

O Ensino da Química Quântica: um levantamento bibliográfico na base de dados

Web of Science

The Teaching of Quantum Chemistry: a bibliographic survey in the Web of Science database

Enseñanza de la Química Cuántica: una encuesta bibliográfica en la base de datos Web of Science

Recebido: 05/10/2022 | Revisado: 30/06/2023 | Aceitado: 13/07/2023 | Publicado: 18/07/2023

Marcella Cristyanne Comar Greszczyszyn

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3374-2871>

Universidade Estadual de Londrina, Brasil

E-mail: marcella.comar@gmail.com

Marinez Meneghello Passos

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8856-5521>

Universidade Estadual de Londrina, Brasil

E-mail: marinezpassos@uel.br

Sergio de Mello Arruda

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4149-2182>

Universidade Estadual de Londrina, Brasil

E-mail: sergioarruda@uel.br

Resumo

O presente artigo traz os resultados de um levantamento bibliográfico de artigos publicados na área de ensino de Química, mais especificamente os que se dedicam à Química Quântica. A metodologia empregada foi de natureza qualitativa, procurando pela identificação e coleta das publicações sobre este assunto na base de dados *Web of Science*, com emprego da expressão de busca “química quântica” e “ensino”. Como resultado, obteve-se um total de 13 artigos. Do processo analítico, concluiu-se que há uma lacuna no ensino de Química Quântica na Educação Básica, pois as divulgações acessadas trazem resultados sobre pesquisas desenvolvidas no Ensino Superior e na Pós-Graduação, assim como cursos livres, em detrimento aos direcionados à Educação Básica. Outra observação da análise é que dos 13 artigos, 11 fizeram uso de tecnologias computacionais, aplicativos, simulador ou algo do gênero para melhoria do ensino e da aprendizagem.

Palavras-chave: Química quântica; Ensino de química; Web of Science.

Abstract

This article brings the results of a bibliographical survey of articles published in teaching Chemistry, specifically those dedicated to Quantum Chemistry. The methodology used was of a qualitative nature, looking for the identification and collection of publications on this subject in the Web of Science database, using the search expression “quantum chemistry” and “teaching”. As a result, a total of 13 articles were obtained. From the analytical process, it was concluded that there is a gap in the teaching of Quantum Chemistry in Basic Education since the accessed publications bring results about research carried out in Higher Education and Post-Graduation, as well as free courses, to the detriment of those directed to Basic Education. Another observation of the analysis is that of the 13 articles, 11 used computational technologies, applications, simulators, or something similar to improve teaching and learning.

Keywords: Quantum chemistry; Chemistry teaching; Web of Science.

Resumen

Este artículo trae los resultados de un levantamiento bibliográfico de artículos publicados en el área de la enseñanza de la Química, más específicamente los dedicados a la Química Cuántica. La metodología utilizada fue de carácter cualitativo, buscando la identificación y recopilación de publicaciones sobre este tema en la base de datos *Web of Science*, utilizando la expresión de búsqueda “quantum chemistry” y “teaching”. Como resultado se obtuvieron un total de 13 artículos. Del proceso analítico se concluyó que existe un vacío en la enseñanza de la Química Cuántica en la Educación Básica, ya que las publicaciones consultadas traen resultados sobre investigaciones realizadas en la Educación Superior y Postgrado, así como cursos libres, en detrimento de los dirigidos a la Educación Básica. Otra observación del análisis es que de los 13 artículos, 11 hicieron uso de tecnologías computacionales, aplicaciones, simulador o algo similar para mejorar la enseñanza y el aprendizaje.

Palabras clave: Química cuántica; Enseñanza de la química; Web of Science.

1. Introdução

Quando nos debruçamos sobre o formalismo da Química Quântica que começou a ser desenvolvido no início do século XX, percebemos que as relações entre afinidade, valência, ligação química e energia só ficaram um pouco mais explícitas quando a Mecânica Quântica estabeleceu relações quantitativas entre energia de formação de uma substância e suas características estruturais (Araújo Neto, 2007). Apesar das possibilidades de inserção curricular de diversos conceitos, em geral, os livros didáticos do Ensino Médio de Química abordam a Física Quântica apenas nos conteúdos de atomismo, mais especificamente, quando se propõem a representar os orbitais atômicos e moleculares (Pessoa Jr., 2007).

Ramos et al. (2015) investigou o modelo atômico quântico em coleções de Química aprovadas no PNLD 2015 e considerou que os autores descrevem o surgimento da Física Quântica no início do século XX, a relação entre os trabalhos de Planck (1858-1947), Einstein (1879-1955) e Louis de Broglie (1892-1987) e incluem o Átomo de Bohr na discussão quântica. Apesar disso, concluíram que:

As coleções analisadas cumprem os critérios de excelência do PNLD, porém, como não é avaliada a definição da orientação didático-pedagógica adotada, os autores podem escolher não ensinar o modelo atômico quântico. Desse modo, as obras não discutem um tema importante e controverso, que possibilita estimular e trabalhar o desenvolvimento intelectual dos estudantes (Ramos et al., 2015, p. 7).

Os resultados indicaram que, principalmente nos conceitos essenciais de *quantum* de energia, dualidade onda-partícula e números quânticos, não há discussão suficientemente explícita, com boa parte do texto de maneira informativa (Ramos et al., 2015). Esse recorte é fundamental, visto que, se boa parte do texto é informativa, isso significa que ela não considera os desenvolvimentos históricos que é a base argumentativa para a compreensão da verdadeira revolução que foi a Física Quântica. O desenvolvimento na área é urgente, visto que o livro didático é uma das ferramentas mais utilizadas pelos professores e pelos alunos (Assis & Bello, 2012).

Diante dos obstáculos expostos, há necessidade de mudança da proposta atual no ensino de Química Quântica. Oliveira (2016) propôs um programa novíssimo de atomística para o Ensino Médio com a inserção de conceitos de Química Quântica. A autora defende que, na prática docente, os tópicos que constituem o seu programa exigem “interpretações coerentes e contextualizadas com a realidade de cada grupo escolar, com exemplos e uma didática voltada para o cotidiano de cada grupo” (Oliveira, 2016, p. 14). Entretanto, para se desenvolver o programa proposto pela autora é necessário não apenas estratégias metodológicas, mas também que haja docentes com formação para tal. No caso da componente curricular Química no Ensino Médio, a situação é ainda mais grave: apenas 44% dos professores que lecionam essa matéria têm formação na área de Química (Brasil, 2015).

Em suma, percebe-se um cenário nacional com carência no ensino de Quântica nas escolas de Educação Básica, fenômeno que contribui na manutenção dos baixos indicadores educacionais e proliferação de pseudociências e mensagens falsas para a população. Desta forma esta investigação teve por objetivo realizar um levantamento bibliográfico com o intuito de identificar trabalhos que abordaram a temática Química Quântica no ensino, o que nos levou a selecionar uma determinada base de dados, com a finalidade de verificar o panorama de publicações no assunto proposto.

2. Metodologia

A pesquisa realizada é compreendida como revisão narrativa em que pauta-se em publicações amplas, apropriadas para descrever e discutir o desenvolvimento ou o “estado da arte” de um determinado assunto, sob ponto de vista teórico ou contextual. As revisões narrativas não informam as fontes de informação utilizadas, a metodologia para busca das referências,

nem os critérios utilizados na avaliação e seleção dos trabalhos. Constituem, basicamente, de análise da literatura publicada em livros, artigos de revista impressas e/ou eletrônicas na interpretação e análise crítica pessoal do autor (Rother, 2007).

Possui uma abordagem metodológica de natureza qualitativa do tipo levantamento bibliográfico proposto por Cervo e Bervian (1996), em que o intuito é identificar o panorama das pesquisas realizadas a respeito de um tema, neste caso específico, Química Quântica relacionada com o processo de ensino. Para isso foram utilizadas a expressão de busca “química quântica” e a palavra “ensino”, com o operador booleano AND entre a expressão e a palavra para que os artigos encontrados tivessem a abordagem de ambos os temas, e aspas na palavra composta para que elas não se separasse no momento da busca, sendo utilizada de forma composta e unida.

Como base de dados de busca, foi selecionada a base *Web of Science*, que é um site que fornece acesso a vários bancos de dados com dados abrangentes de citações para muitas disciplinas acadêmicas diferentes. O acesso foi viabilizado pelo sítio Comunidade Acadêmica Federada (CAFe) que a Universidade Estadual de Londrina (UEL) disponibiliza como portal de periódicos. E por esse motivo a expressão e a palavra de busca empregadas foram traduzidas para o inglês para realização íntegra do processo – “quantum chemistry” e “teaching”. O período de busca indexada foi deixado em aberto uma vez que o intuito também era identificar quais os anos de publicação do tema.

Os artigos elencados foram analisados quanto ao ano de publicação (sem recortes) e quanto à área ou categoria de aporte que a base possui, com a finalidade de verificar desde que ano se aborda o assunto e quais os anos com maior quantidade de publicação; e quanto à área ou categoria, para identificar se o artigo realmente tratava do assunto proposto, visto que algumas publicações trazem a expressão e a palavra de busca requerida, mas pode estar categorizado em outra área de trabalho como Ciência da Computação, que não faz parte do nosso interesse atual.

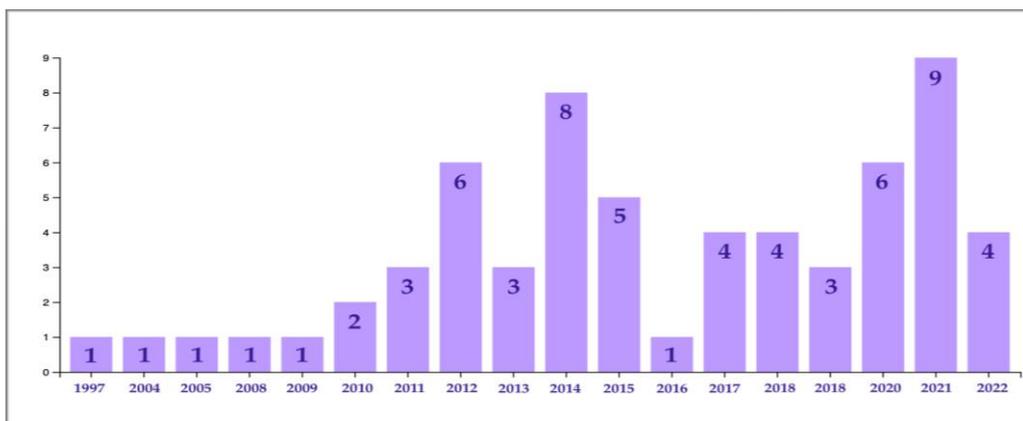
Após a primeira identificação citada acima, foram selecionados os artigos que apresentassem em seu escopo o tema proposto, no caso, que tivessem uma abordagem vinculada ao ensino e contemplassem o assunto Química Quântica e, categorizados tais quais. Após essa segunda avaliação, os artigos selecionados foram analisados de acordo com o conteúdo proposto em cada um deles.

Assumimos a Análise do Conteúdo proposta por Bardin (2011), considerando as três fases indicadas pela autora: pré-análise; exploração do material; tratamento dos resultados, inferências e interpretação. Na primeira fase, fez-se a organização da análise, em que se pautaria na leitura e interpretação do título, resumo e palavras-chaves. Na segunda, deu-se a execução da leitura, explorando o material a fim de identificar a relação entre o ensino e a Química Quântica presente no artigo. Por fim, o tratamento dos resultados, as inferências, as interpretações e as considerações que pudemos evidenciar de todo esse processo. Sobre essas três fases, comentaremos na sequência.

3. Resultados e Discussão

Como resultado inicial da busca realizada nos parâmetros estabelecidos anteriormente, foram encontrados um total de 63 publicações como artigos. Dos quais os anos de publicação vem desde 1997 primeira data identificada até 2022 (Figura 1), quando realizamos o levantamento. E as categorias detectadas foram seis: Química; Educação Pesquisa Educacional; Biologia Computacional Matemática; História e Filosofia da Ciência; Ciências e outros tópicos; Física, que estão organizadas e quantificadas na Tabela 1.

Figura 1 – Anos das publicações indexadas na pesquisa com o total de 63 artigos.



Fonte: Dados da pesquisa.

Na Figura 1 é possível identificar que o ano com maior quantidade de publicações foi 2021 com 9 delas, seguido de 2014 com 8 artigos publicados, e os anos com menores quantidades foram 1997, 2004, 2004, 2008, 2009 e 2016 todos com apenas uma publicação. O tema tem sido mais explorado em anos mais atuais, porém pesquisas vêm sendo realizadas desde que a Quântica foi estabelecidas em seus primórdios.

Tabela 1 – Categorias da base *Web of Science* dos artigos indexados na pesquisa com os 63 artigos.

Categorias	Quantidade
Química	48
Educação Pesquisa Educacional	43
Biologia Computacional Matemática	2
História e Filosofia da Ciência	1
Ciências e outros tópicos	1
Física	1

Fonte: Dados da pesquisa.

Na Tabela 1 organizamos as categorias em que os artigos publicados e indexados durante o levantamento encontram-se na própria base de dados. A categoria com maior quantidade de publicações foi Química com 48 artigos publicados, seguida da Educação Pesquisa Educacional com 43 publicações. Como pode ser observado, a adição dessas quantidades expostas na coluna 2 da Tabela 1, ultrapassa 63 artigos, pois um mesmo artigo pode possuir mais de uma área de classificação, segundo a *Web of Science*.

Como citado, a busca com esses disparadores “química quântica” e “ensino”, assim como suas traduções “quantum chemistry” e “teaching”, trouxe-nos 63 objetos para análise, todavia durante a primeira e a segunda fase, indicada por Bardin (2011), pudemos verificar que diversos deles não eram relevantes para nossas pretensões, por exemplo: Biologia Computacional, uma vez que a intenção era analisar resultados de pesquisa publicados nos artigos que considerassem a Química Quântica relacionada ao ensino da própria Química. Tendo em mãos os 48 artigos que estão quantificados na primeira linha da Tabela 1 reiniciamos os procedimentos indicados por Bardin (2011), retomando todas as três fases novamente,

considerando agora esse novo *corpus* analítico. Ou seja, os 48 artigos pré-selecionados foram avaliados quanto ao seu título, resumo e palavras-chave, para verificar se realmente contemplavam os parâmetros propostos para o levantamento que objetivamos realizar, fato que nos levou a apenas 13 artigos que relacionamos na Tabela 2. Os demais foram desconsiderados, pois suas tratativas não compunham o escopo da pesquisa – Química Quântica e seu ensino.

Na primeira coluna trazemos o número dado a cada artigo e eles foram mantidos na ordem em que o processo de busca os identificou. Na segunda coluna organizamos informações quanto à autoria, título, periódico e ano de publicação do artigo. Após a Tabela 2, inserimos algumas descrições relativas ao teor do que foi apresentado pelos autores dos artigos.

Tabela 2 – Artigos selecionados na busca indexada para análise.

Número	Artigos analisados
1	Arroio, A.; Honorio, K. M.; Weber, K. C.; Homem-De-Mello, P.; da Silva, A. B. F. O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. <i>Química Nova</i> . 2005.
2	Monte, S. A.; Ventura, E. A importância do método de Hartree no ensino de química quântica. <i>Química Nova</i> . 2011.
3	Leal, R. C.; Moita Neto, J. M.; Lima, F. D. A.; Feitosa, C. M. A Química Quântica na compreensão de teorias de Química Orgânica. <i>Química Nova</i> . 2010.
4	Bastos, C. C.; Leite, B. S. Analysis and Validation of Dipole Moment Calculations in Chemistry Teaching. <i>Orbital: The Electronic Journal of Chemistry</i> . 2017.
5	Weymuth, T.; Reiher, M. Immersive Interactive Quantum Mechanics for Teaching and Learning Chemistry. <i>Chimia – International Journal for Chemistry</i> . 2021.
6	Flükiger, P.; Vacek, G.; Hilger, A.; Lüthi, H. P. Teaching ab initio quantum chemistry in a networked environment. <i>Chimia – Future of Chemical Education</i> . 1997.
7	Nagaoka, S.; Kokubo, T.; Teramae, H.; Nagashima, U. Practical Training in Simple Hückel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals. <i>Journal of Chemical Education</i> . 2018.
8	Polik, W. F.; Schmidt, J. R. WebMO: Web-based computational chemistry calculations in education and research. <i>Wiley Interdisciplinary Reviews – Computational Molecular Science</i> . 2021.
9	Hoehn, R. D.; Mack, N.; Kais, S. Using Quantum Games To Teach Quantum Mechanics – Part 2. <i>Journal of Chemical Education</i> . 2014.
10	Canneaux, S.; Bohr, F.; Henon, E. KiSTheLP: A Program to Predict Thermodynamic Properties and Rate Constants from Quantum Chemistry Results. <i>Journal of Computational Chemistry</i> . 2014.
11	Hoehn, R. D.; Mack, N.; Kais, S. Using Quantum Games To Teach Quantum Mechanics – Part 1. <i>Journal of Chemical Education</i> . 2014.
12	Hoffmann, R.; Malrieu, J. P. Simulation vs. Understanding: A Tension, in <i>Quantum Chemistry and Beyond</i> . Part A. Stage Setting. <i>Angewandte Chemie-International edition</i> . 2020.
13	Orsini, G. Exploring Do-It-Yourself Approaches in Computational Quantum Chemistry: The Pedagogical Benefits of the Classical Boys Algorithm. <i>Journal of Chemical Education</i> . 2015.

Fonte: Dados da pesquisa.

Artigo 1: A abordagem deste artigo é o uso de computadores no ensino de Química Quântica em um curso sobre Química Quântica Computacional focado em projetos de Química Medicinal para estudantes de Graduação e Pós-Graduação. Os resultados mostraram que os alunos ficaram mais motivados e envolvidos quando há uma articulação entre teoria e prática.

Artigo 2: O artigo trabalha com uma descrição das ideias de Hartree, com conexão com a eletrostática para compreensão de Física e de Química, sugerindo que este método seja apresentado antes do Hartree-Fock, fazendo uso de

conceitos fundamentais de indistinguibilidade de elétrons, juntamente com a antissimetria da função de onda, que faltam no produto de Hartree.

Artigo 3: O artigo propõe o uso da Química Quântica Computacional como ferramenta para apoiar as principais teorias da Química Orgânica, principalmente, cálculos químicos quânticos que foram realizados para obter propriedades moleculares, como densidade eletrônica, momento dipolo, cargas atômicas e comprimentos de ligação, que foram comparados a resultados qualitativos com base nas teorias da Química Orgânica.

Artigo 4: Neste artigo, foi realizado um estudo sobre o uso de cálculos da Química Computacional e cálculos analíticos para o momento dipolo das moléculas consideradas, para a compreensão e interpretação do momento dipolo das moléculas diatômicas, conteúdo das disciplinas de Físico-Química e Química Quântica de um curso de Graduação em Química em uma universidade brasileira.

Artigo 5: O artigo propõe o uso de tecnologias avançadas como estruturas de realidade virtual e dispositivos táteis para o ensino de Química. Na proposta a questão é voltada para reações químicas oferecendo uma abordagem mais intuitiva do que as configurações de aprendizagem tradicionais, por meio de exploração e manipulação interativas de um sistema químico, q é simulado em tempo real com métodos químicos quânticos e, portanto, comporta-se de maneira fisicamente significativa.

Artigo 6: Este trabalho apresenta os exercícios práticos para um curso de Química Quântica *ab initio* que dá uma introdução aos métodos de Química Quântica Numérica com o objetivo de permitir que os alunos realizem seus próprios estudos *ab initio*. Os exercícios, que cobrem uma ampla gama de tópicos de diferentes áreas da Química Física, foram desenvolvidos dentro do domínio do hipertexto para aproveitar muitos recursos exclusivos desta mídia que são benéficos para fins de instrução.

Artigo 7: O artigo trata de uma adaptação no uso do *software* computacional HMO (Hückel-molecular-orbital) por meio do desenvolvimento de uma macro do *Microsoft Excel* para obter HMOs razoáveis de moléculas altamente simétricas, assim como duas outras macros do *Excel* para desenhar prontamente gráficos de contorno quantitativos de HMOs foram criadas como ferramentas para auxiliar os alunos na aprendizagem de Química Quântica na Graduação. A proposta visa um treinamento prático em teoria HMO simples usando as três macros para o ensino da Química Quântica, dedicando-se ao conceito teórico.

Artigo 8: O artigo aborda sobre uma interface a WebMO, e trata de sua facilidade de uso, uma vez que não necessita de instalação de *software*, apenas acesso ao navegador. Possui interfaces intuitivas para manusear e indica o acesso a programas de Química Computacional de última geração a partir de um navegador da *WEB* padrão, minimizando as barreiras ao uso de Química Computacional de última geração no ensino e na pesquisa.

Artigo 9: O artigo em questão propõe uma série de atividades usando a mecânica do clássico tic-tac-toe (CTTT) e *quantum* tic-tac-toe (QTTT) destinadas a ajudar na compreensão do aluno sobre tópicos de Química Quântica, explorando sua compreensão intuitiva do jogo. *Quantum* tic-tac-toe QTTT é um análogo quântico do CTTT e pode ser usado para demonstrar o uso de superposição em movimento, exibições qualitativas (e mais tarde quantitativas) de emaranhamento e colapso de estado devido à observação. Ele faz parte de uma série de artigos sobre o assunto publicado na revista, sendo o segundo deles.

Artigo 10: O texto aborda sobre o Pacote Termodinâmico Cinético e Estatístico (KiSTheIP), um programa de código aberto gratuito multiplataforma desenvolvido para estimar as propriedades moleculares e de reação a partir de dados de estrutura eletrônica. Até o momento, três formatos de *software* de Química Computacional são suportados (Gaussian, GAMESS e NWChem). Algumas características principais são: propriedades termodinâmicas moleculares em fase gasosa (oferecendo tratamento de rotor prejudicado), constantes de equilíbrio térmico, coeficientes de taxa da teoria do estado de transição (teoria do estado de transição (TST), teoria do estado de transição variacional (VTST)), incluindo efeitos de

tunelamento unidimensionais (1D) (Wigner e Eck O KiSTheIP), destina-se a ser uma ferramenta de trabalho tanto para o público em geral quanto para usuários mais especializados.

Artigo 11: Trabalha o aprendizado da Mecânica Quântica por meio de várias atividades desenvolvidas durante a aula que usam uma versão não clássica do tic-tac-toe, que são descritas para introduzir vários tópicos em um curso de Graduação em Mecânica Quântica. *Quantum* tic-tac-toe (QTTT) é um análogo quântico do tic-tac-toe clássico (CTTT) e pode ser usado para demonstrar o uso de superposição em movimento, exibições qualitativas (e mais tarde quantitativas) de emaranhamento e colapso de estado devido à observação. O QTTT pode ser usado para ajudar a compreensão dos alunos em vários outros tópicos com o auxílio de uma discussão adequada.

Artigo 12: Trata-se de um ensaio sobre ensino, ou melhor, compreensão da Teoria Química pautado em um triângulo de compreensão, teoria e simulação muito bem desenhado para sua aplicação. O assunto da Química é a Química Quântica, englobando ainda a inteligência artificial, e exemplos sobre acoplamento magnético em diradiais inorgânicos, e a maneira de pensar sobre haletos de metais alcalinos, mostram-nos a maneira de integrar a simulação com a teoria.

Artigo 13: Este artigo trabalha com uma proposta de ensino de um extenso projeto para uma implementação cooperativa e orientada por estudantes de um código geral de campo autoconsistente Hartree-Fock. O projeto destina-se principalmente (mas não exclusivamente) a um curso de laboratório de um semestre em currículos de Físico-Química de Pós-Graduação: os alunos são divididos em grupos de trabalho dedicados à implementação de sub-rotinas específicas, que são, gradualmente, reunidos no código final. O programa resultante não se limita ao caso trivial, usado nos sistemas diatômicos de dois elétrons, mas pode tratar moléculas arbitrárias de casca fechada com átomos de primeira e segunda fileira no nível de conjunto de base STO-3G e inclui recursos muito úteis, como otimização de geometria, análise populacional e cálculo de momentos dipolo. O “coração” do programa é o algoritmo histórico já concebido por S. F. Meninos para avaliar integrais moleculares genéricas por meio da diferenciação repetida de integrais fundamentais envolvendo apenas orbitais gaussianos do tipo s.

Após expor um pequeno resumo contendo uma identificação da abordagem dos artigos constituintes do *corpus* analítico, pode-se avaliar que dos 13 artigos selecionados pela indexação da pesquisa realizada todos tratavam de ensino de Química Quântica (mote da pesquisa) com assuntos iguais e diferentes entre eles dentro da Quântica. Apenas dois deles apresentaram uma aplicação de uma atividade / proposta / projeto, sendo o artigo 1 e o artigo 4. Com relação ao assunto da Quântica, pode-se citar a Química Medicinal, a Química Orgânica, Físico-Química, momento dipolo, reações químicas, teoria do estado da transição, orbitais.

Quanto ao nível de ensino indicado nos artigos foi apresentado apenas em 8 deles, artigos 1, 4, 5, 7, 8, 9, 11 e 13, sendo todos para Graduação, ou seja, Ensino Superior, nenhum deles para Ensino Médio ou seja para a Educação Básica, especificamente. Já com relação ao uso de computador, tecnologia, *software*, programa, simulador observou-se em 11 deles, sendo que os artigos 6 e 13 apresentaram um projeto de ensino que não fazia uso de tecnologias ou algo do gênero, apenas mitologias de ensino.

4. Considerações Finais

Percebe-se que a Quântica mostra-se como um assunto que tem tido evidência em dias atuais e, que tem se mostrado tão importante diante dos estudos científicos e aplicações que ela apresenta, sendo presente em discussões como indústria 4.0, WEB 3.0, computação quântica, televisores quânticos, *internet* das coisas, *smartphones*, inteligência artificial, medicina, GPS, metrologia, entre tantos outros, ainda é pouco estudado quando de sua associação com o ensino, ou seja, ainda é pouco retratado nos currículos escolares.

A pesquisa em questão apresenta um viés para a área do ensino em forma de levantamento bibliográfico, para verificar como está o panorama destes assunto em publicações. Os artigos encontrados totalizaram 63 em uma base de dados de importância como a *Web of Science*, sendo que desses 63 artigos, após uma avaliação prévia resultaram em uma quantidade de 13 artigos, uma filtragem de conteúdo pelo tema escolhido. Pode-se perceber que desses, a maioria estava voltada para o Ensino Superior, enquanto que a Educação Básica permaneceu ausente nessas pesquisas, não sendo detectado nenhuma publicação neste âmbito.

O emprego das tecnologias é utilizado para melhoria da compreensão dos estudantes, ou seja, para melhor agilizar o ensino e a aprendizagem, e é evidente na maioria das publicações, pois em se tratando de Química Quântica, um mundo micro, a compreensão por vezes está entrecortada pela abstração do conteúdo, dificultando a aprendizagem, munindo-se, assim, das tecnologias e representações para uma visualização e, conseqüentemente, uma possível aprendizagem.

Assim, detecta-se uma lacuna a ser preenchida que, carece ser debatida, em vias de que tem emergido com os avanços tecnológicos como citado anteriormente. E que as tecnologias (aqui emprega-se tecnologia, pois está diretamente associada à Quântica) estão mais e mais disponíveis e evidentes, tomando conta do cotidiano como um todo, seja para comunicação, estudos, informações, facilidades no dia a dia entre tantos outros. E para melhor aprendizagem faz-se fundamental compreender o assunto desde a Educação Básica até o Ensino Superior e a Pós-Graduação.

E, assim vê-se a importância de novos estudos acerca de como essa Teoria Quântica tem chegado às salas de aulas, se tem chegado, e, possivelmente, propostas de como fazê-la chegar à Educação Básica, já que o conteúdo faz parte, e é intrínseco a várias temáticas de Química, como modelos atômicos, porém acaba passando ao largo de uma possibilidade de angariar interesse do aluno por meio de um conteúdo contextualizado e presente no cotidiano desses estudantes.

Referências

- Araújo Neto, W. N. de. (2007). A noção clássica de valência e o limiar da representação estrutural. *Química Nova na Escola*, 7(4), 13-23.
- Arroio, A., Honório, K. M., Weber, K. C., Homem-de Mello, P., & Silva, A. B. F. (2005). O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. *Química Nova*, 28(2), 360-363.
- Assis, A. M. A. D., & Bello, M. E. D. R. B. (2012). O conteúdo "Modelos Atômicos" em livros didáticos do Ensino Médio de diferentes PNLEM. *XVI ENEQ / X EDUQUI*.
- Bardin, L. (2011). *Análise de conteúdo*. São Paulo: Edições 70.
- Bastos, C. C., & Leito, B. S. (2017). Analysis and Validation of Dipole Moment Calculations in Chemistry Teaching. *Orbital: The Electronic Journal of Chemistry*, 9(5), 360-368.
- Brasil. (2015). *Orientações educacionais complementares aos Parâmetros Curriculares Nacionais*. Ciências da Natureza, Matemática e suas Tecnologias, 32.
- Canneaux, S., Bohr, F., & Henon, E. (2014). KiSThELP: a program to predict thermodynamic properties and rate constants from quantum chemistry results. *Journal of computational chemistry*, 35(1), 82-93.
- Cervo, A. L., & Bervian, P. A. (1996). Metodologia científica. In: *Metodologia científica* (pp. xiv-209).
- Flükiger, P., Vacek, G., Hilger, A., & Lüthi, H. P. (1997). Teaching ab initio Quantum Chemistry in a Networked Environment. *Chimia – International Journal for Chemistry*, 51(3), 100-106.
- Hoehn, R. D., Mack, N., & Kais, S. (2014). Using quantum games to teach quantum mechanics, Part 1. *Journal of Chemical Education*, 91(3), 417-422.
- Hoehn, R. D., Mack, N., & Kais, S. (2014). Using quantum games to teach quantum mechanics, Part 2. *Journal of Chemical Education*, 91(3), 423-427.
- Hoffmann, R., & Malrieu, J. P. (2020). Simulation vs. Understanding: A Tension, in Quantum Chemistry and Beyond. Part A. Stage Setting. *Angewandte Chemie – International edition*, 59(31), 12590-12610.
- Leal, R. C., Moita Neto, J. M., Lima, F. D. C. A., & Feitosa, C. M. (2010). A química quântica na compreensão de teorias de química orgânica. *Química Nova*, 33(5), 1211-1215.
- Monte, S. A. D., & Ventura, E. (2011). A importância do método de Hartree no ensino de química quântica. *Química Nova*, 34(3), 527-534.

Nagaoka, S. I., Kokubo, T., Teramae, H., & Nagashima, U. (2018). Practical Training in Simple Hückel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals. *Journal of Chemical Education*, 95(9), 1579-1586.

Oliveira, J. D. S. (2016). Proposta de um novo programa de Atomística para o ensino médio, com a inserção de conceitos de Química Quântica.

Orsini, G. (2015). Exploring Do-It-Yourself Approaches in Computational Quantum Chemistry: The Pedagogical Benefits of the Classical Boys Algorithm. *Journal of Chemical Education*, 92(11), 1853-1859.

Pessoa Jr., O. (2007). A representação pictórica de entidades quânticas da química. *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola*, 7, 25-33.

Polik, W. F., & Schmidt, J. R. (2022). WebMO: Web-based computational chemistry calculations in education and research. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 12(1), e1554, 1-31.

Ramos, L. C., Silva, J. C., & Silva, J. L. D. P. B. Modelo atômico quântico em coleções de química aprovadas no PNLD 2015. Parte I: quantum de energia, dualidade onda-partícula e números quânticos.

Rother, E. T. (2007). Revisão sistemática X revisão narrativa. *Acta Paulista De Enfermagem*, 20(2), v-vi.

Weymuth, T., & Reiher, M. (2021). Immersive interactive quantum mechanics for teaching and learning chemistry. *Chimia – International Journal for Chemistry*, 75(1-2), 45-49.