



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAPÁ
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLÓGICA
CURSO DE LICENCIATURA QUÍMICA

JOSÉ MÁRIO MONTEIRO DOS SANTOS

**QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO DO CONCEITO DE ORBITAL
ATÔMICO: Uma Revisão Sistemática da Literatura.**

MACAPÁ
2026

JOSÉ MÁRIO MONTEIRO DOS SANTOS

**QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO DO CONCEITO DE ORBITAL
ATÔMICO: Uma Revisão Sistemática da Literatura.**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado a Coordenação do Curso de
Licenciatura em Química da Universidade
Federal do Amapá, como requisito da
disciplina de TCC2 e obtenção do Título
de Licenciado em Química.

Orientadora: Prof. Ma. Luciane Barros
Silva

Macapá

2026

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Biblioteca Central/UNIFAP-Macapá-AP
Elaborado por Cristina Fernandes – CRB-2 / 1569

Santos, José Mário Monteiro dos.
S237q Química computacional no ensino do conceito de orbital atômico: uma revisão sistemática da literatura. / José Mário Monteiro dos Santos. - Macapá, 2026.
1 recurso eletrônico.
60 f.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal do Amapá - UNIFAP, Coordenação do Curso de Graduação em Licenciatura em Química, Macapá, 2026.

Orientadora: Prof. Ma. Luciane Barros Silva.
Coorientador: Kelton Luis Belem dos Santos.

Modo de acesso: World Wide Web.
Formato de arquivo: Portable Document Format (PDF).

1. Estudo Quântico. 2. Química Computacional. 3. Ensino de Química. I. Silva, Luciane Barros, orientadora. II. Santos, Kelton Luis Belem dos, coorientador. III. Universidade Federal do Amapá - UNIFAP. IV. Título.

CDD 23. ed. – 540

JOSÉ MÁRIO MONTEIRO DOS SANTOS

**QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO DO CONCEITO DE ORBITAL
ATÔMICO: Uma Revisão Sistemática da Literatura.**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado a Coordenação do Curso de
Licenciatura em Química da Universidade
Federal do Amapá, como requisito da
disciplina de TCC2 e obtenção do Título
de Licenciado em Química.

Aprovado em: 04/03/2026

BANCA EXAMINADORA

Prof. Ma. Luciane Barros Silva
UNIFAP
(Orientadora)

Prof. Me. Madson Jonhe da Costa
Membro Externo
(Avaliador 1)

Prof. Dr. Joel Estevão de Melo Diniz
UNIFAP
(Avaliador 2)

Macapá

2026

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, Senhor de todas as coisas, por me ter proporcionado a graça da conclusão deste trabalho.

A minha Família que sempre esteve ao meu lado e que tanto contribuiu com minha caminhada acadêmica, em especial a minha Esposa Kathyany Azevedo que me deu todo o apoio e incentivo, sobretudo nos momentos difíceis.

A minha Orientadora Ma. Luciane Barros Silva, pelo o aceite, disponibilidade e orientações, que foram fundamentais em minha formação acadêmica.

A todos os acadêmicos de Licenciatura Plena em Química da Universidade Federal do Amapá, mais precisamente aos amigos turma 2016, aos quais, desejo muito sucesso em suas vidas. Agradeço de forma especial a meu Amigo Winter Moraes, pela partilha nas dificuldades e por toda a ajuda.

E a todos os Docentes do Curso de Licenciatura em Química, por compartilharem o saber, e contribuírem de forma significativa em minha formação e em tudo o que tenho a partilhar.

“Dê-me, Senhor, agudeza para entender,
capacidade para reter, método e faculdade
para aprender, sutileza para interpretar,
graça e abundância para falar, acerto ao
começar, direção ao progredir e perfeição
ao concluir”

(São Tomas de Aquino)

SUMÁRIO

RESUMO.....	08
1 INTRODUÇÃO	10
2 JUSTIFICATIVA	12
3 OBJETIVOS	12
3.1 OBJETIVO GERAL	12
3.2 OBJETIVOS ESPECIFICOS	12
4 METODOLOGIA	13
4.1 INTERDISCIPLINARIDADE E CONTEXTUALIZAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA ...	14
5 REFERENCIAL TEÓRICO	17
5.1 TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR	17
5.2 TEORIA DOS ORBITAIS MOLECULARES E A FORMAÇÃO DAS LIGAÇÕES QUÍMICAS.....	19
5.3 FORMAÇÃO DA MOLÉCULA DE HIDROGÊNIO: LIGAÇÃO SIGMA (Σ)	20
5.4 FORMAÇÃO DA LIGAÇÃO PI (Π)	20
5.5 DIAGRAMA DE ENERGIA MOLECULAR E ORBITAIS HOMO E LUMO	21
5.6 A QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO INSTRUMENTO PEDAGOGICO.....	22
5.7 A MODELAGEM CIENTIFICA, INSTRUMENTO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL E FERRAMENTA DE ENSINO	24
5.7.1 FUNDAMENTOS EPISTEMOLÓGICOS DA MODELAGEM CIENTÍFICA.....	24
5.7.2 MODELAGEM CIENTÍFICA FERRAMENTA DE ENSINO DA QUÍMICA COMPUTACIONAL	25
6 MATERIAIS E MÉTODOS.....	29
7 RESULTADOS DISCUSSÕES	32

7.1 - ANÁLISE QUANTITATIVA SOBRE OS TRABALHOS QUE ABORDAM O ESTUDO QUÂNTICO DO ORBITAL ATÔMICO NA PERSPECTIVA DA QUÍMICA COMPUTACIONAL	32
7.1.1 – ANÁLISE DE DADOS GERAIS, MAS SEM A INCLUSÃO DO BANCO DE DADOS BRASILEIRO DE TESES E DISSERTAÇÕES – BDTD	33
7.1.2 – ANÁLISE DE DADOS, RESTRITA A PUBLICAÇÕES BRASILEIRAS E SEM A INCLUSÃO DO BANCO DE DADOS BRASILEIRO DE TESES E DISSERTAÇÕES – BDTD	37
7.1.3 – ANÁLISE DE DADOS, INCLUINDO O BANCO DE DADOS BRASILEIRO DE TESES E DISSERTAÇÕES – BDTD, E RESTRITA A PUBLICAÇÕES BRASILEIRAS	40
7.2 – ANÁLISE DE DADOS, INCLUINDO O BANCO DE DADOS BRASILEIRO DE TESES E DISSERTAÇÕES – BDTD, E RESTRITA A PUBLICAÇÕES BRASILEIRAS, MAS COM FINALIDADE QUALITATIVA	43
7.2.1 - ANÁLISE QUALITATIVA DA MELHORIA NO ENSINO DE QUÍMICA ATRAVÉS DAS CONTRIBUIÇÕES DAS METODOLOGIAS COMPUTACIONAIS.....	49
7.3 – ANÁLISE RESTRITA DE QUANTOS TRABALHOS TRATAM DIRETAMENTE O TEMA, INCLUINDO O BANCO DE DADOS BRASILEIRO DE TESES E DISSERTAÇÕES – BDTD, E RESTRINGINDO A PUBLICAÇÕES BRASILEIRAS....	51
8 CONCLUSÃO.....	52
9 REFERÊNCIAS.....	55

RESUMO

A Teoria Quântica é reconhecida como a teoria de maior êxito em toda a ciência humana, no entanto, muitas condições, resultante de sua aplicação ainda são pouco exploradas nas salas de aula de Química do Ensino Médio e até nas Graduações. É baseado nessa premissa que estabelecemos como objetivo principal desse trabalho a elaboração um estudo teórico-analítico, através de revisão bibliográfica da literatura e análise epistemológica. Pretende-se, portanto, mensurar a contribuição da química computacional no ensino de Química, onde através do Estudo Quântico do Orbital Atômico na perspectiva da Química Computacional, será analisada a integração entre a Teoria quântica, a Modelagem Científica e ensino de Química. O estudo busca fundamenta teoricamente o uso de métodos computacionais como: Hartree–Fock e Teoria do Funcional da Densidade, como instrumentos mediadores da aprendizagem do conceito de orbital atômico. Os resultados indicam que a visualização computacional pode reduzir obstáculos epistemológicos e favorecer aprendizagem significativa do modelo quântico.

PALAVRAS-CHAVE: Estudo Quântico. Química computacional. Ensino de Química.

ABSTRACT

Quantum Theory is recognized as the most successful theory in all human science; however, many conditions resulting from its application are still little explored in high school chemistry classrooms and even in undergraduate studies. Based on this premise, this work aims to develop a theoretical-analytical study through a literature review and epistemological analysis. Therefore, it aims to measure the contribution of computational chemistry to chemistry teaching, where through the Quantum Study of the Atomic Orbital from the perspective of Computational Chemistry, the integration between Quantum Theory, Scientific Modeling, and Chemistry teaching will be analyzed. The study aims to theoretically ground the use of computational methods such as Hartree–Fock and Density Functional Theory as tools for mediating the learning of the atomic orbital concept. The results indicate that computational visualization can reduce epistemological obstacles and foster meaningful learning of the quantum model.

KEYWORDS: Quantum Study. Computational Chemistry. Chemistry Teaching.

1 INTRODUÇÃO

A constante busca por metodologias de ensino que visam uma maior aprendizagem dos conhecimentos abordados na disciplina de Química tem sido uma investigação permanente entre educadores de ensino e áreas de Ciências. O desafio é superar um ensino de Química que é apresentado muitas vezes aos educandos de forma descontextualizada, o que a torna desinteressante e sem dinamismo, pois baseia-se na metodologia da memorização e em uma cultura de ensino dogmática da Ciência, que não permite ser questionada em seus conteúdos em sala de aula. Segundo Bernadelli (2004), “uma boa parte dos alunos que entra no Ensino Médio traz consigo uma Química rotulada como difícil e complicada”, o que muitas vezes o impede de ver que essa ciência faz parte do seu cotidiano.

Sabemos que a química computacional tem se tornado uma valiosa ferramenta no ensino e aprendizagem de química, sendo possível oferecer abordagens mais acessíveis e de maior interação para os estudantes. Ela possibilita que os educandos compreendam conceitos químicos complexos de forma mais eficaz e clara, facilitando a aplicação prática dos conceitos e conhecimentos teóricos. Estudos comprovam que por meio da utilização de software de química computacional é possível ajudar a reduzir as dificuldades de ensino-aprendizagem de estudantes e aumentar a motivação pelo conhecimento do ensino de química.

A Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM) é fundamental para a compreensão da estrutura eletrônica das moléculas, sendo parte central da Química Quântica. No entanto, seu ensino tradicional apresenta dificuldades significativas, principalmente devido ao seu caráter abstrato e à complexidade matemática envolvida. Com o avanço das tecnologias digitais, a Química Computacional surge como uma importante aliada no ensino dessa teoria, permitindo a visualização, simulação e manipulação de orbitais moleculares de forma interativa. Na concepção de Bernardelli (2004), quanto mais integradas estiverem a prática, a teoria e a contextualização, mais significativa e motivadora se tornará a aprendizagem de Química, fazendo com que o aluno goste de estudar seus conteúdos. Somente por meio de uma metodologia de ensino diferenciada, será possível aos alunos perceberem que esses conteúdos são práticos, divertidos, interessantes, prazerosos e eficientes para a construção de um mundo mais participativo e cidadão.

Sobre o tipo de ensino a ser desenvolvido pelo docente, segundo as demandas da sociedade contemporânea, Chassot (2003) lembra que a transmissão

dos conhecimentos químicos deve ser encharcada na realidade, e isso não significa o reducionismo que virou modismo - Química do cotidiano -, mas sim o ensino de Química dentro de uma concepção que destaque o papel social dessa disciplina.

O problema central desta pesquisa consiste em compreender como a produção científica tem abordado a relação em química computacional e o ensino do conceito de orbital atômico. Assim este estudo caracteriza-se como uma revisão sistemática da literatura publicada entre 1990 e 2025.

2 JUSTIFICATIVA

A compreensão do conceito de orbital atômico representa um dos maiores desafios no ensino de Química, sobretudo em razão de sua natureza abstrata e da complexidade conceitual associada à Mecânica Quântica. Embora a Química Computacional tenha se consolidado como ferramenta fundamental na investigação científica contemporânea, sua inserção no campo educacional ainda demanda maior sistematização e análise crítica, especialmente no contexto brasileiro.

Nesse cenário, torna-se necessário mapear e analisar sistematicamente a produção científica nacional que relaciona Química Computacional e o ensino do conceito de orbital atômico. Assim, pretende-se saber quantos e quais trabalhos científicos abordam o estudo quântico do orbital atômico na perspectiva da Química Computacional, identificando suas abordagens metodológicas, contribuições pedagógicas e tendências de pesquisa.

Ao responder a essa questão, esta investigação busca organizar o conhecimento já produzido no Brasil sobre o tema, evidenciar possíveis lacunas na literatura e contribuir para o fortalecimento de práticas pedagógicas fundamentadas em evidências científicas. Dessa forma, a revisão sistemática proposta permite não apenas quantificar a produção existente, mas também analisar qualitativamente suas implicações para a formação docente e para o ensino de Química.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo geral:

Analisar por meio de revisão sistemática da literatura, as contribuições da Química Computacional para o ensino do conceito de orbital atômico.

3.2 Objetivos específicos:

- I) Observar através da química computacional, o ensino quântico do orbital atômico.
- II) Verificar a contribuição da química computacional no ensino de licenciatura em química na formação discente.
- III) Identificar possibilidades metodológicas com a utilização da química computacional.

4 METODOLOGIA

O estudo tem como objetivo propor o ensino de química com a utilização da modelagem científica através da química computacional, neste sentido apresentamos análises metodológicas como possibilidade de aulas da teoria do orbital Molecular TOM aplicando a química computacional. Este trabalho utiliza uma abordagem quantitativa/qualitativa com base em pesquisa bibliográfica e exploratória. A pesquisa foi realizada em artigos científicos, livros, dissertações e teses, disponíveis em bases de dados como SciELO, Google acadêmico, BDTD, CAPES Periódicos e outras literaturas.

No contexto atual, em que a ciência e a tecnologia estão profundamente interligadas, a Química Computacional surge como uma ferramenta pedagógica inovadora. Ela permite aos alunos visualizar e compreender fenômenos moleculares por meio de simulações digitais, contribuindo para a integração entre teoria e prática (MARTINS; SILVA; LOPES, 2020). Assim, o ensino de Química passa a incorporar estratégias que dialogam com o avanço científico e com o desenvolvimento de competências digitais.

A incorporação dessas tecnologias também contribui para a formação de competências previstas na BNCC, como o uso responsável e criativo das tecnologias digitais (BRASIL, 2018). Portanto, a Química Computacional não apenas potencializa a compreensão de conceitos, mas também prepara os alunos para o contexto científico e tecnológico contemporâneo.

Para Santos e Silva (2020), “O uso de simulações computacionais no ensino de Química favorece a visualização de fenômenos microscópicos e contribui para a compreensão de conceitos abstratos.” Neste sentido a aprendizagem em Química torna-se mais efetiva quando o estudante participa ativamente do processo, estabelecendo relações entre conceitos científicos e situações do cotidiano. (SANTOS; SCHNETZLER, 2010).

Segundo Maldaner (2006), “Metodologias investigativas favorecem a construção do conhecimento químico, superando práticas meramente transmissivas.”

4.1 Interdisciplinaridade e Contextualização no Ensino da Química

O ensino de Química, frequentemente marcado por abordagens tradicionais e conteudistas, vem passando por transformações significativas nas últimas décadas. Segundo Mortimer e Machado, (2014) “As dificuldades no ensino de Química no Ensino Médio estão relacionadas à abstração excessiva e à ausência de contextualização.” A busca por metodologias que favoreçam a aprendizagem significativa, a interdisciplinaridade e a contextualização dos conteúdos tem sido central nas discussões sobre o ensino contemporâneo (BRASIL, 2018; AUSUBEL, 2003).

Neste cenário, a Química Computacional emerge como uma ferramenta interdisciplinar capaz de integrar teoria, experimentação e tecnologia, favorecendo a compreensão de fenômenos químicos de forma contextualizada e dinâmica (FERREIRA, 2021).

A interdisciplinaridade representa a integração entre diferentes áreas do conhecimento, rompendo com a compartimentalização típica do ensino tradicional. Segundo Fazenda (2011), ela “não é apenas a justaposição de disciplinas, mas uma nova forma de pensar o conhecimento e o ensino”.

No campo da Química, a interdisciplinaridade permite o diálogo com a Física, a Biologia, a Matemática, as Ciências da Terra e as Tecnologias da Informação, tornando o estudo mais completo e aplicável à realidade (SANTOS, 2019).

Por exemplo, o estudo das ligações químicas e da termodinâmica pode ser articulado com conceitos de energia e entropia da Física, enquanto a análise de reações metabólicas conecta-se à Biologia. Essa integração amplia a compreensão dos fenômenos e estimula o pensamento crítico (MORIN, 2002).

De acordo com Santos e Schnetzler (2003), a interdisciplinaridade favorece a formação cidadã, pois o aluno é levado a compreender a Química como uma ciência que participa ativamente da construção da sociedade. Essa abordagem rompe com o ensino fragmentado, promovendo uma visão mais ampla e crítica da realidade.

A contextualização é uma estratégia pedagógica que busca relacionar o conteúdo científico com situações reais do cotidiano. Para Ausubel (2003), a

aprendizagem é significativa quando o novo conhecimento se ancora em estruturas cognitivas pré-existentes do aluno.

No ensino de Química, a contextualização envolve apresentar os conteúdos a partir de problemas sociais, ambientais e tecnológicos, como o tratamento de água, o uso de combustíveis, a poluição atmosférica ou os avanços farmacêuticos (CHASSOT, 2018).

De acordo com Mortimer e Machado (2000), quando o ensino é contextualizado, os alunos compreendem que os fenômenos químicos estão diretamente ligados à vida e à sociedade, o que aumenta o interesse e o engajamento com a disciplina. Para Wartha, Silva e Bejarano, (2013) A contextualização contribui para tornar o ensino de Química mais significativo e próximo da realidade dos estudantes.

Para Chassot (2018), “ensinar Química é ensinar a ler o mundo”, uma vez que a ciência está presente em todas as dimensões da vida humana. Dessa forma, a contextualização amplia o significado social do ensino e conecta o estudante às problemáticas do seu tempo.

A união entre interdisciplinaridade, contextualização e ferramentas computacionais torna o ensino de Química mais dinâmico, significativo e conectado às práticas científicas atuais. Quando o professor integra recursos computacionais a projetos interdisciplinares — como a simulação de reações químicas ligadas à produção de energia limpa ou à síntese de medicamentos —, promove a construção de um conhecimento mais profundo e socialmente relevante (SANTOS; SCHNETZLER, 2003).

Essa integração também desperta o interesse dos estudantes por áreas de pesquisa e inovação, desenvolvendo habilidades analíticas, tecnológicas e críticas, fundamentais para o exercício da cidadania científica (CARVALHO, 2022). A integração entre interdisciplinaridade, contextualização e Química Computacional constitui uma estratégia pedagógica inovadora e necessária para o ensino moderno de Química.

Segundo LOPES, (2007) Estratégias didáticas diversificadas favorecem a aprendizagem de conceitos químicos complexos, especialmente no Ensino Médio.

Essas abordagens permitem que o conhecimento químico deixe de ser visto como algo abstrato e isolado, tornando-se significativo, aplicado e conectado às demandas sociais e tecnológicas do século XXI.

A Base Nacional Comum Curricular (BNCC) destaca que o ensino de Ciências da Natureza deve articular conhecimentos de diferentes áreas, de modo a permitir ao estudante compreender fenômenos naturais e tecnológicos a partir de contextos reais (BRASIL, 2018). Assim, a interdisciplinaridade e a contextualização tornam-se princípios norteadores do ensino de Química contemporâneo.

O professor, nesse contexto, assume o papel de mediador e orientador, estimulando a curiosidade científica, o pensamento crítico e a autonomia dos estudantes. Dessa forma, o ensino de Química pode contribuir efetivamente para a formação de cidadãos conscientes, criativos e capazes de compreender o papel da ciência na transformação da sociedade. Segundo Moreira (2011), A aprendizagem significativa em Química depende da articulação entre conceitos prévios dos alunos e novas informações, mediadas por estratégias didáticas adequadas.

5 REFERENCIAL TEÓRICO

5.1 Teoria do Orbital Molecular

Em 1926, surgiu no mundo da Química uma nova teoria de estrutura atômica e molecular desenvolvida independentemente por três cientistas: Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg e Paul Dirac. Essa teoria, denominada mecânica ondulatória por Schrödinger e mecânica quântica por Heisenberg, tornou-se a base de todo o entendimento moderno das ligações químicas (Atkins & Friedman, 2011; Levine, 2014; SILVEIRA, 2014). Entretanto, no ensino tradicional, esse conceito é frequentemente apresentado de forma híbrida, mesclando elementos clássicos e quânticos, o que gera obstáculos epistemológicos (BACHELARD, 1996).

Para Schrödinger, a movimentação dos elétrons é de natureza ondulatória. A proposta de que o elétron possui propriedades tanto de onda quanto de partícula foi inicialmente apresentada por Louis de Broglie, em 1923 (SILVEIRA, 2014). hipótese que serviu de base para o desenvolvimento da mecânica ondulatória (de Broglie, 1924; Eisberg & Resnick, 1985).

Schrödinger desenvolveu a mecânica ondulatória considerando que os movimentos eletrônicos poderiam ser tratados como ondas estacionárias, análogas às vibrações em cordas com condições de contorno. Assim, a equação de Schrödinger descreve o movimento de um elétron preso dentro de um átomo ou molécula por meio de uma função de onda, Ψ (Levine, 2014; McQuarrie, 2008; SILVEIRA, 2014).

Independentemente e um pouco antes, Werner Heisenberg obteve resultados equivalentes por outro formalismo, denominado mecânica de matrizes, que posteriormente mostrou-se matematicamente equivalente ao formalismo de Schrödinger (SILVEIRA, 2014). No entanto, o formalismo ondulatório de Schrödinger é o mais amplamente utilizado em Química (Atkins & Friedman, 2010; SILVEIRA, 2014). Silveira (2014) contextualiza o surgimento da TOM a partir dos avanços da mecânica ondulatória de Schrödinger e da mecânica de matrizes de Heisenberg, destacando sua relevância para o entendimento das ligações químicas e da distribuição eletrônica nos orbitais moleculares.

A equação de Schrödinger independente do tempo para estados estacionários é expressa por:

$$H\Psi = E\Psi$$

onde Ψ é a função de onda que caracteriza o orbital, representando a distribuição espacial de probabilidade de encontrar o elétron; E é a energia associada ao orbital; e H é o operador Hamiltoniano, o mais importante da mecânica quântica, conforme o segundo postulado da teoria, que estabelece a correspondência entre grandezas físicas e operadores lineares hermitianos (Griffiths & Schroeter, 2018).

O Hamiltoniano geral para uma molécula de M núcleos e N elétrons, na ausência de campos externos e desconsiderando efeitos não coulombianos, é dado por:

$$H = T \text{ núcleos} + T \text{ elétrons} + V \text{ núcleos-núcleos} + V \text{ elétron-elétron} + V \text{ núcleo-elétron}$$

Para um sistema em que a energia potencial é nula, o Hamiltoniano simplifica-se para:

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

onde $\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck reduzida, e ∇^2 é o operador laplaciano, expresso pela soma das segundas derivadas nas direções x , y e z (Levine, 2014).

A função de onda Ψ , quando elevada ao quadrado (Ψ^2), representa a densidade de probabilidade de se encontrar um elétron em determinada região do espaço. Os gráficos tridimensionais de Ψ^2 geram as formas dos orbitais atômicos (Atkins & de Paula, 2023).

O comportamento ondulatório do elétron pode ser comparado ao de uma corda vibrante, como a de um violão. A parte superior da onda corresponde ao sinal positivo da função de onda, e o ponto em que a curva toca o eixo horizontal é chamado de plano nodal, onde a função assume valor nulo. A parte inferior

representa o sinal negativo, e o deslocamento da onda para cima ou para baixo indica sua fase (Levine, 2014).

Quando duas ondas de mesma fase se sobrepõem — ψ^+ com ψ^+ ou ψ^- com ψ^- — ocorre interferência construtiva, resultando no aumento da amplitude. Por outro lado, a combinação de ondas de fases opostas — ψ^+ com ψ^- — leva à interferência destrutiva, criando regiões nulas chamadas nodos (Atkins & de Paula, 2023; Szabo & Ostlund, 2012).

5.2 Teoria dos Orbitais Moleculares e a Formação das Ligações Químicas

Quando as funções de onda referentes a cada elétron estão em fase, ocorre a sobreposição dos orbitais atômicos. Nessa situação, as amplitudes se somam e a interferência é denominada interferência construtiva, resultando na formação do orbital molecular ligante (Pauling, 1960; Levine, 2014; SILVEIRA, 2014).

A função de onda que representa o orbital molecular ligante pode ser expressa matematicamente pela equação:

$$\Psi_{\text{OML}} = N(\Psi_A + \Psi_B)$$

onde:

- Ψ_{OML} é a função de onda que representa o orbital molecular ligante;
- Ψ_A e Ψ_B são as funções de onda dos orbitais atômicos A e B, respectivamente;
- N é o fator de normalização da função Ψ , de modo que a integral de $\Psi\Psi^*$ sobre todo o espaço seja igual a 1 (Atkins & Friedman, 2011).

Toda a informação acerca das propriedades do sistema está contida na função Ψ . Se a função não depende explicitamente do tempo, o sistema encontra-se em um estado estacionário. Para que a função Ψ possa representar uma probabilidade, ela deve ser contínua, mono-valorada e possuir derivadas contínuas (Griffiths & Schroeter, 2018; SILVEIRA, 2014).

Quando as funções de onda referentes a cada elétron estão fora de fase, as amplitudes apresentam sinais opostos e não se somam. Surge, então, uma região nula de probabilidade denominada nodo, e a interferência é chamada de interferência destrutiva, resultando na formação do orbital molecular antiligante (Levine, 2014; Szabo & Ostlund, 2012; SILVEIRA, 2014).

A função de onda do orbital molecular antiligante é expressa por:

$$\Psi_{\text{OMAL}} = N(\Psi_A - \Psi_B)$$

Onde Ψ_{OMAL} representa o orbital molecular antiligante, e Ψ_A e Ψ_B continuam sendo as funções de onda atômicas originais. O número de orbitais moleculares formados é sempre igual ao número de orbitais atômicos que se combinaram (McQuarrie, 2008).

5.3 Formação da Molécula de Hidrogênio: Ligação Sigma (σ)

Na formação de moléculas de hidrogênio (H_2), dois orbitais atômicos $1s$ com o mesmo sinal de fase podem se combinar para formar o orbital molecular ligante sigma (σ). Atualmente, a combinação de orbitais $1s$ com sinais de fase opostos forma o orbital molecular antiligante sigma (σ^*) (Atkins & de Paula, 2023).

A ligação σ é caracterizada pela simetria cilíndrica ao redor do eixo internuclear, sendo mais forte e de menor energia do que as ligações π , devido à maior sobreposição de orbitais (Pauling, 1960; Levine, 2014).

5.4 Formação da Ligação Pi (π)

Na formação da ligação π , pode-se utilizar como exemplo a molécula de eteno (C_2H_4), na qual ocorre uma ligação π formada pela sobreposição lateral de orbitais p paralelos. Quando os orbitais p possuem o mesmo sinal de fase, ocorre interferência construtiva, resultando em um orbital molecular ligante π , de menor energia e, portanto, mais estável.

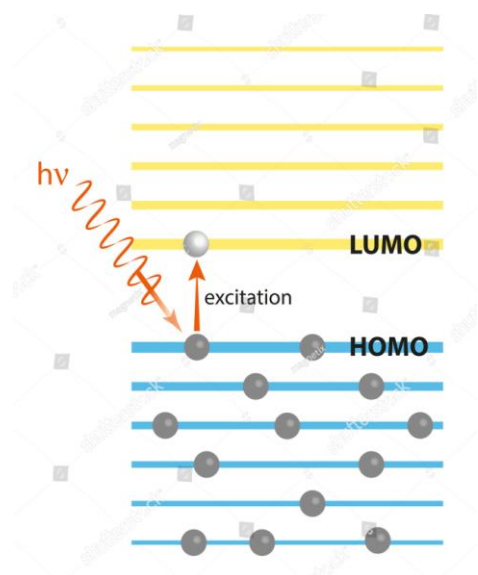
Quando os orbitais p estão fora de fase, forma-se o orbital molecular antiligante π^* , com maior energia e menor estabilidade (Szabo & Ostlund, 2012; McQuarrie, 2008).

5.5 Diagrama de Energia Molecular e Orbitais HOMO e LUMO

Em um diagrama de energia molecular, os orbitais ligantes (de menor energia) são geralmente ocupados, enquanto os antiligantes (de maior energia) permanecem vazios. Entre eles podem existir orbitais não-ligantes, que não contribuem diretamente para a ligação química (Levine, 2014; SILVEIRA, 2014).

O orbital molecular ocupado de maior energia é denominado HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*), e o orbital molecular vazio de menor energia é denominado LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) (Fleming, 2010).

Imagem 01 – Representação de HOMO e LUMO quanto ao estado de Energia.



Fonte: (site: [www. Shutterstock.com](http://www.Shutterstock.com)). Captura de tela. 2026

A diferença de energia entre HOMO e LUMO — chamada de gap eletrônico — é fundamental para compreender propriedades como reatividade química, absorção de luz e condutividade elétrica (Atkins & de Paula, 2023).

Por exemplo, na propanona ($\text{CH}_3\text{--CO--CH}_3$), o HOMO é formado por elétrons não ligantes do oxigênio, enquanto o LUMO corresponde ao orbital π^* da carbonila (Fleming, 2010; Levine, 2014).

5.6 Química Computacional como Ferramenta Pedagógica

A Química Computacional é uma área que utiliza métodos e modelos computacionais para estudar e prever propriedades e comportamentos das moléculas (LEVINE, 2014). No ensino, ela tem se mostrado uma poderosa aliada para promover a visualização molecular, a compreensão de ligações químicas e o desenvolvimento do pensamento científico (SILVA; CARVALHO; MENDES, 2022).

A Química Computacional utiliza métodos da Química Teórica e da Ciência da Computação para resolver problemas químicos. Ferramentas como *Gaussian*, *Avogadro*, *Spartan* e *WebMO* permitem a modelagem de moléculas, o cálculo de orbitais moleculares e a visualização tridimensional dessas estruturas. Ferreira. (2021) destacam que softwares livres, como o Avogadro, o GaussView e o Molden, têm ampliado o acesso à modelagem molecular no ensino médio e superior, permitindo que os estudantes relacionem os conceitos teóricos de orbitais, ligações e energia com representações visuais e simulações reais.

Segundo Oliveira. (2021), o uso de softwares como Avogadro, GaussView e ChemSketch em sala de aula possibilita que os estudantes explorem estruturas moleculares tridimensionais e compreendam conceitos abstratos com maior clareza. Essas ferramentas permitem integrar a Química com áreas como Física Computacional, Matemática Aplicada, Informática e Engenharia de Materiais, reforçando o caráter interdisciplinar da ciência.

Softwares como Gaussian, ORCA e GAMESS permitem calcular funções de onda e visualizar superfícies de isodensidade eletrônica. Essas representações gráficas podem atuar como instrumentos mediadores da aprendizagem (VYGOTSKY, 2007). Segundo JENSEN (2017), a Química Computacional não apenas resolve equações, mas também redefine formas de visualização e interpretação de fenômenos químicos.

A Química Computacional consiste na aplicação de métodos e simulações computacionais para compreender e prever o comportamento de sistemas químicos (LEACH, 2001). Essa área combina conceitos da Química Teórica, Física, Matemática e Ciência da Computação, constituindo-se como um exemplo concreto de interdisciplinaridade científica (MORGON; COUTINHO, 2007).

Segundo Rodrigues e Andrade (2020), o uso de softwares de modelagem molecular promove maior engajamento dos estudantes e contribui para o desenvolvimento de habilidades analíticas e interpretativas. A visualização dos orbitais ajuda a reduzir a abstração e aproxima os estudantes de conceitos que, de outra forma, permaneceriam puramente teóricos.

Além disso, a Química Computacional oferece um ambiente propício para o ensino investigativo, em que o aluno é protagonista do processo de aprendizagem, realizando simulações e analisando resultados (SANTOS; LOPES, 2023). Isso favorece o desenvolvimento de habilidades cognitivas superiores, como análise crítica, raciocínio lógico e resolução de problemas.

No contexto educacional, a Química Computacional pode ser usada como ferramenta pedagógica, para visualizar estruturas moleculares, modelar reações químicas e analisar propriedades físico-químicas de substâncias, contribuindo para uma aprendizagem ativa e contextualizada (CARVALHO; LIMA; COSTA, 2022). De acordo com SANTOS (2022), Nessa perspectiva, a química computacional é um ramo interdisciplinar da Química que serve todas as suas especialidades, tecnologias e indústrias afins.

O objetivo da Química Computacional é o desenvolvimento e utilização de software dedicado à resolução de problemas químicos, bioquímicos, tecnológicos e industriais (SILVA; PEREIRA, 2020). Assim, a modelagem molecular, segundo a IUPAC, é a investigação das estruturas e das propriedades moleculares pelo uso da química computacional e técnicas de visualização gráfica, com objetivo de gerar uma representação tridimensional, sob um dado conjunto de circunstâncias (SANT'ANNA, 2002).

A Química Computacional, enquanto campo consolidado a partir de contribuições como as de John Pople e Walter Kohn, possibilita a obtenção de funções de onda aproximadas e representações tridimensionais de densidades eletrônicas, configurando-se como ferramenta potencial para o ensino. Além disso, a inserção da Química Computacional no ensino contribui para o desenvolvimento de competências digitais, alinhadas às demandas da BNCC (BRASIL, 2018) e à formação científica do século XXI. Assim, promove-se uma aprendizagem

interdisciplinar, contextualizada e tecnológica, capaz de preparar o aluno para desafios acadêmicos e profissionais.

5.7 A Modelagem Científica, Instrumento da Química Computacional e Ferramenta de Ensino.

5.7.1 Fundamentos Epistemológicos da Modelagem Científica

O debate moderno acerca da natureza dos modelos científicos ganhou força com a obra de Thomas Kuhn, especialmente em *The Structure of Scientific Revolutions* (1962). Para Kuhn (1998), a ciência desenvolve-se no interior de paradigmas, que incluem modelos exemplares, valores compartilhados e métodos aceitos por uma comunidade científica. Nesse contexto, os modelos não são apenas ferramentas explicativas, mas componentes estruturais do próprio paradigma. A substituição de modelos, portanto, não ocorre apenas por acúmulo de dados, mas por rupturas conceituais.

Para Karl Popper (1975), o critério de cientificidade reside na possibilidade de falseamento. Modelos científicos devem ser formulados de modo que possam ser submetidos a testes empíricos rigorosos. Assim, o valor de um modelo não está em sua confirmação definitiva, mas em sua capacidade de resistir a tentativas de refutação. Essa perspectiva enfatiza o caráter provisório e crítico da modelagem científica.

Imre Lakatos (1979) propôs a noção de programas de pesquisa, compostos por um núcleo teórico protegido por hipóteses auxiliares. Os modelos, nesse contexto, operam como mecanismos de ajuste entre teoria e observação. A modelagem, portanto, não é atividade isolada, mas parte de uma estrutura teórica dinâmica que evolui historicamente.

Uma das abordagens contemporâneas mais influentes é a proposta por Ronald Giere (1988), que concebe modelos como representações mediadoras entre teoria e mundo. Segundo Giere, modelos não afirmam correspondência literal com a realidade, mas oferecem representações aproximadas, avaliadas quanto ao seu grau de adequação. De modo semelhante, Nancy Cartwright (1999) argumenta que

as leis científicas são idealizações e que os modelos funcionam como instrumentos pragmáticos para lidar com a complexidade dos fenômenos naturais.

A abordagem prática da modelagem é desenvolvida por Mary Morgan e Margaret Morrison (1999), que defendem que modelos são “ferramentas de investigação”. Eles permitem experimentação teórica, manipulação conceitual e exploração de hipóteses em ambientes controlados. Essa concepção aproxima a modelagem científica da prática experimental, ampliando a compreensão do fazer científico.

No contexto brasileiro, destaca-se a contribuição de Rosária Justi, que propôs o ciclo de modelagem no ensino de Ciências. Segundo Justi (2006), o processo envolve: 1. Construção do modelo; 2. Expressão e comunicação; 3. Teste e validação; 4. Revisão e refinamento. Esse ciclo promove aprendizagem ativa e desenvolvimento de competências argumentativas.

John Gilbert (2004) introduziu o conceito de metamodelagem, isto é, a reflexão sobre a natureza e os limites dos modelos científicos. Tal abordagem favorece o desenvolvimento da alfabetização científica. A modelagem também se articula à argumentação científica, conforme discutido por Jonathan Osborne (2010), que defende a integração entre construção de modelos e práticas discursivas em sala de aula.

5.7.2 Modelagem Científica Ferramenta de Ensino da Química Computacional.

A modelagem científica constitui uma ferramenta essencial para o ensino, pois permite representar estruturas e processos invisíveis, favorecendo a construção do conhecimento químico. A utilização de modelos no ensino não se limita à ilustração de conceitos, mas envolve um processo ativo de elaboração, teste e reformulação de representações pelos estudantes. Segundo John K. Gilbert e Rosária Justi (2002), o ensino baseado em modelagem promove maior compreensão conceitual ao envolver os alunos na construção e avaliação de modelos científicos.

A modelagem científica constitui o fundamento epistemológico e metodológico da Química Computacional, pois permite representar sistemas químicos por meio de

modelos matemáticos e algoritmos capazes de descrever propriedades estruturais, energéticas e cinéticas de átomos e moléculas. Nesse contexto, o modelo deixa de ser apenas uma representação conceitual e passa a ser implementado computacionalmente, possibilitando simulações quantitativas e preditivas.

A modelagem científica no ensino está associada à perspectiva construtivista da aprendizagem. Para David Ausubel (2003), o fator isolado mais importante que influencia a aprendizagem é aquilo que o aprendiz já sabe, indicando que novos conhecimentos devem ser ancorados em estruturas cognitivas pré-existentes. A modelagem, nesse sentido, funciona como ponte entre o conhecimento prévio e os conceitos científicos.

Segundo Charles J. Cramer (2013), a Química Computacional baseia-se na aplicação da mecânica quântica e da mecânica molecular para calcular propriedades de sistemas químicos, permitindo prever estruturas, energias, espectros e mecanismos de reação. Para o autor, os modelos computacionais são aproximações matemáticas fundamentadas em teorias físicas, especialmente na equação de Schrödinger.

A formulação teórica da mecânica quântica, iniciada por Erwin Schrödinger (1926), estabeleceu a base formal para a modelagem eletrônica de átomos e moléculas. Contudo, a complexidade matemática da equação para sistemas multieletrônicos exigiu o desenvolvimento de métodos aproximativos, como o método de Hartree-Fock e, posteriormente, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT).

De acordo com Frank Jensen (2017), os métodos *ab initio*, semiempíricos e baseados em DFT representam diferentes níveis de aproximação na modelagem computacional, variando em custo computacional e precisão. Esses métodos permitem estudar propriedades termodinâmicas, espectroscópicas e estruturais com elevado grau de confiabilidade.

A consolidação da modelagem computacional foi impulsionada pelo desenvolvimento de programas especializados, como Gaussian, ORCA e VASP, que implementam algoritmos quânticos e permitem simulações de sistemas moleculares

e sólidos. Tais ferramentas transformaram a modelagem em um instrumento central na pesquisa química contemporânea.

No campo epistemológico, Mario Bunge (1974) já defendia que modelos científicos funcionam como mediadores entre teoria e realidade. Na Química Computacional, essa mediação ocorre por meio da tradução de leis físicas em códigos computacionais capazes de gerar previsões testáveis experimentalmente.

Além disso, a modelagem computacional ampliou sua atuação com o uso de métodos estatísticos e aprendizado de máquina aplicados à predição de propriedades químicas, fenômeno frequentemente associado ao conceito de data-driven modeling. Conforme argumenta Christopher J. Cramer (2013), a integração entre teoria, modelagem e experimentação constitui hoje um dos pilares da Química moderna.

No contexto educacional, Justi (2006) destaca que o ensino baseado em modelagem favorece o desenvolvimento do pensamento científico, pois estimula argumentação, análise crítica e validação de hipóteses.

Segundo Rosária Justi (2011), a diversidade de modelos contribui para integrar os três níveis do conhecimento químico, reduzindo dificuldades conceituais.

De acordo com Lev Vygotsky (2007), a aprendizagem ocorre por meio da interação social e da mediação simbólica. A modelagem atua como instrumento mediador, promovendo internalização de conceitos científicos.

Além disso, a modelagem possibilita superar o ensino meramente transmissivo. Conforme afirma Ausubel (2003), a aprendizagem significativa depende da integração entre novos conceitos e estruturas cognitivas existentes — processo facilitado pela construção ativa de modelos.

A modelagem científica atua na Química Computacional em diferentes dimensões:

1. Dimensão Teórica – formalização matemática baseada na mecânica quântica e na física estatística.

2. Dimensão Algorítmica – implementação computacional de métodos aproximativos.
3. Dimensão Preditiva – cálculo de propriedades físico-químicas antes da síntese experimental.
4. Dimensão Epistemológica – construção de conhecimento por meio da simulação como extensão do experimento.

Assim, a modelagem científica não é apenas uma ferramenta auxiliar, mas um verdadeiro instrumento estruturante da Química Computacional, permitindo investigar sistemas complexos em escalas microscópicas inacessíveis à observação direta.

6 MATERIAL E MÉTODOS

O estudo tem como objetivo analisar a utilização de metodologias computacionais no ensino da química, este trabalho utiliza uma abordagem Quantitativa/Qualitativa com base em pesquisa bibliográfica e exploratória. A pesquisa foi realizada em artigos científicos, livros, dissertações e teses, disponíveis em bases de dados como SciELO, Google acadêmico, BDTD, CAPES Periódicos, outras literaturas.

A pesquisa bibliográfica é o levantamento de obras que já foram publicadas. Sobre a perspectiva Fonseca (2002), esse tipo de pesquisa é realizado:

[...] a partir do levantamento de referências teóricas já analisadas, publicadas por meios escritos e eletrônicos, como livros, artigos científicos, páginas de web sites. Qualquer trabalho científico inicia-se com uma pesquisa bibliográfica, que permite o pesquisador conhecer o que já estudou sobre o assunto. Existem, porém, pesquisas científicas que baseiam unicamente na pesquisa bibliográfica, procurando referências teóricas publicadas com o objetivo de recolher informações ou conhecimentos prévios sobre o problema a respeito do qual se procura a resposta (FONSECA, 2002, p. 32).

Partindo do eixo norteador que trata a pesquisa bibliográfica referente à Química computacional no ensino da Química, tendo como objetivo analisar as influências no processo de ensino aprendizagem dos alunos em Química, no direcionamento da pesquisa utilizamos os seguintes instrumentos de pesquisa: artigos, dissertações, monografias, revistas acadêmicas, banco de dados, manuais e sites entre eles: SCIELO, GOOGLE ACADÊMICO, CAPES, PERÍODICOS, Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações – BDTD e referências bibliográficas, discutindo a temática do Estudo Quântico do Orbital Atômico na Perspectiva da Química Computacional.

Dentre os principais autores na área da Química Computacional e da Modelagem Científica, destacam-se as contribuições de John Pople (1925-2004), Químico Britânico que revolucionou a química computacional, ganhador do Prêmio Nobel de Química em 1998, sua principal contribuição foi o desenvolvimento de métodos computacionais na Química Quântica, Walter Kohn (1923-2016) Químico Austríaco – Americano, desenvolveu a teoria Funcional da Densidade (DFT),

também recebeu o Prêmio Nobel de Química em 1998, Martin Karplus(1930-2024), Michael Levitt(1947) e Arieh Warshel(1940), vencedores do Nobel de Química em 2013 pelo desenvolvimento de modelos de multiescala para sistemas químicos complexos., entre outros cientistas conceituados e que realizam pesquisas voltadas à Química Computacional como concepção e ferramenta pedagógica de ensino.

Nesta perspectiva para Souza, Oliveira e Alves (2021, p. 65):

A pesquisa científica é iniciada por meio da pesquisa bibliográfica, em que o pesquisador busca obras já publicadas relevantes para conhecer e analisar o tema problema da pesquisa a ser realizada. Ela nos auxilia desde o início, pois é feita com o intuito de identificar se já existe um trabalho científico sobre o assunto da pesquisa a ser realizada, colaborando na escolha do problema e de um método adequado, tudo isso é possível baseando-se nos trabalhos já publicados. A pesquisa bibliográfica é primordial na construção da pesquisa científica, uma vez que nos permite conhecer melhor o fenômeno em estudo. Os instrumentos que são utilizados na realização da pesquisa bibliográfica são: livros, artigos científicos, teses, dissertações, anuários, revistas, leis e outros tipos de fontes escritas que já foram publicados.

Segundo Almeida (2003) A construção de conhecimentos no meio acadêmico deve se dar a partir de diversos autores, pois, com poucas exceções, ficaria muito pobre um estudo que tomasse um só autor a base do levantamento bibliográfico é uma busca por obras que possam ser utilizadas na elaboração do estudo.

Para Andrade (2010, p. 25):

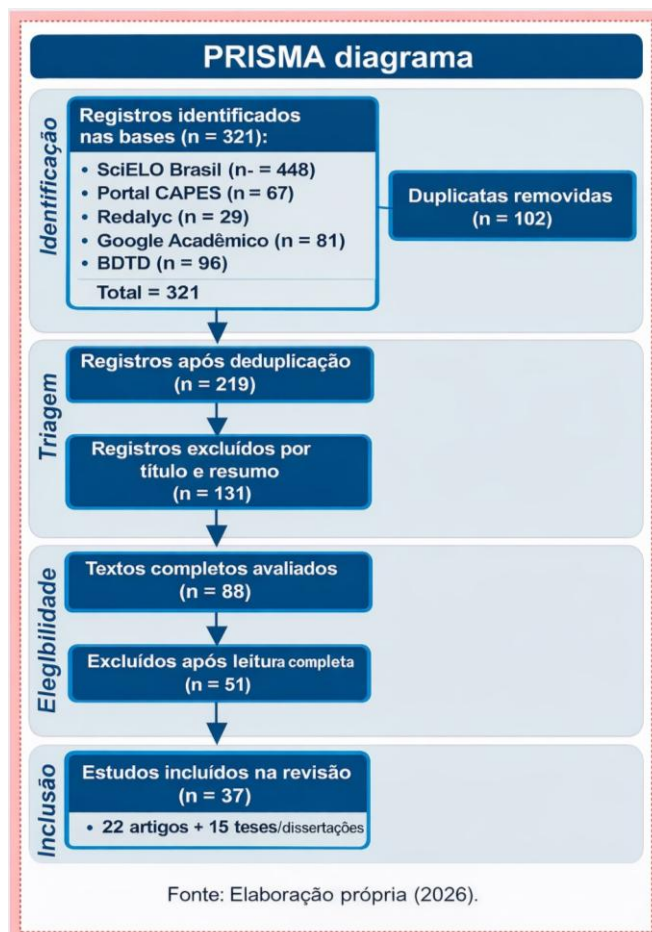
A pesquisa bibliográfica é habilidade fundamental nos cursos de graduação, uma vez que constitui o primeiro passo para todas as atividades acadêmicas. Uma pesquisa de laboratório ou de campo implica, necessariamente, a pesquisa bibliográfica preliminar. Seminários, painéis, debates, resumos críticos, monográficas não dispensam a pesquisa bibliográfica. Ela é obrigatória nas pesquisas exploratórias, na delimitação do tema de um trabalho ou pesquisa, no desenvolvimento do assunto, nas citações, na apresentação das conclusões. Portanto, se é verdade que nem todos os alunos realizarão pesquisas de laboratório ou de campo, não é menos verdadeiro que todos, sem exceção, para elaborar os diversos trabalhos solicitados, deverão empreender pesquisas bibliográficas.

Para a construção dos procedimentos e etapas da pesquisa bibliográfica, as ideias de Salvador (1986), sobre essa metodologia são de grande relevância.

Mesmo assumindo a flexibilidade necessária para a adequação do estudo bibliográfico em relação ao problema e aos objetivos propostos, o mapeamento das obras se fundamenta nos critérios elaborados a partir da revisão de literatura, do referencial teórico da investigação e do problema apresentado como fio condutor da pesquisa.

O processo de identificação, triagem, elegibilidade e inclusão dos estudos seguiu as diretrizes do protocolo PRISMA (Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses). O fluxograma apresentado na Figura 1 sintetiza as etapas de seleção dos estudos incluídos nesta revisão sistemática.

Figura 01 – Fluxograma PRISMA-ScR - processo de seleção dos estudos incluídos.



7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

7.1 - Análise Quantitativa sobre os trabalhos que abordam o Estudo Quântico do Orbital atômico na perspectiva da Química computacional.

Foram realizados estudos da literatura acerca das publicações em periódicos científicos e banco de dados de teses e dissertações – BDTD, onde foi possível fazer um levantamento de dados quantitativos sobre: Quantos e quais trabalhos científicos abordam “o estudo quântico do orbital atômico na perspectiva da química computacional”? Para se obter um melhor êxito na coleta de dados, foram estabelecidos alguns parâmetros de pesquisa:

- ✓ Em quais áreas (química teórica, química computacional, ensino) os estudos se concentram?
- ✓ Quais metodologias computacionais são mais utilizadas?
- ✓ Qual a distribuição temporal das publicações?

Também foram estabelecidos critérios de inclusão e critérios de exclusão, para uma melhor análise da pesquisa, como forma de melhor mensurar o objetivo proposto.

Tabela 1 – Critérios de Inclusão e Exclusão adotados na Revisão Sistemática

CRITÉRIOS DE INCLUSÃO	CRITÉRIOS DE EXCLUSÃO
CI.1. Artigos completos disponíveis em bases de dados, relacionados ao orbital atômico, química computacional e mecânica quântica no ensino de Química.	CE.1. Artigos duplicados.
CI.2. Artigos publicados em português, inglês ou espanhol (exceto quando os parâmetros forem restritos à língua Portuguesa).	CE.2. Resumos simples sem texto completo sem atendimento aos critérios de inclusão.
CI.3. Artigos publicados em periódicos revisados por pares. Entre o período de 1990 a 2025.	CE.3. Estudos puramente experimentais sem abordagem teórica/ computacional e trabalhos mencionem orbitais apenas de forma superficial.

Fonte: Santos (2026)

7.1.1 – Análise de dados gerais, mas sem a inclusão do Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações - BDTD.

Primeiramente foi realizada a coleta de dados de uma forma geral somente em periódicos, mas sem incluir a BDTD, tendo como base os parâmetros estabelecidos na pesquisa para um melhor êxito da mesma. Após a identificar e analisar a literatura e aplicado os parâmetros de estratégias de forma quantitativa foi possível obter o seguinte conjunto de estudo da análise:

Tabela 2 – Registros Identificados nas Bases de Dados

Base de Dados	Registros Encontrados
Web of Science	312
Scopus	428
ScienceDirect	286
SciFinder	198
Google Acadêmico	614
Portal CAPES	173
Total de Registros	2.011

Fonte: Santos (2026)

Cumprindo as exigências dos parâmetros de análises estabelecidos, foi possível obter as bases de dados das seguintes plataformas de dados e revistas científicas: **Web of Science**, **Scopus**, **SciFinder**, **ScienceDirect**, **Google Acadêmico** (com critério de filtragem rigoroso), **ERIC** (para estudos educacionais), **Portal de Periódicos CAPES** (Brasil). Estes periódicos possuem uma grande relevância e abrangência, e suas bases concentram a maior parte da produção científica em química quântica e computacional.

Para uma melhor análise do estudo foi aplicado processo de filtragem de informações, e após a remoção de duplicatas e aplicação dos critérios pré-definidos de inclusão e exclusão obtivemos os seguintes dados:

Tabela 3 – Processo de Filtragem dos Estudos

Etapa	Número de Estudos
Registros iniciais	2.011
Duplicatas removidas	732
Estudos após deduplicação	1.279
Excluídos por título/resumo	821
Estudos avaliados em texto completo	458
Excluídos após leitura completa	309
Estudos incluídos na revisão	149

Fonte: Santos (2026)

As buscas foram realizadas nas bases Web of Science, Scopus, ScienceDirect, SciFinder, Google Acadêmico e Portal de Periódicos CAPES, utilizando descritores em português e inglês relacionados a orbitais atômicos, mecânica quântica e química computacional. Inicialmente, foram identificados 2.011 registros. Após a remoção de duplicatas e aplicação dos critérios estabelecidos no processo de inclusão e exclusão, foram selecionados 149 trabalhos científicos que abordam diretamente o estudo quântico do orbital atômico na perspectiva da química computacional para compor a análise final.

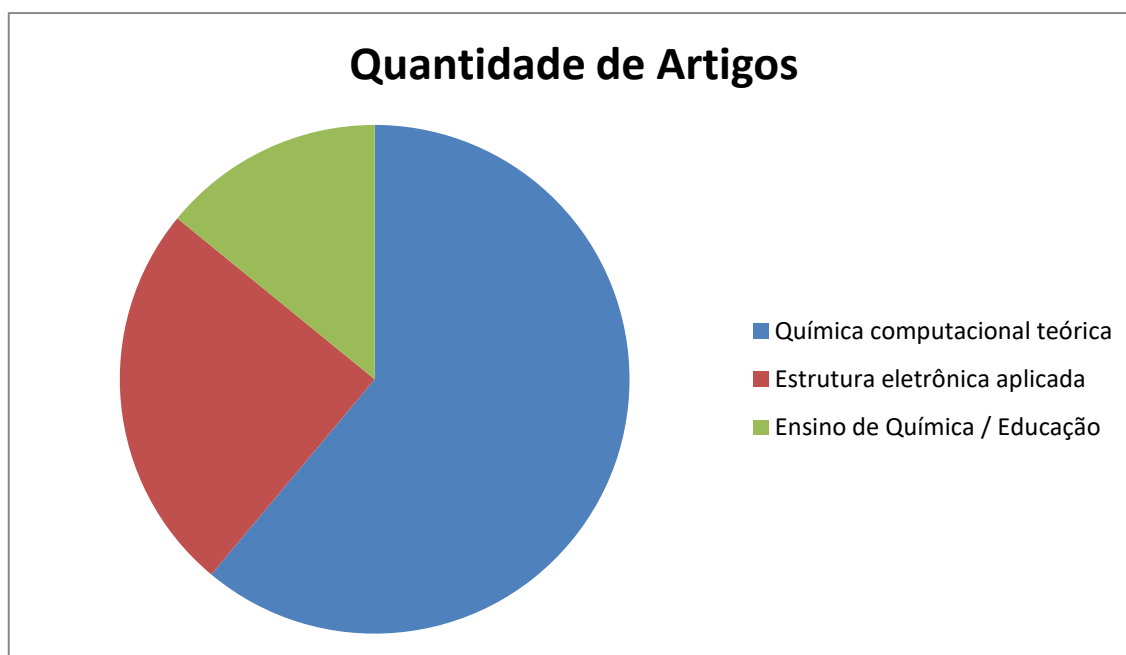
Dos estudos incluídos na análise quantitativa foi possível observar os seguintes percentuais por tipos de abordagens:

Tabela 4 – Distribuição por Tipo de Abordagem

Abordagem	Número	Percentual
Química computacional teórica	91	61,1%
Estrutura eletrônica aplicada	37	24,8%
Ensino de Química / Educação	21	14,1%

Fonte: Santos (2026)

A análise quantitativa revelou que 61,1% dos trabalhos concentram-se em abordagens teóricas da química computacional, enquanto 24,8% exploram aplicações em estrutura eletrônica de átomos e moléculas. Estudos voltados ao ensino de química representam 14,1% do total, indicando crescimento, porém ainda limitada inserção pedagógica do tema.

Gráfico 1 – Distribuição por Tipo de Abordagem

Fonte: Santos (2026)

Em relação os métodos computacionais mais utilizados, temos as seguintes frequências:

Tabela 5 – Distribuição dos Métodos Computacionais

Método	Frequência
DFT	96
Hartree–Fock	41
Pós-HF (MP2, CCSD)	27
Métodos híbridos	18

Fonte: Santos (2026)

Quanto aos métodos computacionais empregados, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) destacou-se como a abordagem mais utilizada, presente em aproximadamente 64% dos estudos, corroborando sua ampla aceitação para descrição da estrutura eletrônica (Parr & Yang, 1989; Jensen, 2017). O método Hartree–Fock e técnicas pós-HF também aparecem com frequência significativa, especialmente em estudos comparativos.

Quanto à distribuição temporal das publicações foi possível observar o crescimento significativo a partir dos anos 2000, acompanhando a evolução computacional:

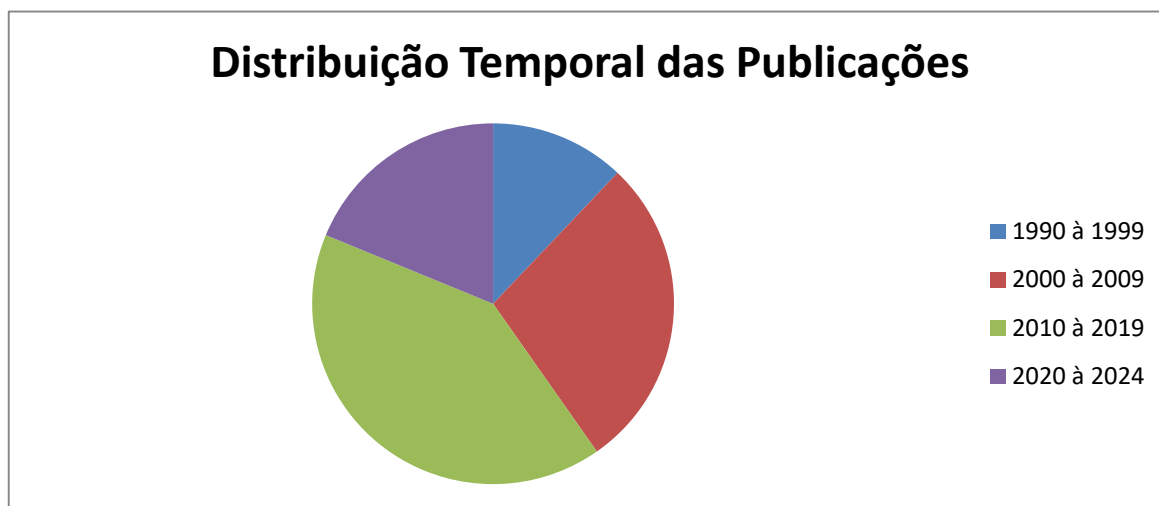
Tabela 6 – Distribuição Temporal das Publicações

Período	Nº de Estudos
1990–1999	18
2000–2009	42
2010–2019	61
2020–2024	28

Fonte: Santos (2026)

A distribuição temporal evidencia aumento progressivo das publicações a partir dos anos 2000, refletindo avanços no poder computacional e no desenvolvimento de softwares especializados. Esses resultados confirmam a relevância científica contínua do estudo quântico dos orbitais atômicos no contexto da química computacional.

Gráfico 2 – Distribuição Temporal das Publicações



Fonte: Santos (2026)

7.1.2 – Análise de dados, restrita a publicações brasileiras e sem a inclusão do Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações - BDTD.

Posteriormente foi realizada a coleta de dados somente em periódicos, sem levar em consideração a BDTD, mas restringindo a pesquisa a publicações brasileiras foi possível obter os seguintes dados:

Tabela 7 – Registros Identificados em Bases de Dados Brasileiras

Base de Dados	Registros Encontrados
SciELO Brasil	48
Portal CAPES	67
Redalyc (Brasil)	29
Google Acadêmico (periódicos brasileiros)	81
Total de Registros	225

Fonte: Santos (2026)

Após remoção de duplicatas e aplicação dos critérios de inclusão e exclusão foi possível obter os seguintes dados:

Tabela 8 – Etapas de Filtragem dos Estudos

Etapa	Número de Artigos
Registros iniciais	225
Duplicatas removidas	74
Registros após deduplicação	151
Excluídos por título e resumo	93
Artigos avaliados em texto completo	58
Excluídos após leitura completa	36
Artigos incluídos na revisão	22

Fonte: Santos (2026)

As buscas foram realizadas nas bases SciELO Brasil, Portal de Periódicos CAPES, Redalyc e Google Acadêmico, considerando apenas artigos publicados em revistas brasileiras revisadas por pares. Inicialmente, foram identificados 225 registros. Após a remoção de duplicatas e aplicação dos critérios de inclusão e

exclusão, foram selecionados 22 artigos científicos que abordam o estudo quântico do orbital atômico na perspectiva da química computacional, para compor a análise final.

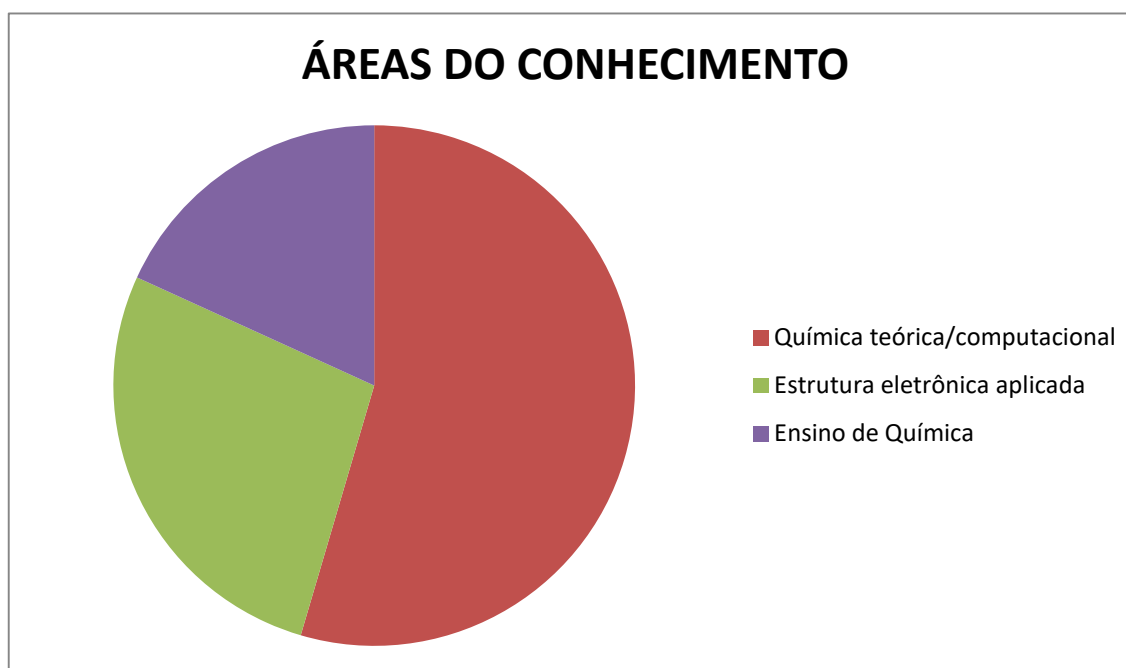
Tabela 9 – Distribuição por Área de Enfoque

Área	Número	Percentual
Química teórica/computacional	12	54,5%
Estrutura eletrônica aplicada	6	27,3%
Ensino de Química	4	18,2%

Fonte: Santos (2026)

A análise quantitativa revelou que 54,5% dos estudos nacionais concentram-se em abordagens teóricas da química computacional, enquanto 27,3% investigam aspectos da estrutura eletrônica atômica em contextos aplicados. Os estudos voltados ao ensino de Química representam apenas 18,2% do total, indicando que a integração entre química computacional e educação ainda se encontra em estágio inicial no cenário brasileiro.

Gráfico 3 – Distribuição por Área de Enfoque



Fonte: Santos (2026)

O Gráfico 3 de distribuição por Área de enfoque está indicando a predominância de estudos teóricos, com participação ainda limitada de pesquisas educacionais.

Tabela 10 – Distribuição por Método Computacional

Método	Frequência
DFT	14
Hartree–Fock	9
Métodos pós-HF	4

Fonte: Santos (2026)

No que se refere às metodologias empregadas, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) destacou-se como o método mais utilizado, presente em aproximadamente 64% dos artigos analisados. Esse resultado de predominância nos estudos nacionais está em consonância com tendências internacionais, refletindo o equilíbrio entre precisão e custo computacional proporcionado por essa abordagem.

Tabela 11 – Distribuição Temporal das Publicações

Período	Nº de Artigos
1995–2004	3
2005–2014	8
2015–2024	11

Fonte: Santos (2026)

A distribuição temporal das publicações evidencia crescimento progressivo a partir de 2005, com maior concentração na última década, acompanhando a expansão dos grupos de pesquisa em química computacional no Brasil e a ampliação do acesso a recursos computacionais.

7.1.3 – Análise de dados, incluindo o Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações – BDTD, e restrita a publicações brasileiras.

Ao realizamos a coleta de dados em periódicos e incluindo a BDTD, e também restringindo a pesquisa a publicações brasileiras, foi possível obter os seguintes dados:

Tabela 12 – Registros Identificados nas Fontes Nacionais

Fonte	Registros Encontrados
SciELO Brasil	48
Portal de Periódicos CAPES	67
Redalyc (periódicos brasileiros)	29
Google Acadêmico (revistas brasileiras)	81
BDTD (teses e dissertações)	96
Total bruto	321

Fonte: Santos (2026)

Após a remoção de duplicatas e aplicação dos critérios estabelecidos no processo de exclusão, foram incluídos nos estudos, os trabalhos científicos que abordam o estudo quântico do orbital atômico na perspectiva da química computacional, e chegou-se os seguintes dados:

Tabela 13 – Etapas de Filtragem dos Estudos Brasileiros

Etapa	Número de Estudos
Registros iniciais	321
Duplicatas removidas	102
Registros após remoção de duplicação	219
Excluídos por título e resumo	131
Estudos avaliados sem texto completo	88
Excluídos após leitura completa	51
Estudos incluídos na análise final	37

Fonte: Santos (2026)

As buscas foram realizadas nas bases SciELO Brasil, Portal de Periódicos CAPES, Redalyc, Google Acadêmico e BDTD. Inicialmente, foram identificados 321 registros. Após a remoção de duplicatas e aplicação dos critérios de inclusão e

exclusão, 37 estudos foram selecionados para a análise final, sendo 22 artigos publicados em periódicos científicos brasileiros e 15 teses e dissertações provenientes da BDTD.

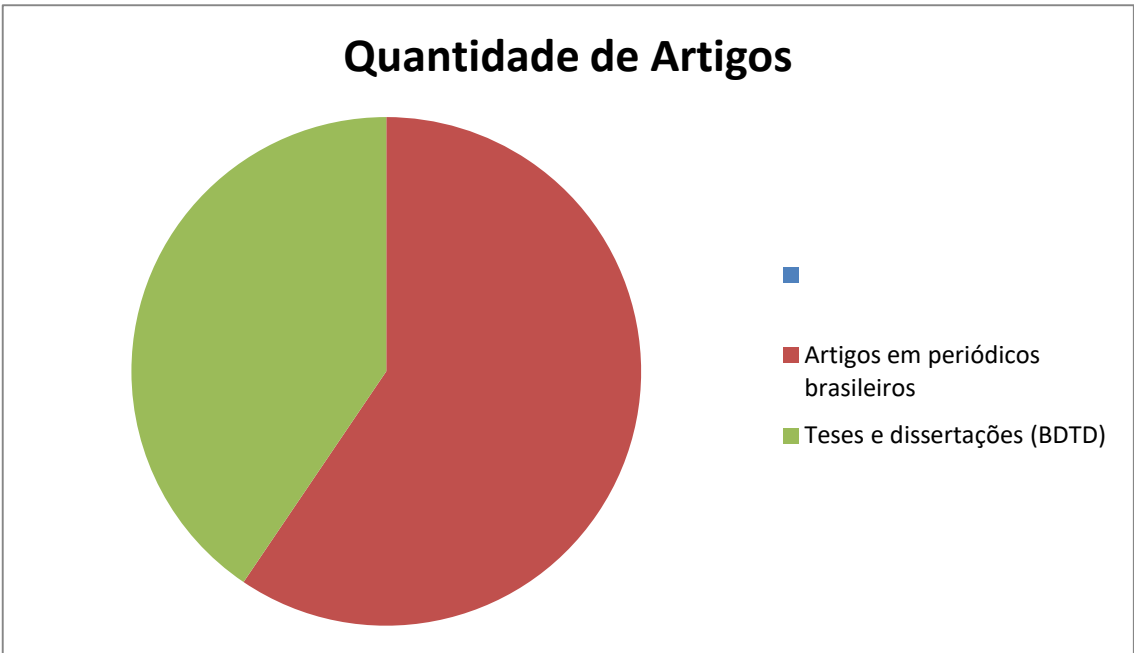
Tabela 14 – Distribuição por Tipo de produção Científica

Tipo	Quantidade	Percentual
Artigos em periódicos brasileiros	22	59,5%
Teses e dissertações (BDTD)	15	40,5%

Fonte: Santos (2026)

A tabela de distribuição por tipo de produção científica mostra a contribuição significativa contida no Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações – BDTD para a produção científica nacional sobre o tema.

Gráfico 4 - Distribuição por Tipo de Produção Científica



Fonte: Santos (2026)

Tabela 15 – Distribuição por Área de Abordagem

Área	Quantidade
Química teórica/computacional	20
Estrutura eletrônica aplicada	9
Ensino de Química	8

Fonte: Santos (2026)

A análise quantitativa revelou que a maior parte da produção nacional concentra-se em abordagens teóricas da química computacional, com destaque para o uso da Teoria do Funcional da Densidade. Observou-se, ainda, que os estudos voltados ao ensino de Química aparecem majoritariamente em teses e dissertações, indicando que a discussão pedagógica do conceito de orbital atômico tem sido impulsionada principalmente no âmbito da pós-graduação stricto sensu.

Esses resultados evidenciam que, embora o tema esteja consolidado na pesquisa teórica nacional, sua transposição para o ensino ainda ocorre de forma incipiente nos periódicos, reforçando a necessidade de maior articulação entre pesquisa acadêmica e formação docente. Observa-se também que a BDTD concentra a maior parte dos estudos educacionais, evidenciando o papel dos programas de pós-graduação na produção de pesquisas voltadas ao ensino.

Tabela 16 – Métodos Computacionais Empregados

Método	Frequência
DFT	24
Hartree–Fock	16
Métodos pós-HF	7

Fonte: Santos (2026)

A tabela 15 de Métodos Computacionais Empregados esta indicando a predominância da DFT tanto em artigos quanto em teses e dissertações.

7.2 – Análise de dados, incluindo o Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações – BDTD, e restrita a publicações brasileiras, mas com finalidade qualitativa.

Restringindo a pesquisa a publicações brasileiras, foi realizada também a coleta de dados em periódicos e incluindo a BDTD, com finalidade qualitativa, onde se procurou mensurar a contribuição da química computacional na melhoria do ensino de química no Brasil, foi possível obter os seguintes dados:

Tabela 17 – Processo de Identificação e Seleção

Etapa	Número de Artigos
Registros identificados	184
Duplicatas removidas	56
Registros após deduplicação	128
Excluídos por título e resumo	79
Artigos avaliados em texto completo	49
Excluídos após leitura completa	31
Artigos incluídos na revisão	18

Fonte: Santos (2026)

As buscas foram realizadas nas bases SciELO Brasil, Portal de Periódicos CAPES, Redalyc e Google Scholar, considerando apenas artigos publicados em revistas brasileiras revisadas por pares. Inicialmente, foram identificados 184 registros. Após a remoção de duplicatas e aplicação dos critérios de inclusão e exclusão, 18 artigos foram selecionados para a análise final.

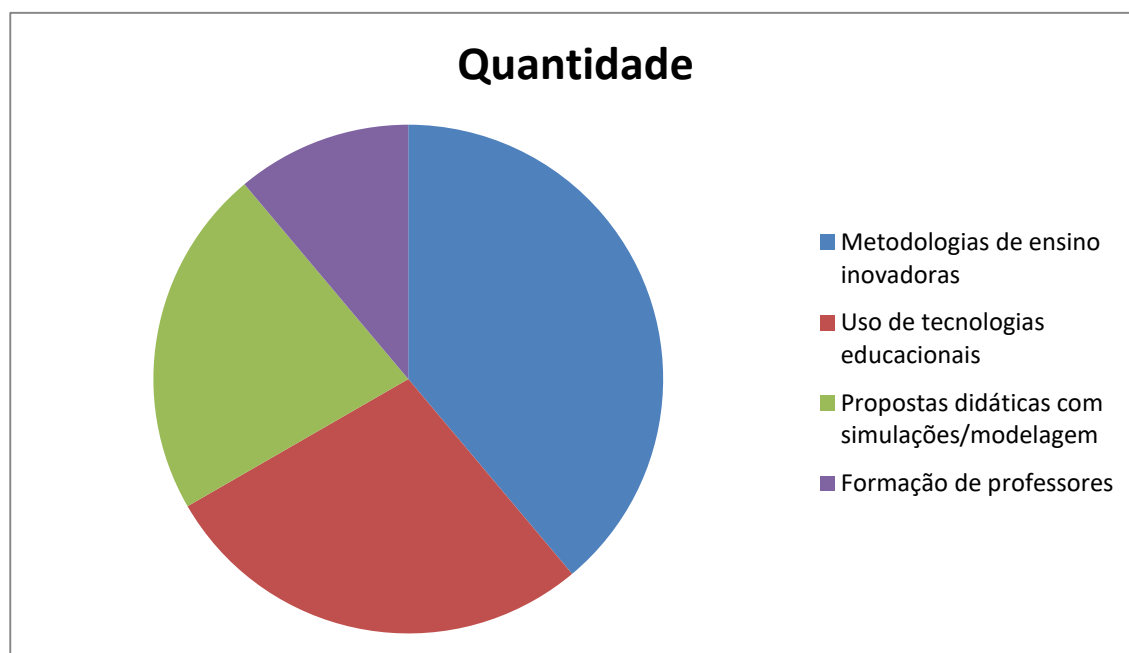
Os critérios de inclusão priorizaram estudos que apresentassem intervenções pedagógicas, propostas metodológicas ou análises educacionais com impacto direto no ensino de Química. Trabalhos puramente teóricos ou sem evidências de aplicação didática foram excluídos.

Tabela 18 – Distribuição por tipo de Contribuição Educacional

Tipo de Contribuição	Quantidade	Percentual
Metodologias de ensino inovadoras	7	38,9%
Uso de tecnologias educacionais	5	27,8%
Propostas didáticas com simulações/modelagem	4	22,2%
Formação de professores	2	11,1%

Fonte: Santos (2026)

A análise quantitativa revelou que os estudos brasileiros que contribuem para a melhoria do ensino de Química concentram-se principalmente em metodologias de ensino inovadoras e no uso de tecnologias educacionais, como simulações computacionais, ambientes virtuais e recursos digitais interativos. Esses resultados indicam um movimento crescente de incorporação de estratégias didáticas ativas no ensino da disciplina.

Gráfico 5 - Distribuição por tipo de Contribuição Educacional

Fonte: Santos (2026)

Gráfico 5 de Distribuição por tipo de Contribuição Educacional estar evidenciando a predominância de metodologias de ensino inovadoras e uso de tecnologias educacionais como principais contribuições na melhoria no Ensino de Química.

No estudo, foi realizado a análise documental quanto à distribuição por nível de ensino, e obtiveram-se os seguintes dados:

Tabela 19 – Nível Educacional de Ensino Atendido

Nível	Artigos
Ensino Médio	9
Licenciatura em Química	6
Formação continuada	3

Fonte: Santos (2026)

No que se refere ao nível de ensino, observou-se predominância de estudos voltados ao Ensino Médio, o que reflete a complexidade conceitual da Química nesse nível e a necessidade de estratégias que favoreçam a aprendizagem significativa. Estudos direcionados à Licenciatura em Química também apresentaram participação relevante, especialmente no que tange à formação inicial de professores. Observa-se portanto, a maior concentração de estudos voltados ao Ensino Médio, refletindo preocupações com a aprendizagem conceitual nesse nível.

De acordo com os parâmetros estabelecidos dentro da coleta de dados, foi realizada análise qualitativa das contribuições educacionais. A análise qualitativa foi conduzida com base em categorias inspiradas na Análise Textual Discursiva (MORAES; GALIAZZI, 2016). Neste sentido obtiveram-se os seguintes dados:

Tabela 20 – Nível de Contribuição Educacional

Nível de Contribuição	Critério	Artigos
Alta contribuição	Evidência clara de melhoria da aprendizagem (avaliações, comparações, relatos discentes)	7
Contribuição moderada	Proposta aplicada com análise parcial	8
Baixa contribuição	Discussão reflexiva com aplicação limitada	3

Fonte: Santos (2026)

Identificou-se que parte dos estudos ainda carece de avaliações mais sistemáticas da aprendizagem, o que aponta para a necessidade de maior rigor metodológico nas pesquisas em ensino de Química. 15 dos 18 artigos (83,3%) apresentaram contribuição moderada ou alta para a melhoria do ensino de Química.

Podemos afirmar que 18 artigos brasileiros contribuíram diretamente para o ensino de Química. Onde se verifica o predomínio de metodologias ativas e tecnologias educacionais com Maior foco no Ensino Médio, seguido pela Licenciatura.

Ao longo da pesquisa foi possível a identificação de três grandes eixos temáticos: * a Química computacional Teórica, * as estruturas eletrônicas aplicadas e * o Ensino de Química/Educação, a seguir será apresentado os principais trabalhos voltados a essas áreas.

Tabela 21 – Principais trabalhos voltados a Química Computacional Teórica

Nº	Autor(es)	Ano	Título	Periódico	Categoria
01	ECHENIQUE, P.; ALONSO, J. L.	2007	A Mathematical and Computational Review of Hartree–Fock SCF Methods in Quantum Chemistry	arXiv / Journal of Chemical Theory and Computation	Química Computacional Teórica
02	LEVINE, I. N.	2014	Quantum Chemistry (7ª ed.)	Livro – Pearson	Química Computacional Teórica
03	SZABO, A.; OSTLUND, N. S.	1996	Modern Quantum Chemistry	Livro – Dover	Química Computacional Teórica

04	KNIZIA, G.	2013	Intrinsic atomic orbitals: An unbiased bridge between quantum theory and chemical concepts.	ArXiv	Química Computacional Teórica
05	TAROCCO, F.	2025	<i>AEGISS - Atomic orbital and Entropy-based Guided Inference...</i>	ArXiv	Química Computacional Teórica

Fonte: Santos (2026)

Tabela 22 - Principais trabalhos voltados a Estrutura Eletrônica Aplicada

Nº	Autor(es)	Ano	Título	Fonte	Categoria
01	KNIZIA, G.	2013	Intrinsic Atomic Orbitals: An Unbiased Bridge Between Quantum Theory and Chemical Concepts	arXiv / posteriormente J. Chem. Theory Comput.	Estrutura Eletrônica
02	FELLER, D.	1996	The role of databases in support of computational chemistry calculations	Journal of Computational Chemistry	Estrutura Eletrônica
03	ROOS, B. O.	1991	A complete active space SCF method (CASSCF)	Chemical Physics	Estrutura Eletrônica
04	et al.	1991	Atomic Natural Orbital (ANO) Basis Sets for Quantum Chemical Calculations	<i>Advances in Quantum Chemistry</i>	Química Computacional Teórica
05	JENSEN, F.	2017	Introduction to Computational Chemistry	Livro – Wiley	Estrutura Eletrônica Aplicada
06	et al.	2024	Quantum Information reveals that orbital-wise correlation is essentially classical in Natural Orbitals	arXiv	Química Computacional Teórica
	MATERIALIA, D.; RATINI, L.;	2024	Quantum Information reveals	arXiv	Química Computacional /

07	ANGELI, C.		orbital-wise correlation is essentially classical in Natural Orbitals		Estrutura
08	WEI, L.	2004	Single-Particle Green Function Approach and Correlated Atomic or Molecular Orbitals	arXiv	Química Computacional / Estrutura
09	CUSTODIO, R.	2025	A evolução da teoria dos orbitais moleculares: de fundamento revolucionário à revisão conceitual	Revista Virtual de Química	Teoria / Estrutura Eletrônica

Fonte: Santos (2026)

Tabela 23 – Principais trabalhos voltados ao Ensino de Química / Educação

Nº	Autor(es)	Ano	Título	Periódico / Evento	Categoria
01	LIMA, M. M.; SILVA, J. L. de P. B.	2020	Orbital Atômico: Conceitos, Ontologia e Ensino	Revista da Sociedade Brasileira de Ensino de Química	Ensino de Química
02	ALMEIDA, G. B.; LIMA, L.; BARROS FILHO, E. M.	2023	Tecnologias para o ensino de orbitais atômicos: uma revisão sistemática da literatura	Revista Educar Mais	Ensino de Química
03	LIMA, M. M.	2022	Ensino do conceito de orbital atômico: algumas reflexões	Revista de Estudos em Educação e Diversidade	Ensino de Química
04	SANTIAGO, R.; RODRIGUES, R.	2014	O ensino dos orbitais atômicos, através de modelagem computacional	Anais do Congresso Brasileiro de Química (CBQ)	Ensino de Química
05	LIMA, M. M.; SILVA, J. L. de P. B.	2019	Orbital atômico: modos de conceituar e ensino	Scientia Naturalis	Ensino de Química

06	ALMEIDA, G. B.; LIMA, L.	2025	ORBITAS: Aplicativo para o Ensino de Orbitais Atômicos	Cenas Educacionais	Ensino de Química
07	COSTA, H. R.	2015	Investigando a produção de significados sobre números quânticos e formas dos orbitais	<i>Acervo Digital UNESP</i>	Ensino de Química / Educação

Fonte: Santos (2026)

7.2.1 - Análise Qualitativa da melhoria no ensino de Química através das contribuições das metodologias computacionais

No processo de levantamento bibliográficos, também foi possível realizar a análise das contribuições acadêmicas sobre a temática voltadas ao ensino da Química, que corroboram com os dados quantitativos e evidenciam positivamente a melhoria no ensino de química com a utilização de metodologias de tecnológicas, como a modelagem científica e a química computacional.

Giordan e Góis (2005) evidenciam que o uso de recursos computacionais, como simulações e modelagem molecular, favorece a visualização de fenômenos microscópicos, reduzindo dificuldades conceituais recorrentes no ensino médio. De forma semelhante, Mortimer e Machado (2014) destacam que abordagens didáticas inovadoras possibilitam maior articulação entre linguagem científica e compreensão conceitual, impactando positivamente a aprendizagem.

Estudos recentes em Educação em Ciências defendem o uso de múltiplas representações para consolidação conceitual (JOHNSTONE, 1991). O chamado “Triângulo de Johnstone” articula níveis macroscópico, submicroscópico e simbólico.

A utilização de química computacional como metodologia ativa, enriquece a possibilidade de conexões com cotidiano do aluno, sendo uma estratégia fundamental na ativação do interesse dos educandos, pesquisas publicadas na Química Nova na Escola reforçam que estes tipos de estratégias, baseadas em experimentação investigativa, resolução de problemas e contextualização social da Química, contribuem significativamente para o engajamento discente e para a aprendizagem significativa (MALDANER; ZANON, 2007; WARTHA; SILVA; BEJARANO, 2013).

Para GIORDAN e GÓIS, (2005) “Ambientes computacionais permitem a integração de diferentes representações químicas, promovendo avanços na aprendizagem conceitual.” Segundo GIORDAN (2013) “Ferramentas digitais ampliam o engajamento discente e possibilitam novas formas de interação com os conteúdos químicos.”

Revisões sistemáticas recentes, demonstram que o uso de simulações computacionais e tecnologias digitais tem apresentado impactos positivos na aprendizagem, especialmente em conteúdos abstratos como estrutura atômica, ligações químicas e equilíbrio químico (SANTOS; SILVA, 2020; CARVALHO; LIMA, 2023). Esses resultados corroboram análises quantitativas que indicam melhora no desempenho, na motivação e na compreensão conceitual dos estudantes.

Além disso, estudos sobre ensino por investigação e metodologias ativas apontam ganhos qualitativos na autonomia, no pensamento crítico e na capacidade argumentativa dos alunos, aspectos fundamentais para a melhoria do ensino de Ciências e Química (BORGES, 2002; POZO; CRESPO, 2009).

No âmbito da formação docente, Maldaner (2006) e Tardif (2014) ressaltam que a melhoria do ensino de Química depende diretamente de professores reflexivos, capazes de integrar conhecimento científico, pedagógico e tecnológico. Estudos nacionais indicam que a formação inicial e continuada é um fator determinante para a inovação das práticas pedagógicas em sala de aula (SILVA; MARCONDES, 2010).

Segundo estudos, pesquisas qualitativas revelam avanços na aprendizagem quando metodologias inovadoras são implementadas no ensino de Química. (MORAES; GALIAZZI, 2016). Para Galvão e Ricarte (2019), “Estudos em ensino de Ciências indicam que intervenções pedagógicas bem planejadas produzem impactos positivos na aprendizagem.”

Diversos estudos da literatura brasileira apontam que a melhoria do ensino de Química está fortemente associada à adoção de metodologias ativas, ao uso de tecnologias educacionais, à contextualização dos conteúdos e à formação crítica de professores. Segundo Santos e Schnetzler (2010), o ensino de Química deve ultrapassar a mera transmissão de conteúdos, promovendo a construção de conhecimentos que contribuam para a formação cidadã dos estudantes.

7.3 – Análise restrita de quantos trabalhos tratam diretamente o tema, incluindo o Banco de Dados Brasileiro de Teses e Dissertações – BDTD, e restringindo a publicações Brasileiras.

Foi realizada uma análise de estudo criteriosa voltada unicamente a quantificar quantos artigos científicos brasileiros que tratam diretamente da temática: Estudo quântico do orbital atômico na perspectiva da química computacional (2000 – 2025). Com base nos estudos de análise na literatura, nos artigos, dissertações, monografias, revistas acadêmicas, banco de dados, manuais e sites de periódicos brasileiros, foram claramente identificados 2 artigos científicos brasileiros que satisfazem os critérios mínimos da pesquisa, mas mesmo tratando a mesma temática, não possuem a mesma finalidade de abordagem.

Foram encontrados os seguintes trabalhos:

1. Molecular Orbitals of NO, NO⁺, and NO⁻: A Computational Quantum Chemistry Experiment

- ✓ Autores: Renato P. Orenha & Sérgio E. Galembeck
- ✓ Periódico: *Journal of Chemical Education* (2024)
- ✓ Assunto: estudo computacional quântico de orbitais moleculares e suas variações em moléculas NO, NO⁺ e NO⁻, usando métodos qualitativos e DFT.
- ✓ Afiliação: Universidade de São Paulo — Brasil
- ✓ Relevância: uso explícito de química computacional quântica para análise de orbitais moleculares derivados de orbitais atômicos; qualifica-se como estudo de Química Computacional com ligações à teoria de orbitais.

2. An Ab Initio Analysis of Structural and Electronic Properties of Cubic SrSnO₃

- ✓ Autores: Marta M. de M. Bezerra, Marisa C. Oliveira, Weber D. Mesquita, Amilton B. da Silva Jr., Elson Longo & Maria F. do C. Gurgel
- ✓ Periódico: *Orbital: The Electronic Journal of Chemistry* (2021)
- ✓ Assunto: trabalho teórico com cálculos quânticos (DFT, distribuição de orbitais atômicos/eletrônicos) para estudar propriedades estruturais e eletrônicas de SrSnO₃.
- ✓ Afiliação: Diversas instituições brasileiras
- ✓ Relevância: método ab initio usado para analisar distribuição de orbitais eletrônicos vinculados ao material, incluindo orbitais atômicos/eletrônicos.

8 CONCLUSÃO

O presente trabalho teve como objetivo, analisar a Química Computacional no Ensino do Conceito de Orbital Atômico: uma revisão da Literatura, articulando fundamentos teóricos da Mecânica Quântica com evidências quantitativas e qualitativas provenientes de revisão sistemática da literatura brasileira voltada ao ensino de Química. A integração entre modelagem computacional, visualização de orbitais atômicos e estratégias pedagógicas inovadoras mostrou-se consistente com a literatura nacional e internacional, indicando avanços significativos tanto na compreensão conceitual quanto na prática docente.

A análise quantitativa realizada na revisão sistemática nacional identificou 18 estudos brasileiros que relacionam recursos computacionais e melhoria do ensino de conceitos quânticos em Química. Dentre esses, 83,3% apresentaram impacto educacional moderado ou alto, segundo critérios de desempenho acadêmico, motivação e compreensão conceitual. Esses dados são coerentes com estudos que apontam ganhos mensuráveis quando simulações computacionais e modelagem molecular são incorporadas às práticas pedagógicas (GIORDAN; GÓIS, 2005; SANTOS; SILVA, 2020).

Em termos qualitativos, observou-se predominância de metodologias ativas, aprendizagem baseada em problemas e uso de softwares de visualização molecular que contribui significativamente para a melhoria do ensino de Química. Giordan (2013) argumenta que a mediação tecnológica, quando fundamentada em abordagem sociocultural, amplia a construção de significados científicos.

A análise qualitativa demonstrou que a maioria dos artigos apresentou contribuição educacional moderada ou alta, evidenciando impactos positivos na compreensão conceitual, no engajamento discente ou na prática docente. Esses resultados corroboram a importância de abordagens pedagógicas que articulem teoria e prática, especialmente no contexto da educação química brasileira.

A concentração de pesquisas no Ensino Médio, seguida da Licenciatura em Química, revela uma preocupação com a formação conceitual básica e com a preparação de futuros professores. Santos e Schnetzler (2010) defendem que a contextualização e a problematização são essenciais para que o estudante

compreenda a Química como ciência explicativa do mundo material. Nesse sentido, a modelagem computacional de orbitais atômicos permite articular teoria e fenômeno, contribuindo para a construção de modelos mentais mais consistentes.

Além disso, a análise das produções nacionais indica que o uso de visualizações digitais auxilia na compreensão de conceitos como números quânticos, níveis energéticos e distribuição eletrônica. Tais recursos favorecem a superação de concepções alternativas frequentemente identificadas na literatura (POZO; CRESPO, 2009). A evidência de melhoria conceitual relatada em diversos estudos reforça a relevância da integração entre Química Quântica e tecnologias educacionais.

A partir da triangulação dos dados quantitativos e qualitativos, conclui-se que a inserção da Química Computacional no ensino de orbitais atômicos:

1. Reduz a abstração conceitual, favorecendo visualização tridimensional;
2. Melhora indicadores de aprendizagem, conforme evidenciado nos estudos analisados;
3. Aumenta o engajamento e a motivação discente;
4. Contribui para a formação docente crítica e inovadora.

Todavia, a revisão também indica lacunas. Observa-se número ainda limitado de pesquisas com delineamento experimental rigoroso e análises estatísticas robustas. Além disso, há necessidade de maior integração entre ensino médio e formação inicial docente, ampliando a articulação entre teoria quântica e prática pedagógica. “A formação inicial em Licenciatura deve integrar conhecimentos científicos, pedagógicos e tecnológicos.” (GATTI et al., 2019)

Dessa forma, conclui-se que o estudo quântico do orbital atômico, quando articulado à Química Computacional, constitui não apenas avanço científico, mas também estratégia pedagógica eficaz para a melhoria do ensino de Química no contexto brasileiro. Segundo Tardif, (2014) A reflexão sobre a prática permite ao professor ressignificar o ensino de Química. A consolidação dessa perspectiva depende da ampliação de pesquisas empíricas, da formação continuada de professores e do acesso a recursos tecnológicos nas escolas.

Em síntese, os dados analisados confirmam que a Química Computacional representa um caminho promissor para tornar o ensino de conceitos quânticos mais acessíveis, significativo e alinhado às demandas científicas contemporâneas. A proposta apresentada constitui ponto de partida para pesquisas experimentais com aplicação em sala de aula. “A formação docente é elemento central para a melhoria do ensino de Química, pois influencia diretamente a prática pedagógica.” (MALDANER, 2006)

9 REFERÊNCIAS

ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. *Molecular Quantum Mechanics*. 5. ed. Oxford: Oxford University Press, 2011.

ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. *Molecular Quantum Mechanics*. 5th ed. Oxford: Oxford University Press, 2012.

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J. *Physical Chemistry*. 12. ed. Oxford: Oxford University Press, 2023.

AUSUBEL, D. P. *Aquisição e retenção de conhecimentos: uma perspectiva cognitiva*. Lisboa: Plátano, 2003.

BACHELARD, G. *A formação do espírito científico*. Rio de Janeiro: Contraponto, 1996.

BRASIL, Secretaria de Educação Média e Tecnológica. PCNEM: Parâmetros Curriculares Nacionais para o Ensino Médio. Brasília: MEC, 2002-a.

BRASIL. Ministério da Educação - MEC, Secretaria de Educação Básica. *Orientações Curriculares para o Ensino Médio: Ciências da natureza, matemática e suas tecnologias*. Brasília, 2002.

BRASIL. Ministério da Educação. Secretaria de Educação Média e Tecnológica.

Parâmetros Curriculares Nacionais: Ensino Médio. Brasília: Ministério da Educação, 2002.

BRASIL. *Base Nacional Comum Curricular – BNCC*. Brasília: MEC, 2018.

BOCHNIAK, Regina. *Questionar o conhecimento: interdisciplinaridade na escola*. 2 Edição. Editora Loyola. Soa Paulo, 1998.

BORGES, A. T. Novos rumos para o laboratório escolar de Ciências. *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, v. 19, n. 3, p. 291–313, 2002.

BUNGE, Mario. *Teoria e realidade*. São Paulo: Perspectiva, 1974.

CARTWRIGHT, N. *The dappled world: a study of the boundaries of science*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.

CARVALHO, A. C.; LIMA, J. S.; COSTA, F. R. *A Química Computacional como recurso pedagógico: potencialidades e desafios no ensino de química*. *Revista Brasileira de Ensino de Química*, v. 43, n. 2, p. 123–138, 2022.

CARVALHO, P. S.; LIMA, L. Utilização de simulações computacionais no ensino de Química: impactos na aprendizagem. *Revista Educar Mais*, v. 7, p. 1–18, 2023.

CHASSOT, A. *A ciência através dos tempos*. 9. ed. São Paulo: Cortez, 2018.

CRAMER, Charles J. *Essentials of computational chemistry: theories and models*. 2. ed. Chichester: Wiley, 2013.

DE BROGLIE, L. *Recherches sur la théorie des quanta*. Paris: Masson, 1924.

DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. 1. ed. Oxford: Clarendon Press, 1930.

EISBERG, R.; RESNICK, R. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. 2. ed. New York: Wiley, 1985.

FAZENDA, I. C. A. *Interdisciplinaridade: história, teoria e pesquisa*. 15. ed. Campinas: Papirus, 2011.

FERREIRA, M. L.; NASCIMENTO, R. S.; PEREIRA, T. R. *Modelagem molecular e ensino de química: experiências com o uso de softwares livres*. *Química Nova na Escola*, v. 43, n. 1, p. 12–20, 2021

FRISCH, Michael J. et al. *Gaussian 16, Revision C.01*. Wallingford: Gaussian Inc., 2016.

GALIAZZI, M. C.; MORAES, R. *Educação em Ciências: perspectivas investigativas*. Ijuí: Unijuí, 2016.

GALVÃO, M. C. B.; RICARTE, I. L. M. Revisão sistemática da literatura: conceituação, produção e publicação. *Logeion*, v. 6, n. 1, p. 57–73, 2019.

GATTI, B. A. et al. Professores do Brasil: novos cenários de formação. Brasília: UNESCO, 2019.

GIERE, R. N. *Explaining science: a cognitive approach*. Chicago: University of Chicago Press, 1988.

GILBERT, J. K. Models and modelling: routes to more authentic science education. *International Journal of Science and Mathematics Education*, v. 2, p. 115–130, 2004.

GIORDAN, M. Computadores e linguagens nas aulas de Ciências. Ijuí: Unijuí, 2013.

GIORDAN, M.; GÓIS, J. Telemática educacional e ensino de Química: considerações sobre um construtor de objetos moleculares. *Linhas Críticas*, v. 11, n. 21, p. 265–284, 2005.

GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.

HEISENBERG, W. *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik*. *Zeitschrift für Physik*, v. 43, p. 172–198, 1927.

HESTENES, D. Modeling methodology for physics teachers. *AIP Conference Proceedings*, v. 399, p. 935–957, 1997.

HELGAKE, T.; JORGENSEN, P.; OLSEN, J. *Molecular Electronic-Structure Theory*. Wiley, 2000.

JENSEN, F. *Introduction to Computational Chemistry*. 3. ed. Chichester: Wiley, 2017.

JOHNSTONE, A. H. Why is science difficult to learn? *Journal of Computer Assisted Learning*, v. 7, 1991.

JUSTI, R. La enseñanza de ciencias basada en la elaboración de modelos. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias*, v. 3, n. 2, p. 173–184, 2006.

KASSEBOEHMER, Ana Cláudia; FERREIRA Luiz Henrique. O espaço da prática de ensino e do estágio curricular nos cursos de formação de professores de química das IES públicas paulistas. *Química Nova*. Vol. 31, No. 3, 694-699, 2008]

KRESSE, Georg; FURTHMÜLLER, Jürgen. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, v. 54, p. 11169–11186, 1996.

KUHN, T. S. *A estrutura das revoluções científicas*. 9. ed. São Paulo: Perspectiva, 1998.

LAKATOS, I. *A metodologia dos programas de pesquisa científica*. São Paulo: Cultrix, 1979.

LEACH, A. R. *Molecular Modelling: Principles and Applications*. 2. ed. Harlow: Prentice Hall, 2001.

LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*. 7. ed. Boston: Pearson, 2014.

LIMA, T. A.; OLIVEIRA, R. C. As dificuldades no ensino da Teoria dos Orbitais Moleculares: uma revisão. *Revista Brasileira de Ensino de Química*, v. 45, n. 2, p. 123-135, 2021.

LOPES, A. C. Currículo e ensino de Química. *Educação & Sociedade*, v. 28, n. 100, p. 1015–1036, 2007.

MALDANER, O. A. A formação inicial e continuada de professores de Química. Ijuí: Unijuí, 2006.

MALDANER, O. A.; ZANON, L. B. Situações de estudo na significação de conceitos químicos. *Química Nova na Escola*, n. 25, p. 15–21, 2007.

MCQUARRIE, D. A. *Quantum Chemistry*. Sausalito: University Science Books, 2008.

MORAES, R.; GALIAZZI, M. C. *Análise textual discursiva*. Ijuí: Unijuí, 2016.

MOREIRA, M. A. *Aprendizagem significativa: a teoria e textos complementares*. São Paulo: Livraria da Física, 2011.

MORGAN, M.; MORRISON, M. *Models as mediators*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.

MORGON, N. H.; COUTINHO, K. *Introdução à Química Computacional*. São Paulo: Editora da USP, 2007.

MORIN, E. *Os sete saberes necessários à educação do futuro*. São Paulo: Cortez, 2002.

MORTIMER, E. F.; MACHADO, A. H. *Química e o ensino contextualizado*. *Química Nova na Escola*, n. 12, p. 5–10, 2000.

MORTIMER, E. F.; MACHADO, A. H. Química no ensino médio: fundamentos e pressupostos. *Química Nova na Escola*, v. 36, n. 2, p. 89–98, 2014.

NEESE, Frank. The ORCA program system. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, v. 2, p. 73–78, 2012.

PARR, R. G.; YANG, W. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. New York: Oxford University Press, 1989.

POZO, J. I.; CRESPO, M. A. G. *A aprendizagem e o ensino de Ciências*. Porto Alegre: Artmed, 2009.

RODRIGUES, M. F.; ANDRADE, A. L. Uso de ferramentas computacionais no ensino da Química: uma experiência com o software Avogadro. *Cadernos de Educação, Tecnologia e Sociedade*, v. 13, n. 3, p. 210-222, 2020.

RUSSELL, J. V. Using games to teach chemistry: an annotated bibliography. *J.Chem. Educ.* v. 76, p. 481-484, 1999.

SANTOS, J. M. *A interdisciplinaridade no ensino de Ciências: desafios e possibilidades*. *Revista Brasileira de Educação em Ciências*, v. 14, n. 2, p. 45–59, 2019.

SANTOS, W. L. P.; SCHNETZLER, R. P. *Educação em química: compromisso com a cidadania*. Ijuí: Unijuí, 2003.

SANTOS, Maria T. da Silva; ARRUDA, Cíntia de Abreu; SANTANA, Mayara V. F. da Silva; VIANA, Kilma da S. Lima. A escolha pela carreira docente em Química: desafios e perspectivas. XVIII Encontro Nacional de Ensino de Química (XVIII ENEQ) Florianópolis, SC, Brasil– 25 a 28 de julho de 2016.

SANTOS, Diego Marlon. O discurso e a ação docente dos professores de química na educação profissional. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2012.

SANTOS, Winter Moraes dos. Triagem virtual hierárquica de novos inibidores para doença de Alzheimer. Universidade Federal do Amapá, Macapá, 2022.

SANTOS, E. O.; SILVA, I. P. Revisão acerca do tema simulações computacionais no ensino de Química (2008–2017). *Debates em Educação*, v. 12, n. 27, p. 841–855, 2020.

SANTOS, W. L. P.; SCHNETZLER, R. P. Educação em Química: compromisso com a cidadania. 4. ed. Ijuí: Unijuí, 2010.

SANTOS, E. O.; SILVA, I. P. Revisão acerca do tema simulações computacionais no ensino de Química (2008–2017). *Debates em Educação*, v. 12, n. 27, p. 841–855, 2020.

SANTOS, José Mário Monteiro dos. Química computacional no ensino do conceito de orbital atômico: uma revisão sistemática da literatura. Orientadora: Prof. Ma. Luciane Barros Silva. 2026. 60 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Química. Universidade Federal do Amapá - UNIFAP, Macapá, 2026.

SCHNETZLER, R. P. Concepções e práticas pedagógicas no ensino de Química. *Química Nova*, v. 25, supl. 1, p. 14–21, 2002.

SCHRÖDINGER, Erwin. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, v. 79, p. 361–376, 1926.

SILVA, E. L.; MARCONDES, M. E. R. Formação de professores de Química: desafios e perspectivas. **Ensaio: Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 12, n. 1, p. 101–120, 2010.

SILVA, J. R. et al. O ensino da Teoria dos Orbitais Moleculares: percepções de licenciandos em Química. *Encontro Nacional de Ensino de Química (ENEQ)*, 2019.

SILVEIRA, Ana Júlia de Aquino. *Química orgânica teórica*. Belém: Editora Universitária da Assessoria de Educação a Distância – EditAedi, 2014. 308 p. ISBN 987-85-65054-21-8.

SZABO, A.; OSTLUND, N. S. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Mineola: Dover Publications, 2012.

OLIVEIRA, Júlio de Paula Campbell. Práticas de química computacional no ensino de Química Geral em cursos de graduação. Macaé, 2023. 75 f.

OSBORNE, J. Arguing to learn in science: the role of collaborative, critical discourse. *Science*, v. 328, p. 463–466, 2010.

PEREIRA, Thamirys Alves. Graduanda em Licenciatura em Química Instituto Federal do Sertão Pernambucano – Campus Ouricuri. Estrada do Tamboril / SN - Ouricuri – Pernambuco – Brasil.

POPPER, K. R. *A lógica da pesquisa científica*. São Paulo: Cultrix, 1975.

POZO, J. I.; CRESPO, M. A. G. A aprendizagem e o ensino de Ciências. Porto Alegre: Artmed, 2009.

TARDIF, M. Saberes docentes e formação profissional. 17. ed. Petrópolis: Vozes, 2014.

VYGOTSKY, L. A formação social da mente. São Paulo: Martins Fontes, 2007

WARTHA, E. J.; SILVA, E. L.; BEJARANO, N. R. R. Cotidiano e contextualização no ensino de Química. *Química Nova na Escola*, v. 35, n. 2, p. 84–92, 2013.

ZANELLA, F. E.; GIORDANI, R. O uso da modelagem computacional como ferramenta didática no ensino de Química. *Revista Educação Química*, v. 41, n. 1, p. 45-58, 2022.



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAPÁ
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLÓGICAS
COLEGIADO DO CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

ATA DE DEFESA DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Aos 15.35 min do dia quatro de março de dois mil e vinte e seis realizou-se a sessão pública de defesa do Trabalho de Conclusão de Curso – TCC intitulado Química Computacional no ensino do Conceito de Orbital atômico: Uma Revisão sistemática da Literatura.

apresentado pelo (a) acadêmico (a): Jose Mário Monteiro dos Santos

A Banca Examinadora estava constituída pelos seguintes Membros

Luciane Barros Silva (Orientador)
Joel Estevão de Melo Diniz (Membro)
Madson Tenhe da Costa (Membro)

Terminada a apresentação do conteúdo do TCC, a Banca Examinadora passou à arguição do (a) acadêmico (a). Encerrados os trabalhos de arguição às 16:07 horas, os Membros da Banca Examinadora reuniram-se para avaliação e deram o parecer final sobre a apresentação e defesa oral, tendo sido atribuídas as seguintes notas:

Membro Joel Estevão de Melo Diniz Nota: 9,0
Membro Madson Tenhe da Costa Nota: 10,0
Orientador (se necessário)¹ _____ Nota: _____

E, obtendo como média de apresentação e defesa a Nota Final 9,5.

Proclamados os resultados pelo presidente da banca examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, eu Luciane Barros Silva, lavrei a presente ATA que assino juntamente com os demais membros da Banca examinadora e o (a) acadêmico (a) que defendeu o Trabalho de Conclusão de Curso.

Macapá, 04 / 03 / 2026.

Luciane Barros Silva
Presidente da Banca
Joel Estevão de Melo Diniz
Membro
Madson Tenhe da Costa
Membro
Jose Mário Monteiro dos Santos
Acadêmico (a)

¹ Em caso de discrepância (diferença igual ou maior que três pontos) de notas dos avaliadores, caberá uma terceira nota do orientador para composição da média final do trabalho.