elétron]	1
[Função] que tem uma maior probabilidade de se encontrar [o elétron]	1
[Relação com] um elétron	3
[Relação com] elétrons	3
[Elétrons] ao redor do núcleo	3
[Elétron] numa dada espécie química	1

Diferentemente dos quadros 2 e 3, não são apresentadas as características do conceito pelo fato de que não se emprega esse modo de conceituar orbital atômico na Química, nem no seu ensino.

A maior diferença entre o modo híbrido de conceituar e os modos matemático e físico-químico é entender orbital atômico como ente matemático (função de onda ou função matemática) relacionado a (que determina / que representa / cuja interpretação permite saber) uma região do espaço. Embora tal relação não esteja clara, existe, e é um bom ponto de partida para seu entendimento mais profundo.

Os demais aspectos desse tipo de resposta já foram comentados nas análises anteriores.

Um grupo de 5 estudantes conceituou orbital atômico de outros modos, empregando alguns termos conceituais dos conceitos Matemático e/ou Físico-Químico, porém, relacionados de incoerentemente com seus conteúdos e, portanto, produzindo resultados inadequados. Exemplos:

Diria que é o resultado da função de onda que descreve o movimento do elétron ao redor do átomo elevado ao quadrado.

Orbital atômico descreve as probabilidades características do átomo.

Os resultados mostram que, embora o conceito de orbital atômico tenha sido ensinado cientificamente nas disciplinas anteriores, sua aprendizagem se deu, ao menos em parte, espontaneamente, pelo fato de os estudantes não terem desenvolvido suas respostas no sentido de resolverem o problema posto pelo enunciado: explicar o orbital para alguém que desconhece o conceito.

As relações equivocadas entre características do orbital atômico indicam apropriação inadequada do seu sistema conceitual. A ausência de relações pode significar baixa conscientização desse conceito pois, de acordo com Vigotski (2009), essa ausência de sistematicidade dos conceitos científicos resulta em conceitos não conscientizados e não-voluntários.

Uma possível explicação para o fato de os estudantes apresentarem um uso inadequado dos termos relacionados aos conceitos de orbital atômico, pode ser atribuída ao tempo destinado ao seu ensino nas disciplinas de Química Fundamental e Química Orgânica. Dada a grande quantidade de conteúdo a ser ensinado, a discussão sobre orbital atômico se perde entre muitas outras, resultando em pouca aprendizagem dos estudantes. Seria necessária uma quantidade maior de exercícios de emprego do conceito de orbital atômico para facilitar sua memorização compreensiva.

Outro ponto a ser destacado é que os livros didáticos para o Ensino Superior não deixam claro que o termo **orbital atômico** possui dois conceitos, nem qual seja a relação entre os mesmos, contribuindo para que isso se reflita na sua assimilação e no seu uso por parte dos estudantes.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados nos dão uma visão geral de como o conceito de orbital atômico se encontrava na memória dos estudantes após seu ensino introdutório. Concluímos que os estudantes brasileiros apresentam dificuldades na aprendizagem introdutória do conceito de orbital atômico, semelhantes àsquelas de estudantes de outros países. As respostas à questão proposta revelam aspectos que precisam ser bem trabalhados no ensino de modo a esclarecer melhor esse conceito.

Pode-se concluir que os sistemas de conceitos relacionados aos dois conceitos de orbital atômico, conforme explicitado no referencial teórico, não estavam internalizados pelos estudantes.

O modo de conceituar físico-químico foi o mais utilizado pelos estudantes (22% das respostas) tinham algum termo relacionado a esse modo de conceituar. O termo mais empregado pelos estudantes foi **região**, que tem relação com o esse modo de conceituar e com a ideia de **região do espaço**. Pode-se supor que tal fato se prenda à concretude dessa noção e à maior influência do ensino da Química Orgânica, no qual é adotado.

Os estudantes que utilizaram o modo de conceituar matemático apresentaram respostas menos desenvolvidas, que evidenciaram maior falta de sistematicidade.

Ficou evidenciado que os estudantes não tinham clareza a respeito da existência de dois conceitos referentes ao termo orbital atômico, já que ninguém citou ambos. Aqueles que tinham alguma percepção a esse respeito, fundiram as características de ambos em um único conceito, no procedimento que denominamos modo híbrido de conceituar orbital atômico.

Os resultados também mostram que parte dos estudantes apresentou respostas de forma fragmentada e inadequada e, até, pouco conhecimento do conceito. Será preciso aprofundar o estudo para entender o que se passou nesses casos.

Enfim, tais resultados apontam a necessidade de maior atenção ao ensino introdutório do orbital atômico e a necessidade de tornar explícita a existência de seus dois conceitos e da relação entre os mesmos. Dada à importância do conceito de orbital, torna-se necessário uma reflexão a respeito da forma e do momento em que deve ser ensinado esse conceito, para que os estudantes tenham um maior contato com o conceito, de modo que o mesmo adquira lógica e possibilite um uso adequado.

BIBLIOGRAFIA

ATKINS, P.; JONES, L. **Princípios de química**: questionando a vida e o meio ambiente. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.

AUTSCHBACH, J. Orbitals: some fiction and some facts. **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 8, p. 1032-1040, 2012.

BARDIN, L. **Análise de conteúdo**. 3. ed. Lisboa: Edições 70, 1977.

BENT, H. A. Should orbitals be X-rated in beginning Chemistry courses? **Journal of Chemical Education**, v. 61, n. 5, p. 421, 1984.

BERRY, R. S. Atomic orbitals. **Journal of Chemical Education**. v. 43, n. 6, p. 283-299, 1966.

BORN, M. The statistical interpretation of quantum mechanics. **Nobel Lecture**, v. 11, p. 1942-1962, 1954.

BORN, M. **Atomic physics**. 8. ed. London: Blackie & Son, 1969.

BROWN, T. L.; LeMAY-JR., H. E.; BURSTEN, B. E. **Química**: a ciência central. 9. ed. São Paulo: Pearson/Prentice Hall, 2005

EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. 9. ed. Rio de Janeiro: Elsevier/Campos, 1994.

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

HEISENBERG, W. **The physical principles of the quantum theory**. Mineola: Dover, 1949.

McMURRY, J. **Química orgânica**. São Paulo: Thomson, 2005. v. 1.

MORRISON, R. T.; BOYD, R. N. **Organic chemistry**. 6. ed. New Delhi: Prentice-Hall of India, 2002.

MORWICK, J. J. Should orbitals be taught in high school? **Journal of Chemical Education**, v. 56, n. 4, p. 262, 1979.

MULLIKEN, R. S. Electronic structures of polyatomic molecules and valence. II. general considerations. **Physical Review**, v. 41, p. 49-71, 1932.

OGILVE, J. F. The nature of the chemical bond: there are no such things as orbitals! **Journal of Chemical Education**, v. 67, n. 4, p. 280, 1990.

PAULING, L. The nature of the chemical bond. **Journal of Chemical Education**, v. 69, n. 7, p. 519, 1992.

SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Química orgânica**. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012. v. 1.

TABER, K. S. Learning quanta: barriers to stimulating transitions in student understanding of orbital ideas. **Science Education**, v. 89, n. 1, p. 94-116, 2004.

TSAPARLIS, G; PAPAPHOTIS, G.: High school students' conceptual difficulties and attempts at conceptual change: the case of basic quantum chemical concepts, **International Journal of Science Education**, v. 31, n. 7, p. 895-930, 2009.

VIGOTSKI, L. S. **A Construção do pensamento e da linguagem**. 2. ed. São Paulo: WMF Martins Fontes, 2009.