



**UEPB**

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA  
CAMPUS I**

**CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA - CCT  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA  
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA**

**HEMILLY OLIVEIRA SOUZA**

**QUÍMICA QUÂNTICA E QUÍMICA QUÂNTICA COMPUTACIONAL NO  
CURRÍCULO DOS CURSOS DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DO BRASIL**

**CAMPINA GRANDE  
2021**

HEMILLY OLIVEIRA SOUZA

**QUÍMICA QUÂNTICA E QUÍMICA QUÂNTICA COMPUTACIONAL NO  
CURRÍCULO DOS CURSOS DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DO BRASIL**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado ao Curso de Licenciatura em  
Química da Universidade Estadual da  
Paraíba, como requisito parcial à  
obtenção do título de graduada em  
Licenciatura em Química

**Orientador:** Prof. Dr. Juracy Régis de Lucena Júnior.

**CAMPINA GRANDE  
2021**

É expressamente proibido a comercialização deste documento, tanto na forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

S726q Souza, Hemilly Oliveira.  
Química Quântica e Química Quântica Computacional no currículo dos cursos de licenciatura em Química do Brasil [manuscrito] / Hemilly Oliveira Souza. - 2021.  
43 p. : il. colorido.

Digitado.  
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Química) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2021.  
"Orientação : Prof. Dr. Juracy Régis de Lucena Júnior , Departamento de Química - CCT."

1. Química Quântica. 2. Química Quântica Computacional.  
3. Currículo escolar. 4. Ensino de Química. I. Título

21. ed. CDD 541.34

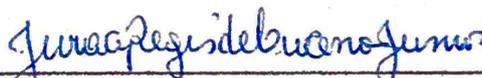
HEMILLY OLIVEIRA SOUZA

QUÍMICA QUÂNTICA E QUÍMICA QUÂNTICA COMPUTACIONAL NO CURRÍCULO  
DOS CURSOS DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DO BRASIL

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado ao Curso de Licenciatura em  
Química da Universidade Estadual da  
Paraíba, como requisito parcial à  
obtenção do título de graduada em  
Licenciatura em Química

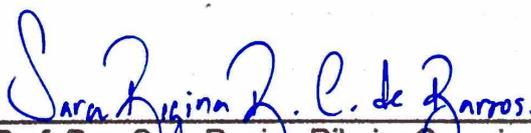
Aprovada em: 26/05/2021

**BANCA EXAMINADORA**



---

Prof. Dr. Juracy Régis de Lucena Júnior  
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



---

Prof. Dra. Sara Regina Ribeiro Carneiro de Barros  
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



---

Profa. Dra. Elizete Ventura do Monte  
Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

Ao meu pai, mãe, irmãs, amigos,  
professores e orientador, pela dedicação,  
companheirismo e amizade, DEDICO.

“Quando você muda a maneira  
como você vê as coisas, as coisas  
que você vê mudam”- Max Planck

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO .....</b>	<b>8</b>
<b>2. REVISÃO DA LITERATURA.....</b>	<b>10</b>
<b>2.1. Contexto Histórico da Química Quântica e Computacional.....</b>	<b>10</b>
<b>2.2. Importância da Química Quântica na formação do Licenciado em Química.....</b>	<b>28</b>
<b>3. METODOLOGIA .....</b>	<b>33</b>
<b>4. RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>35</b>
<b>5. CONCLUSÃO .....</b>	<b>39</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>41</b>

# QUÍMICA QUÂNTICA E QUÍMICA QUÂNTICA COMPUTACIONAL NO CURRÍCULO DOS CURSOS DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DO BRASIL

## RESUMO

“Supremacia Quântica” foi assim que o Google® anunciou em 2019 o processador quântico Sycamore, capaz de executar em 200 segundos uma tarefa específica que os melhores supercomputadores do mundo levariam 10 mil anos para concluir. O futuro é quântico, e como professores devemos estar preparados para isso, mas será que estamos? O presente trabalho busca responder a esta pergunta. Portanto, será demonstrado a importância histórica e técnica dos componentes curriculares das áreas de química quântica (Q.Q) e química quântica computacional (Q.Q.C), seguido de um levantamento de dados, sobre a presença ou ausência destes, nos currículos dos cursos de licenciatura em química do Brasil. O levantamento mostrou que dos 242 cursos de licenciatura em química ofertados pelas Instituições de Ensino Superior (IES) públicas e presenciais do Brasil, apenas 40 trazem em sua matriz curricular obrigatória componentes na área de Q.Q, e apenas 1 na área de química quântica computacional. A oferta destes mesmos componentes de forma eletiva é mais comum, o que demonstra desmerecer a base que a Q.Q traz para o entendimento das demais disciplinas. Espera-se ao final deste artigo poder responder a esta pergunta e trazer soluções para formar professores de química realmente capacitados para o futuro que já começou.

**Palavras-chave:** Química Quântica. Química Quântica Computacional. Currículo Escolar. Ensino de Química

## ABSTRACT

“Quantum Supremacy” was how Google® announced in 2019 the quantum processor Sycamore, capable of performing in 200 seconds a specific task that the best supercomputers in the world would take 10,000 years to complete. The future is quantum, and as teachers we must be prepared for it, but are we? The present work aims to answer this question. Therefore, the historical and technical importance of the curricular components of the areas of quantum chemistry (QQ) and quantum computational chemistry (QQC) will be emphasized, followed by a survey of data, on the presence or absence of these components, in the curricula of undergraduate courses in chemistry in Brazil. The survey revealed that of the 242 degree courses offered by public and on-campus Higher Education Institutions (IES) in Brazil, only 40 have components in the Q.Q area in their elementary curriculum, and only 1 in the area of computational quantum chemistry. The offer of these same components in an elective way is more common, which demonstrates neglecting the basis that a Q.Q brings to the understanding of the other disciplines. It is hoped that at the end of this article, this question can be answered and could bring solutions to graduate chemistry teachers truly qualified for the future that has already begun.

**Keywords:** Quantum Chemistry. Computational Quantum Chemistry. School Curriculum. Chemistry Teaching

## 1. INTRODUÇÃO

Do que o mundo é feito? Desde o surgimento da humanidade essa pergunta vem intrigando muitos pensadores que ao longo dos séculos vem tentando responder essa pergunta. Pode-se dividir as tentativas de esclarecer esses questionamentos em dois campos: o filosófico e o científico. No campo filosófico das idéias as concepções de pensadores importantes como Empédocles, Aristóteles, Leucipo e Demócrito marcaram as primeiras tentativas de se explicar a matéria e as transformações sofridas por estas. As concepções científicas a respeito da matéria surgiram no início do século XIX com o químico, meteorologista e físico britânico John Dalton. A partir do modelo de Dalton é comum os professores de licenciatura em química traçarem uma linha do tempo abordando a evolução desses modelos ao longo dos anos, partindo do conceito de matéria contínua para a descontínua. Ao chegar no modelo de Bohr, os professores abordam pela primeira vez o conceito de *quanta*, tal metodologia apesar de ser muito utilizada, exclui o surgimento, o contexto histórico e científico e os cientista que estão por trás da teoria que mudou o mundo: a teoria quântica.

A teoria quântica teve início, a partir de uma crise que a Física atravessava no fim do século XIX, pois neste período haviam alguns fenômenos naturais que não eram explicados pelas teorias físicas até então existentes, como a (a) radiação de corpo negro, (b) o efeito fotoelétrico, (c) as características ondulatórias do elétron em experimento de dupla fenda e o experimento de Stern-Gerlach. As respostas para estes fenômenos levaram a revolução quântica que mudou nosso mundo nos aspectos tecnológicos, científicos e filosóficos. Boa parte da incrível tecnologia que foi desenvolvida desde a década de 1930 - o computador, os scanners médicos, os lasers, todas as coisas com um chip dentro - resulta da aplicação da teoria quântica à compreensão do comportamento do mundo subatômico. A mecânica quântica não apenas gerou ciências que não existiam antes dela, mas também enriqueceu imensamente algumas das mais veneráveis áreas de estudo, como a Química e a Física (SOBRAL, 2019).

O impacto da teoria quântica não só mudou o presente, como também mudará o futuro. Para Dario Gil (2017), diretor da International Business Machines (IBM), “Embora ainda seja cedo, esperamos realizar o verdadeiro potencial da computação quântica. O ano de 2020 alimentou nosso otimismo de que a

computação quântica abrirá novas portas nas áreas de química, otimização e aprendizado de máquina nos próximos anos. Devemos saborear esse período da história da tecnologia da informação quântica, no qual estamos realmente no processo de reinicialização da computação.”

Se o objetivo das Instituições de Ensino Superior (IES), é formar profissionais para o futuro, estariam os professores de química o mínimo preparados para o futuro que está por vir? Para responder a esta pergunta é necessário analisar a presença dos componentes das áreas de química quântica e química quântica computacional nos currículos dos cursos de licenciatura em química do Brasil.

O presente trabalho, traz uma abordagem histórica e técnica dessa ciência a fim de demonstrar sua importância, além de fazer um levantamento de dados, sobre como as IES tratam esses componentes na matriz dos currículos dos cursos de licenciatura em química, mostrando assim, a importância e a urgência de estimular esse debate nos setores deliberativos da instituição a fim de promover a mudança no currículo do curso.

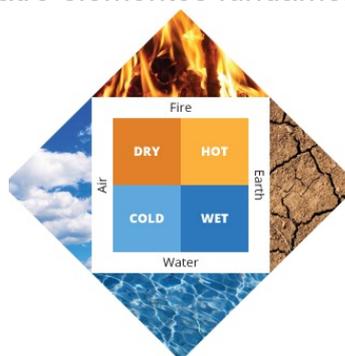
## 2. Revisão da Literatura

### 2.1. Contexto Histórico da Química Quântica e Computacional

A um dado momento, do Uno saiu o Múltiplo. Por divisão – fogo, água, terra e ar altaneiros; e o Uno se formou do Múltiplo. Ódio, temível, de peso igual a cada um, e o Amor entre eles (SIMPLÍCIO. Física, 157). essa visão do filósofo e pensador pré-socrático grego Empédocles (495a.C. - 430a.C.), marca a história como uma das primeiras tentativas de explicar a matéria. Segundo sua cosmogonia, todos os seres, sem qualquer exceção, são composições das quatro raízes primordiais de tudo: fogo, terra, ar e água (COSTA, 2012, p. 99) esses quatro elementos se unem e se separam, formando os diversos seres da natureza, porém em proporções diferentes em cada ser, unidos pelo amor e separados pelo ódio.

Por volta de 350 a.C. o filósofo grego Aristóteles (384-322 a.C) retomou a ideia de Empédocles que se baseia nos quatro elementos clássicos, aos quais o Filósofo acrescentou o Éter, sendo esta a quintessência, o quinto e mais alto elemento da filosofia antiga que permeia toda a natureza e é a substância que compõe os corpos celestes (SPARAVIGNA, 2013, p.42). Aristóteles estabelece dentro de sua física um lugar natural para cada um dos elementos. O lugar natural da terra é o centro do universo, a água fica logo acima dele. A região do ar situa-se acima da água e abaixo da esfera do fogo, que é a última região sublunar (CECON, 2013, p.70). O filósofo ainda estabelece outras conjecturas teóricas interessantes em seu sistema como, por exemplo, na obra Geração e Corrupção, para cada um dos elementos, ele associa duas qualidades distintas que lhe são associadas, como pode ser visto na Figura 1:

**Figura 1** - Os quatro elementos fundamentais segundo Aristóteles



Fonte: VisionLearning

Um material sólido pode entrar em ignição com o aumento de temperatura; a exemplo da madeira que pega fogo, passando de “frio e seco” (terra) para “quente e seco” (fogo). Até mesmo fenômenos como a formação de meteoros poderiam ser explicados, uma parte da esfera do fogo, que é “quente e seco”, pode esfriar, gerando um material que é “frio e seco” (terra). Essa mesma terra transmutada formada na esfera do fogo vai tender a ir ao seu lugar natural e vai cair em direção ao centro da Terra.

Demócrito (460 a.C.-360a.C.) e seu mestre, Leucipo (500a.C.-420a.C), dois filósofos pré-socrático gregos, apresentaram uma teoria que ia de encontro às crenças de Aristóteles, denominada teoria cosmológica, que definia como princípio de tudo (*arché*) o que eles chamavam de átomos (aquilo que não pode ser dividido). Os átomos, além de indivisíveis, são também sólidos, compactos e podem ter inúmeros formatos. Diferentes combinações de diferentes átomos dão origem à variedade de coisas no mundo (FILGUEIRAS, 2004, p. 38). Estes filósofos são considerados pensadores pluralistas, pois eles não apresentaram apenas um elemento como origem fundadora de tudo, mas basearam a sua *arché* em múltiplos elementos (os átomos). As teorias de Leucipo e Demócrito deram origem à Química como estudo sistemático dos elementos que compõem a natureza.

Muitas outras abordagens do conceito de átomo apareceram ao longo do tempo, todas elas partilharam com aquelas que aqui foram delineadas o seu caráter de pura especulação filosófica. Somente no início do século XIX é que surgirá, com John Dalton (1766-1844), uma teoria atômica operacional (FILGUEIRAS, 2004, p. 40). Motivado pelo estudo dos fenômenos atmosféricos, e fortemente influenciado pelo corpuscularismo newtoniano, John Dalton, a partir de uma série de observações experimentais sobre o vapor de água e a mistura de gases, propôs a lei das pressões parciais para os gases e concluiu que toda a matéria, assim como os gases, deve ser constituída de pequenas partículas. A primeira comunicação oral de Dalton a respeito da teoria atômica foi lida por ele na Sociedade Literária e Filosófica de Manchester em 21 de outubro de 1803, e era capaz de explicar várias leis das combinações químicas. Segundo Dalton: os elementos são constituídos de pequenas partículas esféricas, maciças e indivisíveis - os átomos; átomos de um mesmo elemento possuem as mesmas características, portanto são idênticos; átomos de elementos distintos apresentam diferentes características e átomos não

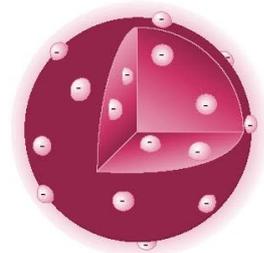
podem ser criados, divididos ou destruídos durante as reações químicas (FILGUEIRAS, 2004, p. 42).

Após concluir seu raciocínio, Dalton propôs a notação simbólica dos elementos químicos composta por círculos, letras, pontos e linhas. A Teoria Atômica, porém, não teve uma aceitação pronta e universal; muito pelo contrário. Apesar do apoio de químicos eminentes como Berzelius, muitos outros cientistas de renome relutaram em aceitá-la. A determinação experimental dos pesos atômicos permaneceu precária por muito tempo, e a confusão que frequentemente se fazia entre átomos e moléculas ajudou a manter a incerteza. Por isso, durante a maior parte do século XIX preferiu-se trabalhar com o conceito de peso equivalente ao das espécies químicas, no lugar de peso atômico ou molecular. Só nas últimas décadas dos oitocentos é que a situação começaria a esclarecer-se e a teoria atômica de Dalton passaria a ocupar pouco a pouco o lugar de proeminência que ela goza na Química (FILGUEIRAS, 2004, p. 43).

O físico britânico vencedor do Nobel de Física de 1906, Joseph John Thomson (1856–1940), foi sem dúvida nenhuma o grande divulgador da teoria atômica de Dalton, com a qual tomou contato em Manchester, no mês de agosto de 1804. Em torno de 1850, Geissler e Crookes desenvolveram um dispositivo chamado tubo de raios catódicos para estudar a condução da corrente elétrica. Fazendo uso desta aparelhagem, Thomson verificou que os raios catódicos que se propagavam em linha reta eram desviados por ação de campos elétricos e magnéticos, evidenciando assim, a presença de partículas carregadas negativamente (BARIN, p.4). Em 1897, Thomson anunciou a descoberta de um corpúsculo. Outros logo o chamaram de elétron, apesar da preferência teimosa de Thomson por seu termo original, emprestado de Robert Boyle (1627-1691) para denotar qualquer estrutura semelhante a uma partícula. Logo depois, Thomson começou a pensar em como explicar a periodicidade dos elementos químicos em termos desses corpúsculos carregados negativamente. Os corpúsculos teriam que ter posições estáveis dentro do átomo, ligados por forças eletrostáticas e possivelmente cinéticas. Como, em condições normais, os átomos são eletricamente neutros, a carga elétrica total desses elétrons carregados negativamente teve que ser compensada por uma quantidade igualmente forte de carga positiva. Ele visualizou os elétrons muito pequenos carregados negativamente pontilhando o átomo como passas dentro de um bolo ou como ameixas em um pudim, daí o

apelido popular para o modelo atômico de Thomson como o "modelo de pudim de ameixa"(KRAGH, 2010, p.12-13).

**Figura 2 - Modelo Atômico de Thomson**



**Fonte:** PasseinaFuvest

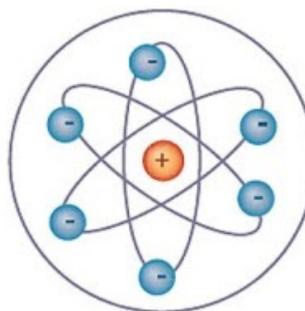
O físico e químico neozelandês Ernest Rutherford (1871-1937) tinha uma reputação científica que se baseava em suas contribuições pioneiras para o estudo da radioatividade, o Prêmio Nobel em 1908, foi na química por seu trabalho sobre a decadência radioativa, ele tinha definitivamente mostrado que a partícula alfa era idêntica a um íon de hélio duplamente carregado, embora a natureza do íon fosse desconhecida. No mesmo ano, Hans Geiger, um físico alemão que trabalhava com ele em Manchester, relatou resultados preliminares do espalhamento de partículas alfa em folhas de metal. Em 1910 Rutherford voltou-se seriamente para a teoria atômica, os experimentos induziram Rutherford a investigar o espalhamento de partículas alfa e comparar os resultados com a teoria de Thomson de 1910 sobre o espalhamento de partículas beta. De acordo com Thomson, a partícula alfa tinha dimensões atômicas e continha de 10 a 12 elétrons. Rutherford, por outro lado, chegou à conclusão de que a partícula alfa deve ser considerada uma partícula pontual, como o elétron, porém positiva. (KRAGH, 2010, p.44). No final de 1910, ele estava concentrado em uma nova imagem de estrutura atômica consistente com os experimentos do espalhamento.

Em uma carta ao radioquímico americano Bertram Boltwood de 14 de dezembro de 1910, ele escreveu:

"Acho que posso conceber um átomo muito superior ao de JJ, para a explicação e parada das partículas  $\alpha$  e  $\beta$ , ao mesmo tempo acho vai se encaixar extraordinariamente bem com os números experimentais"(Badash 1969, p. 235)

Em 1911, Rutherford apresentou seu átomo novo e superior, em um artigo marcante na *Philosophical Magazine* (KRAGH, 2010, p.44), e postulou que a maior parte da massa e da carga positiva do átomo encontram-se em uma pequena região - o núcleo, que é circundado por espaços vazios, no qual os elétrons movimentam-se. O modelo atômico de Rutherford ficou conhecido como modelo atômico planetário. (BARIN, p.5)

**Figura 3** - Modelo Atômico de Rutherford



Fonte: PasseinaFuvest

Rutherford apresentou sua teoria principalmente como uma teoria de espalhamento e percebeu que, considerada como uma teoria da estrutura atômica, era a mais incompleta. O modelo era falho na explicação de desvios em ângulos muito pequenos ( $<1^\circ$ ); não levava em conta outras forças além da repulsão eletrostática, as quais eventualmente pudessem atuar a distâncias bem próximas do núcleo, e, sobretudo, o comprometimento da estabilidade atômica, uma consequência da emissão de radiação pelos elétrons em seus movimentos ao redor do núcleo, o que os levaria a perder velocidade progressivamente seguindo então uma trajetória espiralada até caírem definitivamente no núcleo, o que na realidade não ocorre (TAVARES, 2011, p.7).

O átomo nuclear introduzido por Rutherford no final da primavera de 1911 não causou impacto no mundo da física. Surpreendentemente, de uma perspectiva posterior, o modelo foi recebido com indiferença e dificilmente considerado uma nova teoria. Não foi mencionado nos procedimentos do primeiro Congresso Solvay, ocorrido no outono de 1911 com Rutherford como participante, nem recebeu muita atenção nas revistas de física (KRAGH, 2010, p.47).

Logo após a conferência Solvay, Ernest Rutherford retornou à Inglaterra, e discutiu as ideias levantadas durante a conferência com um jovem dinamarquês que

estava trabalhando em seu laboratório, Niels Bohr. Foi a partir dessas informações que Bohr iniciou sua pesquisa sobre a explicação quântica do espectro do hidrogênio. (JAMMER, 1966,p.61).

Os químicos, em particular, não começaram a pensar em termos de quanta até 1913, quando Bohr aplicou a teoria quântica para os problemas de estrutura atômica, que obviamente teve implicações químicas. (LAIDLER, 1990)

Os estudos sobre radiação do corpo negro se iniciaram em 1859 com os trabalhos de Gustav Robert Kirchhoff (1824-1887), através de argumentos termodinâmicos e analisando vários corpos em equilíbrio termodinâmico, Kirchhoff provou, entre outras coisas, que o fluxo de radiação absorvida é igual ao fluxo de radiação emitida. por isso, se uma superfície for totalmente negra (no caso do corpo negro), ela será também, na situação de equilíbrio térmico, o melhor emissor de radiação. Para isso, ele estabeleceu relações simples entre a densidade de radiação  $u$  dentro da cavidade e o fluxo de energia  $\Phi$  que é emitido pelo furo:  $u = \frac{4\Phi}{c}$  (P.S. ROSA, 2004, p.7). Outros passos importantes foram dados por Josef Stefan (1835-1893) (PAIS, 1979, p.867) e por Ludwig Boltzmann (1844-1906) que levaram a deduções importantes como a “equação de Stefan-Boltzmann” mostrando que a densidade de energia da cavidade deveria ser proporcional à quarta potência da temperatura. Embora a análise de Boltzmann tenha permitido determinar o fluxo total de energia em função da temperatura, o espectro da radiação do corpo negro não estava determinado. Wilhelm Wien (1864-1928) estudou esse problema em 1894 (MEHRA & RECHENBERG, 1982, vol, 1.1, pp. 29-31) e a partir de sua lei “Lei de Wien” descreveu a distribuição de energia do espectro da radiação do corpo negro.

Inicialmente, Max Planck aceitava a teoria de Wien como correta. No entanto, a lei de Wien não havia sido deduzida, propriamente. A partir de 1897, Planck procurou encontrar uma demonstração dessa distribuição espectral da radiação do corpo negro baseando-se em considerações de termodinâmica e do eletromagnetismo (MEHRA & RECHENBERG, 1982, vol. 1.1, p. 35). Até o início de 1900, a principal contribuição de Planck à teoria do corpo negro era ter “provado a lei de Wien, que antes se baseava em uma analogia. Por causa desse trabalho, a lei de Wien passou a ser chamada de lei de Wien-Planck.

Porém, medidas do espectro do corpo negro experimentais apresentaram resultados diferentes dessa lei para pequenas frequências. Com o intuito de resolver esse problema Lord Rayleigh, propõe em junho de 1900, uma nova lei para o

espectro do corpo negro. Porém, essa equação satisfazia as medidas de Lummer e Pringsheim, para pequenas frequências.

Em 1900 Rubens e Kurlbaum fizeram novas medidas que mostravam que a lei de Wien-Planck estava errada, e avisaram a Planck sobre seus resultados, antes de divulgá-los (MEHRA & RECHENBERG, 1982, vol. 1.1, p.43).

Tais contradições entre fatos reais/experimentais e previsões teóricas levaram a um famoso problema, a catástrofe do ultravioleta de Rayleigh e Jeans (BAGGOT, 2004). O problema considera que um corpo negro teria uma energia infinita, que é função da temperatura e da frequência da radiação eletromagnética. Dada uma frequência, a energia obtida é uma integral em um intervalo contínuo e isto faz com que esta integral resulte em valor infinito quando calculada para frequências na região do ultravioleta.

Planck voltou a seus cálculos e viu que tinha um ponto que não dependia diretamente do eletromagnetismo nem da termodinâmica, mas de um modelo de ressoadores. Como Rayleigh provou que suas condições estavam experimentalmente corretas, ele considerou que a energia média dos ressoadores também deveria ser proporcional à temperatura (P.S. ROSA, 2004, p.12).

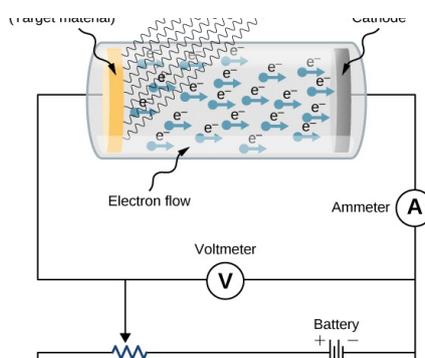
Planck havia anteriormente chegado à Lei de Rayleigh e agora os resultados conduziram à Lei de Wien. Logo ele combinou as duas leis e chegou a uma nova, que satisfazia os dados experimentais em todo o domínio das frequências (JAMMER, 1966, p. 18; MEHRA & RECHENBERG, 1982, vol. 1.1, p.43-44). No dia 19 de outubro de 1900, Planck apresentou esta equação, que é a famosa “Lei de Planck” para a radiação do corpo negro, à Sociedade Alemã de Física (PLANCK, 1900a). A fórmula foi apresentada sem justificativa teórica e no dia 14 de dezembro de 1900 Planck apresentou um segundo trabalho a Sociedade Alemã de Física (PLANCK, 1900b), onde fez o emprego de uma análise probabilística dos ressoadores, utilizando a estatística de Boltzmann. Para poder calcular a probabilidade das distribuições, Planck supôs que a energia estava dividida em elementos de energia com certo valor  $\epsilon$ .

O trabalho de Planck não teve uma repercussão imediata. (GARBER, 1976). Estudava apenas um fenômeno muito particular (a radiação do corpo negro), introduzia uma hipótese estranha e difícil de compreender, e não parecia um trabalho fundamental, que pudesse ser aplicado a outros campos (JAMMER, 1966;

p.23). Não se pode considerar que a maioria dos físicos percebesse, na época, que estava ali nascendo uma nova física (P.S. ROSA, 2004, p.16).

A ideia de Max Planck se arrastou por cinco anos, até que Albert Einstein (1879-1955) a usou em 1905, em outro fenômeno não explicado pela teoria ondulatória da luz, o efeito fotoelétrico (SOBRAL, 2019, p. 33). Este efeito foi descoberto experimentalmente pelo físico alemão Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894) em 1887. Hertz começou a estudar fenômenos luminosos em gases rarefeitos que, segundo ele, eram de grande interesse teórico (IBID, p.79), e constatou que o brilho de algumas faíscas melhoram o desempenho de um detector, concluiu que a luz emitida modificava algo no terminal negativo do equipamento experimental, feito de bronze, concebendo assim o efeito fotoelétrico. Com a morte prematura de Hertz, o físico húngaro Phillip Lenard (1862-1947), seu auxiliar, dá continuidade a suas pesquisas com o desenvolvimento de uma série de experimentos com o intuito de estabelecer uma relação entre a intensidade da luz e a energia dos elétrons emitidos. Este, consiste tipicamente em um tubo transparente (de vidro ou quartzo) mantido em vácuo e contendo uma placa emissora, cátodo e outra placa coletora, ânodo, que consiste de um metal nobre. O experimento consiste em iluminar a placa emissora com luz de uma frequência  $\nu$  suficientemente alta e bem definida, e medir a eventual corrente elétrica que pode ocorrer entre o catodo e o ânodo (VASCONCELLOS, C. A. Z, p. 2), como mostra a Figura 4.

**Figura 4 - Experimento do Efeito Fotoelétrico**



Fonte: OpenStax

Com o experimento, foi possível observar que a corrente elétrica medida no amperímetro surge quase que instantaneamente ao processo de iluminação do emissor, o atraso entre o tempo de iluminação e o surgimento de corrente elétrica é da ordem de  $10^{-9}$  s, ou seja, o processo é praticamente instantâneo, e independente

da intensidade da luz incidente. O que não coincidia com a teoria clássica, pois o tempo necessário para que um átomo irradiado por uma fonte acumule energia suficiente para emissão eletrônica é muito maior (cerca de 60s). Ademais, do ponto de vista clássico, quanto mais intensa for a luz incidente, mais energia se distribuiria sobre o cátodo e maior seria a energia cinética dos elétrons ejetados pois absorveriam maior quantidade de energia e isto se refletiria em uma maior energia cinética de emissão (VASCONCELLOS, C. A. Z, p. 3). Assim, a energia cinética média dos elétrons emitidos cresceria, com a intensidade da luz incidente, o que não acontece.

Einstein explicou o efeito fotoelétrico admitindo a hipótese de que a luz é constituída por pacotes concentrados de energia, que atualmente denominamos fótons, e assim, o fenômeno em questão é facilmente explicado quando consideramos a colisão entre os fótons da radiação incidente e os elétrons dos metais (SOBRAL, 2019, p. 33). Na visão quântica, a energia carregada por um fóton é absorvida inteiramente por um único elétron. Se o elétron é ejetado do material, a diferença entre a energia absorvida pelo elétron e a energia com a qual o elétron estava ligado à superfície do material aparece como energia cinética do elétron (VASCONCELLOS, C. A. Z, p. 4). Na mecânica quântica, para uma dada frequência  $\nu$ , cada fóton carrega energia  $\varepsilon = h\nu$ , onde  $h$ , é a constante de Planck.

Esta interpretação física explica porque a corrente elétrica medida no amperímetro, em uma experiência do efeito fotoelétrico, surge quase que instantaneamente ao processo de iluminação do emissor, mesmo para luz incidente de baixa intensidade: Como os fótons se propagam à velocidade da luz, o intervalo de tempo  $\Delta t$  entre o processo de absorção de um fóton com energia  $h\nu$  pelo cátodo e a correspondente ejeção de um elétron é inversamente proporcional a  $c$ , pois:  $\Delta t = \frac{\Delta x}{v} = \frac{\Delta x}{fc}$ . O aumento da intensidade da luz incidente por sua vez corresponde, na teoria de Einstein, ao aumento do número de fótons incidentes por unidade de tempo (fluxo), enquanto a energia de cada fóton permanece constante à medida em que a frequência da radiação permanece constante. Assim, na teoria de Einstein, ao aumentar a intensidade da radiação incidente, aumentaria o número de elétrons ejetados do catodo devido ao correspondente aumento de fótons incidentes, supondo cada fóton como sendo responsável pela ejeção de um único elétron (VASCONCELLOS, C. A. Z, p. 4).

Na época o seu trabalho não teve uma boa aceitação por conta que em 1902, Philipp Lenard (1862-1947) havia publicado um estudo sobre o efeito fotoelétrico, supondo que os elétrons no átomo já possuíam essa energia, e que a luz funciona como gatilho que libertava o elétron, e essa hipótese explicava as características conhecidas do fenômeno e tinha grande aceitação pela comunidade científica. Assim, não havia motivo nenhum, em 1905, para preferirem a hipótese de Einstein, e até essa época não havia ainda surgido um interesse real, na comunidade científica, sobre a ideia de quantização (P.S. ROSA, 2004, p.30)

No entanto, a situação muda em 1907, quando Einstein publicou um trabalho que teve enorme repercussão positiva (EINSTEIN, 1907) e no qual aplicou as idéias de Planck para desenvolver a teoria do calor específico dos sólidos (KUHN, 1978, pp. 210-212), procurando explicar por qual motivo esse calor específico tende a zero para baixas temperatura. Sua teoria supunha que as oscilações térmicas das partículas dos sólidos somente podiam adquirir valores de energia que fossem múltiplos de  $\varepsilon = h\nu$ . Uma das consequências da teoria era que, a baixas temperaturas (próximas ao zero absoluto) o calor específico de todas as substâncias deveria tender a zero (P.S. ROSA, 2004, p.30). Dois anos depois Einstein desenvolve um estudo sobre as flutuações da radiação do corpo negro, e conclui que isso também levaria a aceitar uma descontinuidade na energia radiante, esse trabalho em contrapartida, não teve boa aceitação.

Mas foi o seu trabalho de 1907 que influenciou fortemente Walther Nernst (1864-1941), a propor a realização de uma reunião internacional para discutir a teoria quântica. Foi o próprio Nernst quem, através de contatos com o químico e industrial belga Ernest Solvay, conseguiu que este patrocinasse o evento - a primeira "Conferência Solvay" da história ocorrida em outubro de 1911 em Bruxelas, cujo título foi "a teoria da radiação e os quanta" (JAMMER, 1966, p.59). Apesar do tema, o estímulo mais forte para essa conferência foi o desenvolvimento da teoria do calor específico dos sólidos, discutindo se seria possível interpretar classicamente esses fenômenos ou se era necessária a introdução de uma hipótese não-clássica (JAMMER, 1966, pp. 52-56).

Durante a conferência houve uma concordância geral de que o efeito fotoelétrico representava um problema, mas os quanta de luz não pareciam a ninguém (exceto Einstein) fornecer uma boa alternativa, porque conflitava com a teoria ondulatória da luz (WHEATON, 1983, p. 185).

Após o Congresso Solvay, a teoria quântica passou a receber maior atenção de um grande número de pesquisadores. No entanto, algumas pessoas que antes estavam envolvidas com o assunto - como Einstein e Stark - se afastaram do tema, nos anos seguintes. Em 1912, Einstein chegou a escrever a Sommerfeld que não tinha nada de novo a dizer sobre os quanta. (MEHRA & RECHENBERG, 1982, vol.1.1, p.137)

Um dos participantes da conferência Solvay foi Ernest Rutherford. Logo após retornar à Inglaterra, Rutherford discutiu as ideias levantadas durante a conferência com um jovem dinamarquês que estava trabalhando em seu laboratório - Niels Bohr (P.S. ROSA, 2004, p.64).

Estudando o movimento dos elétrons ao redor do núcleo, Bohr percebeu que a mecânica clássica por si só nunca poderia explicar a estabilidade do átomo. Um átomo estável tem um certo tamanho, de modo que qualquer equação que o descreve deve conter alguma constante fundamental ou combinação de constantes com uma dimensão de comprimento. As constantes fundamentais clássicas - a saber, as cargas e as massas do elétron e do núcleo - não podem ser combinadas para formar um comprimento. Bohr notou, entretanto, que a constante quântica formulada pelo físico alemão Max Planck tem dimensões que, quando combinadas com a massa e a carga do elétron, produzem uma medida de comprimento. Numericamente, a medida é próxima ao tamanho conhecido dos átomos. Isso encorajou Bohr a usar a constante de Planck na busca por uma teoria do átomo.

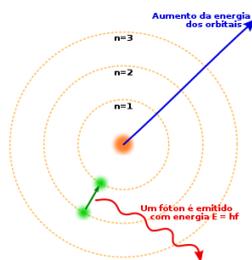
Usando a constante de Planck, Bohr obteve uma fórmula precisa para os níveis de energia do átomo de hidrogênio. Ele postulou que o momento angular do elétron é quantizado - ou seja, ele pode ter apenas valores discretos. Ele presumiu que, de outra forma, os elétrons obedecem às leis da mecânica clássica, viajando ao redor do núcleo em órbitas circulares. Por causa da quantização do momento angular, as órbitas de elétrons têm tamanhos e energias estacionárias. As órbitas são rotuladas por um número inteiro, o número quântico  $n$ . Como Bohr notou, o raio da órbita  $n = 1$  tem aproximadamente o mesmo tamanho de um átomo.

Com seu modelo, Bohr postulou que os elétrons só podiam saltar de uma órbita para outra emitindo ou absorvendo energias quantizadas. Por exemplo, se um elétron salta uma órbita mais perto do núcleo, ele deve emitir energia igual à diferença das energias das duas órbitas. Por outro lado, quando o elétron salta para

uma órbita maior, ele deve absorver um quantum de luz igual em energia à diferença em órbitas.

O modelo de Bohr (Figura 4) é responsável pela estabilidade dos átomos porque o elétron não pode perder mais energia do que na menor órbita, aquela com  $n = 1$ . O modelo também explica a fórmula de Balmer para as linhas espectrais do hidrogênio. A energia da luz é a diferença de energias entre as duas órbitas na fórmula de Bohr. A utilidade da teoria de Bohr se estende além do átomo de hidrogênio. O próprio Bohr observou que a fórmula também se aplica ao hélio ionizado (ECKERT, 2014, p.149).

**Figura 5 - Modelo Atômico de Bohr**



Fonte: NOIC

Embora o modelo de Bohr tenha sido um passo importantíssimo em direção ao modelo correto da estrutura dos átomos, o modelo apresenta falhas importantes, por exemplo: Não é capaz de explicar o efeito Zeeman anômalo (que envolve o spin do elétron) e o espectro do átomo de hélio. O modelo de Bohr tem dificuldades em explicar os espectros de átomos mais complexos, e do ponto de vista teórico é um híbrido entre a física clássica e a quântica, mesmo que para muitos um híbrido insatisfatório. Por volta de 1925, e mesmo antes, o átomo de Bohr é deixado de lado em favor da nova mecânica quântica de Heisenberg e Schroedinger (PARENTE, 2013, p. 6)

Em resposta ao artigo de Bohr intitulado “Sobre a constituição de átomos e moléculas”, o físico teórico alemão Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1869-1951) respondeu:

Agradeço muito por me enviar seu artigo extremamente interessante, [...], o problema de expressar a constante de Rydberg-Ritz em termos da constante de Planck há muito está na minha mente. Alguns anos atrás, contei a Debye sobre isso. Embora no momento eu ainda seja um tanto

cético quanto aos modelos atômicos em geral, calcular essa constante é, sem dúvida, um grande feito. (HOYER, 1981, p. 123).<sup>31</sup>

Entre 1914 e 1915, Sommerfeld começou a generalizar a teoria de Bohr, para tentar explicar a estrutura fina das linhas espectrais do hidrogênio, e para isso, incluiu o tratamento de órbitas elípticas. Inicialmente a análise do modelo atômico com órbitas elípticas não levou a qualquer novo resultado significativo. Os níveis de energia obtidos eram iguais aos do modelo de Bohr com órbitas circulares. Em 1916, Sommerfeld não apenas substituiu órbitas circulares por elípticas, como também introduziu a dinâmica relativística na análise do movimento dos elétrons, além de quantizar o movimento. Foi a primeira vez que a teoria quântica e a relatividade foram utilizadas juntas (SCMIDT, D. G, 2008, p 16-17).

Uma órbita circular pode ser descrita pelo seu raio enquanto a órbita elíptica pode ser caracterizada por duas grandezas (o semi-eixo maior ( $a$ ), e menor, ( $b$ )). Na física clássica, a energia total do movimento de uma partícula em órbita elíptica depende apenas do valor do semi-eixo maior. Sob o ponto de vista da teoria quântica, a energia total é associada ao “número quântico principal”,  $n$ . A razão  $a/b$  entre os semi-eixos da elipse também é quantizada, sendo dada por  $n/k$ , onde  $k$  é um novo número quântico (azimutal). Pela dinâmica clássica, esse número azimutal não influi na energia, porém a luz da dinâmica relativística, a energia passa a ser ligeiramente diferente dependendo da excentricidade da órbita, ou seja, depende de  $k$ . Assim, Sommerfeld conseguiu explicar a estrutura fina das raias espectrais. Ao introduzir um novo número quântico  $m$  (“magnético”), que estava associado ao ângulo formado entre o campo magnético e o plano da órbita do elétron, Sommerfeld também explica os desdobramentos das raias espectrais quando o gás está submetido a um forte campo magnético, no efeito Zeeman anômalo (SCMIDT, D. G, 2008, p 17-18).

Durante esse período a teoria quântica teve um forte desenvolvimento, mas a natureza do quantum e da radiação permanecem obscuras. Entretanto, pesquisas sobre raios X trouxeram o problema da dualidade à tona, porque essa radiação exibe de um modo notável várias propriedades corpusculares, embora também exiba propriedades ondulatórias na difração por cristais. Uma fortíssima evidência a favor da natureza corpuscular dos raios X foi a descoberta em 1922-1923 do físico

estadunidense Arthur Holly Compton (1892-1962), o Efeito Compton (P.S. ROSA, 2004, p.vi-vii) .

Na primeira década do século XX, o espalhamento de raios X pela matéria era explicado pela teoria clássica, no entanto, ao utilizar raios X mais penetrantes ou raios  $\gamma$ , a distribuição angular da radiação apresentava efeitos diferentes aos previstos. Além disso, o comprimento de onda da radiação espalhada aumentava, o que não coincidia com a teoria de J.J.Thomson, que previa que a radiação espalhada deveria ter o mesmo comprimento de onda da radiação incidente (COMPTON, 1923, p.485). Após vários anos tentando explicar este fenômeno, utilizando a teoria ondulatória, Compton começou a explorar, no final de 1921, a hipótese dos quanta. A partir de seus experimentos, Compton mostrou que a variação do comprimento de onda de raios X espalhados pela matéria pode ser interpretada quantitativamente supondo-se que os raios X são constituídos por quanta de energia  $E = h\nu$  e momentum  $p = \frac{h\nu}{c}$ , e que para analisar a “colisão” desses quanta com os elétrons na matéria, era necessário fazer uso da dinâmica relativística (P.S. ROSA, 2004, p.79) .

Embora o efeito Compton fosse fortemente favorável à hipótese corpuscular, isso não resolvia o problema, pois era necessário explicar também os fenômenos de tipo ondulatório dos raios X, e não existia nenhuma teoria que conciliasse os dois tipos de hipóteses (P.S. ROSA, 2004, p.80).

A partir de 1921, sob a influência de Dauvillier e de Maurice, Louis de Broglie começou a se preocupar com os fenômenos quânticos associados aos raios X (WHEATON, 1983, p. 275). Nessa época, eles discutiram “a angustiante questão” das propriedades ondulatórias e corpusculares da radiação (DE BROGLIE, 1987, p. 35).

Essas longas conversas com meu irmão sobre as propriedades dos raios X, [...] tiveram para mim a vantagem de me fazer refletir profundamente sobre a necessidade de sempre associar os pontos de vista corpuscular e ondulatório [...].(DE BROGLIE, 1987, p.40)

No seu primeiro artigo de 1923, Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7º duque de Broglie (1892-1987) aplicou suas idéias para explicar as condições de quantização do átomo de hidrogênio. Ele imaginou que o elétron, ao se mover em uma órbita em torno do núcleo, se comporta como onda de matéria, cuja fórmula:  $\lambda = \frac{h}{mv}$  relaciona o comprimento de onda,  $\lambda$  associada à partícula (elétron) de massa  $m$ , que se move

a uma velocidade  $v$ , sendo  $h$  a constante de Planck. O produto  $mv$  é também o módulo do vetor  $p$ , ou quantidade de movimento da partícula. As ondas, devem estar sempre em fase com a vibração do elétron e que por serem mais rápidas que o elétron, devem completar a volta antes dele e encontrar novamente o elétron, adquirindo a mesma fase que tinham antes. A partir daí, ele obteve uma condição de quantização das órbitas eletrônicas. Para de Broglie, as condições de quantização de Bohr-Sommerfeld para as órbitas eletrônicas somente poderiam ser entendidas em termos de ondas estacionárias e foi esta observação que o levou a postular a existência das ondas de matéria (JAMMER, 1966).

A hipótese de de Broglie, ao associar cada partícula com uma onda, influenciou o alemão Erwin Schrödinger (1887-1961) a escrever a equação de propagação das ondas de matéria. Para Schrödinger, a forma como de Broglie foi capaz de explicar as condições de quantização de Bohr-Sommerfeld sugeria a ideia que a quantização pudesse ser tratada como um problema de autovalor, muito comum no estudo das ondas (JAMMER, 1966). De Broglie havia proposto que toda partícula material deveria possuir uma onda  $\Psi$ , sem no entanto, escrever a equação de propagação de onda. Este trabalho coube a Schrödinger que em uma série de artigos publicados em 1926, apresentou a equação de propagação para a onda  $\Psi$  e a aplicou para resolver o átomo de hidrogênio. Sua equação,  $H\Psi(r, t) = E\Psi(r, t)$  descreve como um estado quântico  $\Psi(r, t)$ , de um sistema físico muda com o tempo, obtendo assim soluções para o caso estacionário, cujos resultados apresentavam boa concordância com os dados experimentais (FREIRE, 2011, p. 84).

No átomo de hidrogênio, os únicos termos que compõem o operador Hamiltoniano são a energia cinética do elétron (assumindo o núcleo fixo) e a energia potencial de interação elétron-núcleo. Para este sistema, é possível empregar esse procedimento de “separação de variáveis”, no qual a equação de Schrodinger independente do tempo é dividida em três equações que podem ser resolvidas de forma exata. O formalismo desenvolvido por Schrödinger fez muito sucesso entre os físicos quânticos, pois eles estavam acostumados a resolver equações de onda ao invés de diagonalizar matrizes infinitas, tal como aparecia no formalismo de Heisenberg (DARRIGOL, 2003). Porém, percebeu-se que a equação de Schrodinger não tem solução analítica para sistemas moleculares, pois são sistemas onde há vários elétrons.

Tentativas para resolver a equação de Schrödinger para sistemas multieletrônicos levaram à proposição do Modelo das Partículas Independentes, que introduz simplificações que permitem o tratamento matemático para estes sistemas. O primeiro passo para essa tarefa consiste em reconhecer que elétrons e núcleos, interpretados como partículas clássicas, possuem velocidades diferentes: os núcleos sendo mais pesados possuem velocidade muito menor. Este conceito é introduzido na aproximação de Born-Oppenheimer que separa o movimento nuclear do movimento eletrônico. Esta separação de variáveis permite que o problema seja tratado em dois níveis, resolvendo-se a equação eletrônica e a nuclear separadamente. A solução da equação eletrônica é encaminhada utilizando uma aproximação para a interação entre os N elétrons do sistema.

A função eletrônica de um sistema contendo N elétrons pode ser fatorada na forma  $\Phi_{elétrons}(r_1, \dots, r_N; R) = A[\Phi_1(r_1) \dots \Phi_N(r_N)]$  a formulação matemática para obter essa função foi desenvolvida por Douglas Hartree (1897-1958) e Vladimir Fock (1898-1974), sendo conhecida como método Hartree-Fock, HF (FREITAS, 1998, p.294). O método Hartree-Fock, obtém uma solução aproximada para a equação de Schrödinger de sistemas multieletrônicos. Em resumo, no método de Hartree-Fock, cada elétron é representado por uma função de onda que possui dependência apenas nas coordenadas daquele elétron e a probabilidade de se encontrar um elétron em um dado ponto nas vizinhanças de um núcleo é determinada apenas pela posição em relação ao núcleo, mas não em relação aos outros elétrons (SANTOS, 2008, p. 28). A resolução das equações de Hartree-Fock, mesmo com as simplificações, eram muito complexas para serem resolvidas rotineiramente na investigação de propriedades moleculares. Porém duas contribuições importantes para o tratamento deste problema aparecem no início da década de 50 por Roothaan (1918-2019) e Boys (1911-1972). Com estas duas sugestões, a resolução das equações de um elétron obtidas com o método HF é transformada em uma álgebra de matrizes, e o uso de bases gaussianas possibilita que as integrais sejam calculadas analiticamente, reduzindo assim eventuais problemas numéricos. Esta nova versão do problema possui uma característica muito importante: é adequada para ser resolvida utilizando computadores (FREITAS, 1998, p. 295).

Na década de 60 o desenvolvimento de programas computacionais para efetuar cálculos com o método Hartree-Fock estimulou vários grupos de pesquisa. Com relação às moléculas, a proposta é o desenvolvimento de programas gerais,

independente do número de átomos e da simetria molecular. Esta fase inicial é muito difícil, e os primeiros resultados são, em termos práticos, inadequados para proporcionar avanços significativos. Em círculos acadêmicos mais conservadores, a química quântica é tratada como uma atividade fútil, incapaz de produzir resultados expressivos para a química. Nesta atmosfera sombria, surge John A. Pople (1925-2004), este pesquisador vislumbrou que a sinergia entre facilidades computacionais e programas eficientes desempenharia um papel importante no desenvolvimento da pesquisa química. Inicia então um trabalho metódico e consistente para construir o suporte necessário para que a química quântica produza resultados.

Ainda na década de 60, Pople e colaboradores distribuem o programa computacional CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap). Este programa utiliza um método semi-empírico, no qual parte das operações com as funções base foram substituídas por parâmetros ajustados para a reprodução de dados experimentais. Além disso, parte da álgebra matricial é simplificada no método CNDO, ignorando elementos de matriz considerados menos importantes para representar a interação entre os elétrons do sistema. O programa foi mundialmente utilizado na década de 60 e início da década de 70. Vários avanços foram obtidos, potencializando a importância da química quântica. Entretanto, as simplificações introduzidas no método CNDO conduziram também a falhas reconhecidas. Trabalhando intensamente para atingir os objetivos, Pople e colaboradores desenvolveram algoritmos engenhosos que simplificam várias etapas do problema, e na década de 70 é distribuído para a comunidade científica, o programa computacional Gaussian-70 com várias facilidades implantadas. Este programa computacional foi amplamente utilizado para calcular propriedades moleculares, produzindo resultados em boa concordância, qualitativa e quantitativa, com dados experimentais, conquistando assim a confiança dos usuários (FREITAS, 1998, p. 295-296).

Pople (1979) foi um pioneiro em programas de química computacional, e foi líder no desenvolvimento de métodos computacionais para resolver sistemas complexos de múltiplos elétrons chamados métodos de química quântica *Ab initio* e usando conjuntos básicos de órbitas do tipo de órbita de Slater ou orbitais Gaussianos para modelar a função de onda.

A Teoria Quântica encontra-se numa situação única na história da ciência. Desde o seu estabelecimento formal, em fins da década de 1920, sua aplicação nos mais diversos domínios tem se mostrado absolutamente bem sucedida, mesmo nas mais extremas situações, e seu desenvolvimento permitiu a chamada revolução da informação em fins do século XX, de modo que inquestionavelmente é a teoria física mais bem sucedida de todos os tempos e com maior impacto social e tecnológico (FREIRE, 2011, p. 11). Postulados, conceitos, princípios e teoremas da teoria quântica estão em um contexto histórico em que o homem, em seu desejo de aprender foi estabelecendo as bases da computação quântica, com o advento desta, programas de computador convencionais ficarão obsoletos, assim como a teoria utilizada para desenvolvê-los (SOBRAL,2019, p. ix).

Tendo em vista mais de 100 anos de história da teoria quântica e seus impactos revolucionários, e sabendo que o enfoque Ciência, Tecnologia, Sociedade e Ambiente (CTSA) é o conceito-chave da Base Nacional Comum Curricular (BNCC) (BRASIL, 2018); quão grave seria formar professores de química sem o entendimento básico de sua ciência, sem entender os impactos desta em sua sociedade e sem visão dos impactos que esta tem e terá no futuro de sua tecnologia e meio ambiente?

## 2.2. Importância da Química Quântica na formação do Licenciado em Química

O contexto histórico apresentado anteriormente, mostrou que no início do século XX, as teorias clássicas não descrevem corretamente o comportamento de partículas muito pequenas, como elétrons, núcleos de átomos e moléculas. O comportamento de tais partículas é descrito por um conjunto de leis chamado mecânica quântica. A química quântica aplica a mecânica quântica a problemas de química (LEVINE, 2014, p. 1), enquanto a química computacional utiliza uma série de ferramentas de investigação para resolver estes problemas em um computador (LEWARS, 2011, p.1).

De acordo com as Diretrizes Curriculares Nacionais para os Cursos de Química (BRASIL, 2001) são conteúdos básicos, do currículo de Licenciatura em Química:

**Matemática:** Álgebra, funções algébricas de uma variável, funções transcendentais, cálculo diferencial e integral, seqüências e séries, funções de várias variáveis, equações diferenciais e vetores.

**Física:** Leis básicas da Física e suas equações fundamentais. Conceitos de campo (gravitacional, elétrico e magnético). Experimentos que enfatizem os conceitos básicos e auxiliem o aluno a entender os aspectos fenomenológicos da Física.

**Química (Teoria e laboratório):** propriedades físico-químicas das substâncias e dos materiais; estrutura atômica e molecular; análise química (métodos químicos e físicos e controle de qualidade analítico); termodinâmica química; cinética química; estudo de compostos orgânicos, organometálicos, compostos de coordenação, macromoléculas e biomoléculas; técnicas básicas de laboratório (BRASIL, 2001, p. 7).

Não se encontra nas diretrizes qualquer citação ao componente de química quântica como conteúdos básicos, específicos ou complementares. Em contrapartida, a universidade tem autonomia para definir os currículos de seus cursos de graduação, limitada apenas às diretrizes fixadas pelo Conselho Nacional de Educação (Lei nº 9.131/95, art. 9º , §2º , “c”). Qualquer alteração na grade curricular do curso, deve ser aprovada pelo colegiado superior da instituição, com registro em ata, seguindo critérios estabelecidos pela Portaria Normativa nº 40/2007.

Apesar da autonomia da instituição, de modo geral seus currículos de licenciatura em química são montados com base nas grandes áreas de química, aos quais sofrem forte influência da química quântica. Os físicos químicos usam a mecânica quântica para calcular (com o auxílio da mecânica estatística) as propriedades termodinâmicas, propriedades moleculares de forma teórica;

propriedades de estados de transição em reações químicas, entre outros. Químicos orgânicos usam a mecânica quântica para estimar as estabilidades relativas de moléculas, para calcular propriedades de intermediários de reação, para investigar os mecanismos de reações químicas e para analisar e prever espectros de ressonância magnética nuclear. Químicos analíticos usam métodos espectroscópicos extensivamente. As frequências e tensões das linhas em um espectro podem ser adequadamente compreendidas e interpretadas apenas por meio do uso da mecânica quântica. E os químicos inorgânicos usam a teoria do campo do ligante, um método de mecânica quântica, para prever e explicar as propriedades de íons complexos de metais de transição (LEVINE, 2014, p. 1),.

Tendo em vista a forte influência da química quântica nas quatro grande áreas de química, é cabível que os currículos de licenciatura em química negligenciem conteúdos básicos na formação do professor?

“Os currículos vigentes estão transbordando de conteúdos informativos em flagrante prejuízo dos formativos, fazendo com que o estudante saia dos cursos de graduação com "conhecimentos" já desatualizados e não suficientes para uma ação interativa e responsável na sociedade, seja como profissional, seja como cidadão.” (BRASIL, 2001, p. 1).

Na Universidade Federal da Fronteira Sul (UFFS) - Campus Realeza, o Projeto Político Pedagógico do Curso (PPC) dispõe a disciplina Química Quântica no terceiro período como disciplina obrigatória. Sua ementa aborda a teoria quântica, as partículas elementares (léptons, quarks e hádrons) e os seminários sobre o mistério quântico, e tem por objetivo:

Promover a aplicação da mecânica quântica aos sistemas químicos, **possuir familiaridade** ao formalismo matemático, bem como ao **significado e interpretação** do no que tange o aspecto fundamental na formação da química moderna, **voltado ao ensino e a pesquisa.**(PPC-UFFS-REALEZA, 2019)

Em 2017, foi publicado um trabalho sobre o componente curricular de química quântica na UFFS Campus Realeza - PR, esta pesquisa traz um relato de experiências que visa reforçar a importância do componente curricular de Química Quântica nos cursos de licenciatura em química, e para isso foi feita uma análise (enquanto aluno em formação) das aulas da professora que ministra este componente na instituição.

Pode-se observar ao final da disciplina uma qualificação nos argumentos e novas concepções de partículas e subpartículas, por parte dos alunos, assim como um novo olhar sobre a importância da quântica e suas tecnologias. Proporcionando aos licenciandos uma aprendizagem significativa sobre conceitos de quântica abordados utilizando para isso conceitos de temas já estudados em momentos anteriores (GOMES, 2017, p. 3).

Em relação às dificuldades enfrentadas pelos alunos para entender a complexidade desta disciplina, Feynman (2008) alega que:

“Uma vez que o comportamento atômico é tão diferente da experiência cotidiana, é muito difícil se acostumar, ele parece peculiar e misterioso para todos – tanto para o iniciante como para o físico experiente. Mesmo os experts não o entendem da maneira que gostariam, e é perfeitamente razoável que seja assim porque todas as experiências humanas diretas ou intuitivas se aplicam a objetos grandes. Nós sabemos como as coisas grandes se comportam, mas numa escala pequena elas não se comportam dessa forma. Então precisamos aprender sobre elas de uma forma abstrata ou imaginativa e não por analogia com nossa experiência direta”. (Feynman, 2008)

Outro grave problema que se soma a formação incompleta do licenciado em química, são os livros didáticos de química para o ensino médio. O trabalho realizado por SILVA e CUNHA (2008) realizou uma análise do modelo atômico quântico em seis livros didáticos de Química para o Ensino Médio, aprovados no Programa Nacional do Livro para o Ensino Médio - PNLEM 2006/2007 (BRASIL, 2006b). Em sua pesquisa, buscou-se verificar a presença (ou ausência) dos seguintes temas: conceito de quantum de uma grandeza; caracterização do átomo e/ou do elétron como sistema quântico; comportamento dual (onda/partícula) do átomo e/ou do elétron; indeterminação da trajetória do átomo e/ou de um elétron no átomo; caráter probabilístico da localização do átomo e/ou de um elétron num átomo; função de onda como representante do estado do átomo ou do elétron em um átomo (SILVA, 2008, p.5). Os resultados mostraram que:

Dos seis livros didáticos de química para o ensino médio analisados, **apenas uma das obras** trata dos cinco pontos considerados necessários ao entendimento do átomo como um sistema quântico. Outras três obras discutem-nos parcialmente e duas não os incluem. Em qualquer caso, consideramos a discussão **insuficiente** para a compreensão do significado dos termos quantum (de uma grandeza) e quântico, do comportamento dual (onda/partícula) e probabilístico, do movimento sem trajetória definida e da caracterização do seu estado. Tais resultados apontam a **necessidade de atualização e aprimoramento dos textos didáticos de química no tocante ao modelo atômico orbital** (SILVA, 2008, p.8).

É importante ressaltar a gravidade das consequências na educação básica, quando a teoria quântica é subestimada na formação dos professores e desconsiderada no material didático dos alunos. Para CARVALHO-SILVA e CAMARGO (2018, p. 182) “É difícil imaginar que uma ciência que está bem fundamentada a mais de um século pode ser vista como negligenciável para a formação de um químico. (...) Considerando que a mecânica quântica é a alma da química moderna, é certo que ao lançar químicos no mercado de trabalho que não possuam pensamento quântico, cria um efeito danoso ao disponibilizar educadores que criarão um círculo de difusão de conceitos clássicos e ultrapassados em química, e também ao limitar o poder de solução dos problemas enfrentados no mercado de trabalho do químico tecnológico”.

Quando falamos da Química Computacional, as questões comumente investigadas são: a determinação de parâmetros de geometria molecular como as formas das moléculas, comprimentos de ligação, ângulos e diedros; energias de moléculas e estados de transição, para saber, por exemplo, qual isômero é favorecido em equilíbrio; reatividade química, caso a pesquisa busque identificar onde os elétrons estão concentrados (sítios nucleofílicos) e para onde eles querem ir (sítios eletrofílicos); espectros de IV, UV e NMR; interações de um substrato com uma enzima, para entender como uma molécula se encaixa no sítio ativo; estudo das propriedades físicas das substâncias, que dependem das propriedades das moléculas individuais e como as moléculas interagem no material a granel; entre outros (LEWARS, 2011, p.1-2).

Aplicações mais recentes e fundamentais da química computacional, foi a luta contra a pandemia COVID-19. Desde o início de 2020, vários químicos computacionais e biofísicos têm direcionado seus esforços para tentar obter informações sobre o funcionamento interno e os mecanismos das moléculas do vírus SARS-CoV-2 e das proteínas da célula hospedeira envolvidas na infecção e na doença, bem como procurar pequenas moléculas com as quais possam interagir. Governos, financiadores, agências de pesquisa, centros de computação e empresas, reconheceram o potencial da ciência da computação e forneceram acesso a Computação de Alta Performance (High Performance Computing - HPC) e outros recursos computacionais para aplicativos COVID19 (MULHOLLAND,2020).

Esta funcionalidade da Química Computacional não pode ser desprezada pelas instituições formadoras de profissionais, que devem ser inseridos no mercado de trabalho, aptos a lidar com esta realidade.

A universidade brasileira precisa repensar-se, redefinir-se, instrumentalizar-se para lidar com um novo homem de um novo mundo, com múltiplas oportunidades e riscos ainda maiores. (BRASIL, 2001, p. 1).

Quando comparamos os cursos de formação de professores de química do Brasil com outros cursos ao redor do mundo, percebemos que estamos atrasados. No artigo publicado por GASYNA e RICE em 1999, discute-se a criação do componente de química computacional nos cursos de graduação em química na Universidade de Chicago, já nessa época, compreendia-se “o truísmo que a disponibilidade de hardware e software do computador moderno transformou a maneira como muitos problemas químicos são analisados, possibilitando o teste de ideias e o desenho de processos que antes só poderia ser sonhado” (GASYNA, 1999, p.1023).

O curso consiste em uma aula teórica e componentes de laboratório e abrange quatro tópicos principais: Métodos Numéricos de Análise, Mecânica Molecular para Análise Conformacional, Dinâmica Molecular e Simulação de Monte Carlo e Cálculos de Estrutura Eletrônica. O programa de laboratório é organizado em torno de exemplos de problemas científicos, e a ênfase é colocada no uso de softwares disponíveis, como Mathematica, o conjunto de pacotes associados ao MSI / Biosym e GAMESS. (GASYNA, 1999)

Outro artigo que demonstra o atraso por parte de instituições brasileiras, foi publicado na revista *Journal of Chemical Education* em 2014, onde faz uso de atividades de química computacional para promover aprendizagem e retenção em um ambiente de química geral de escola secundária em Connecticut nos Estados Unidos.

No ensino médio, grande parte do material relacionado à química disponibilizado aos alunos que usam computadores é limitado a animações e simulações. Alunos jovens inexperientes às vezes veem essas atividades como brinquedos ou jogos e as tratam casualmente. Usando software de qualidade de pesquisa, como essas atividades fazem, dá aos alunos a sensação de que seu aprendizado está sendo realizado a sério e os incentiva a levar isso a sério também. (OCHTERSKI, 2014)

Tendo em vista a importância dos componentes curriculares de química quântica e química quântica computacional nos currículos dos cursos de licenciatura em química demonstrada no presente artigo, veremos a seguir se estes cursos ofertados nas Universidade Públicas presenciais do Brasil, trazem esses componentes em seus projetos pedagógicos do curso (PPC) e conseqüentemente podemos retirar desses dados conclusões importantes sobre a formação profissional desses docentes.

### 3. METODOLOGIA

Para desenvolver a presente pesquisa, utilizou-se as noções do tratamento de dados de análise documental, que consiste em uma série de operações que visam estudar e analisar um ou vários documentos para descobrir as circunstâncias [...] com as quais o objeto de estudo pode estar relacionado (BARDIN, 2011).

Na primeira etapa de preparação documental, também chamada de pré-análise, dedicou-se a uma análise com listagem em planilha dos dados correspondentes aos cursos de Licenciatura em Química (LQ) ofertados pelas Instituições de Ensino Superior (IES) públicas e presenciais no Brasil. A pesquisa teve por base os dados oficiais do portal e-MEC regulamentado pela Portaria Normativa nº 21, de 21/12/2017. As informações inseridas pelas IES dos Sistemas Estaduais, reguladas e supervisionadas pelo respectivo Conselho Estadual de Educação, ou pelas IES do Sistema Federal, no âmbito da autonomia universitária, são declaratórias e a veracidade é de responsabilidade da respectiva instituição, nos termos da legislação (E-MEC, 2017). A consulta se deu com base nos seguintes marcadores: “consulta avançada”, “Buscar por: Curso de graduação”, “Curso: Química”, “Gratuidade do Curso: Sim”, “Modalidade: Presencial”, “Grau: Licenciatura”, “Situação: Em atividade”.

Os documentos principais do presente trabalho foram os Projeto Pedagógico de cada Curso (PPC) ou na falta deste, a matriz curricular, com o intuito de verificar a presença ou ausência de disciplinas (obrigatórias ou eletivas) da área de química quântica e química quântica computacional.

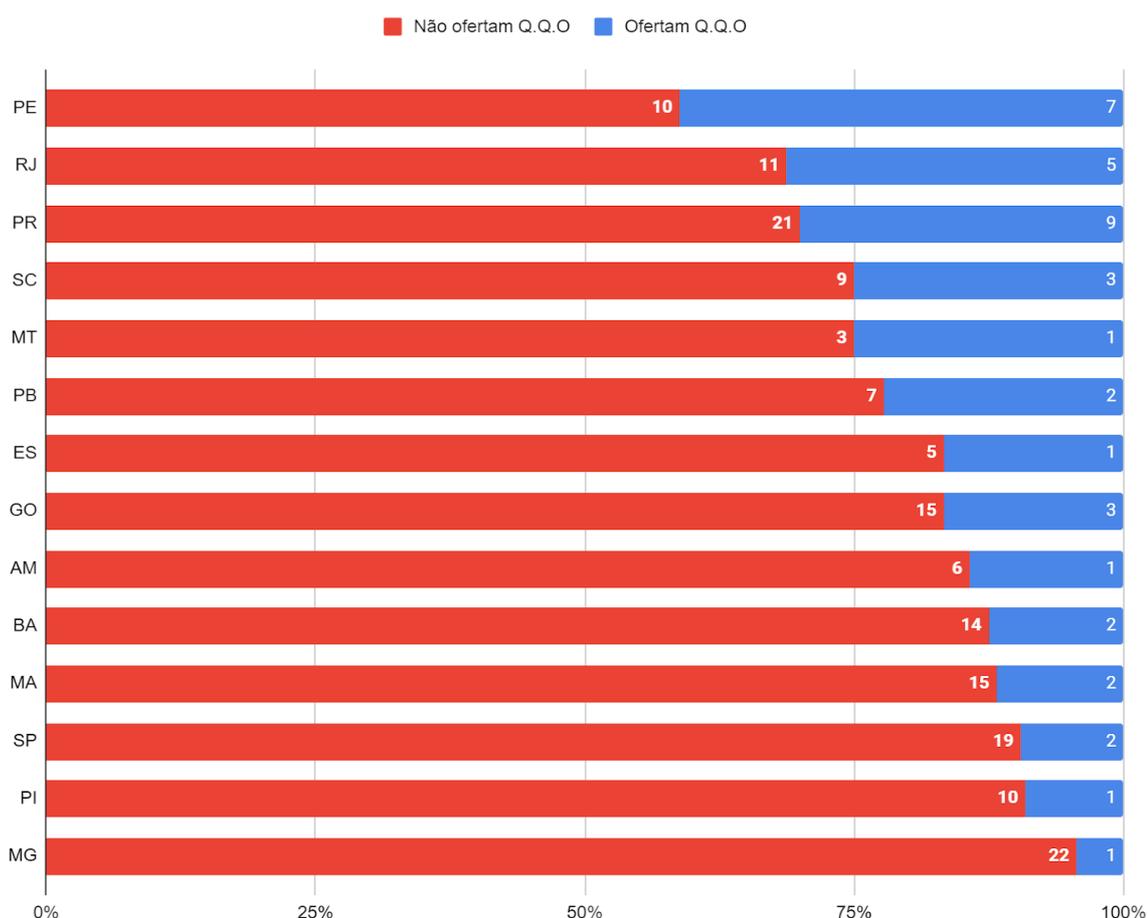
Na exploração do material, várias etapas importantes foram desenvolvidas para proporcionar riqueza das interpretações e inferências. Como as Universidades têm autonomia para desenvolverem o seu currículo, é comum encontrar uma série de denominações diferentes para componentes curriculares que objetivam o estudo da química quântica, a exemplo de: Introdução à Química Quântica, Química Quântica, Fundamentos de Química Quântica, Introdução a Quântica, entre outros. Nestes casos, foram feitas análises dos objetivos e das ementas das disciplinas para verificar se estas estavam de acordo com os objetivos do presente trabalho. Tendo em vista que uma Universidade pode possuir ementas distintas em cada câmpus que ofertam a mesma disciplina, outra análise importante foi a dos currículos ofertados por cada um dos campus da instituição.

O tratamento de dados reuniu todas essas informações a partir de gráficos para facilitar a interpretação. Outras conclusões importantes retiradas foram verificadas a partir da análise em planilha e serão discutidas a seguir.

#### 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A pesquisa identificou 242 cursos de licenciatura em química de Instituições de Ensino Superior (IES) públicas e presenciais que estão atualmente em atividade. A análise inicial mostra que o estado que mais oferta componentes curriculares de Química Quântica Obrigatória (Q.Q.O) nos cursos de licenciatura em química, é o Paraná, seguido de Pernambuco e Rio de Janeiro (Gráfico 1).

**Gráfico 1** - Estados com a maior oferta de Q.Q.O nos cursos de L.Q do Brasil

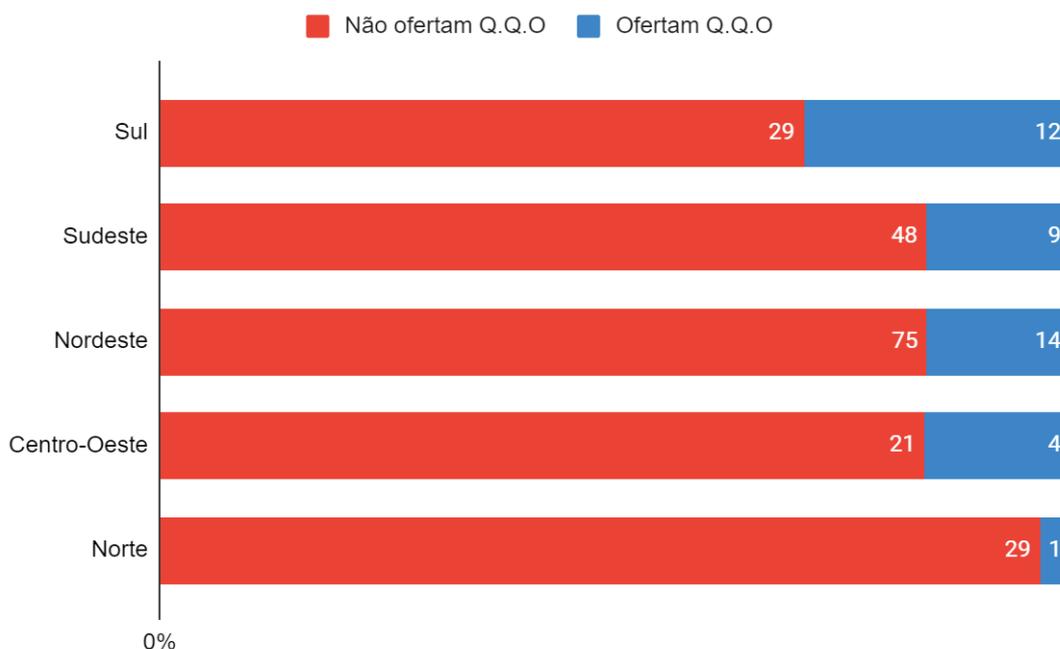


**Fonte:** Elaborado pela autora, 2021.

A análise por região revela a porcentagem de oferta dos componentes obrigatórios na área de Química Quântica nos cursos de licenciatura em química do Brasil: Sul (29,3%), Sudeste (15,8%), Centro-Oeste (16%), Nordeste (15,7%) e Norte (3,3%). Observa-se que essas ofertas não chegam a compreender nem metade do total dos cursos de licenciatura em química por região. No Gráfico 2 é possível fazer a análise numérica e o resultado referente a região Norte do país, é preocupante,

pois, apenas a Universidade do Estado do Amazonas (UEA) no campus de Manaus é a única de toda a região a ofertar esta disciplina como componente obrigatório (Gráfico 2).

**Gráfico 2** - Regiões com a maior oferta de Q.Q.O nos cursos de L.Q do Brasil

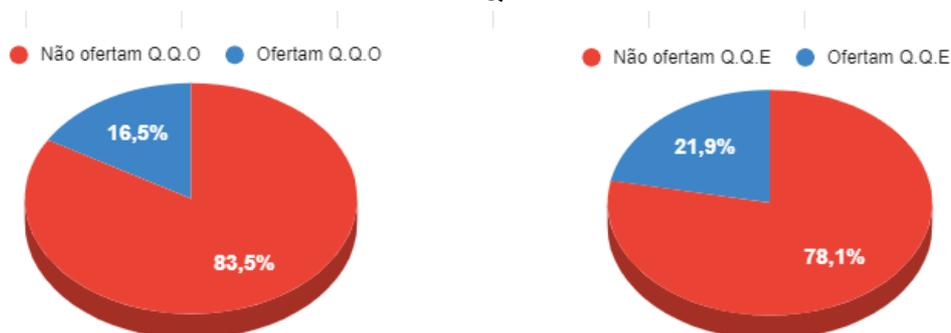


**Fonte:** Elaborado pela autora, 2021.

Em uma análise superficial durante a coleta de dados é possível verificar a presença desta disciplina, quando aparecem, no sexto período da matriz do curso, porém ao colocar essa disciplina no final da formação docente, o sentido de utilizar esta disciplina como base para o entendimento das demais, se perde.

Ao analisar a oferta dos cursos da área de Química Quântica (Q.Q) como componente curricular eletivo, os estados de Maranhão, Rio Grande do Norte e Pernambuco se destacam. Infelizmente não é possível fazer conclusões realistas a respeito destes dados, tendo em vista se tratarem de componentes eletivos, logo são dependentes da oferta da coordenação do curso durante um período específico, podendo terem sido ofertados poucas vezes ou até mesmo nenhuma. Em contrapartida, uma conclusão que pode ser tirada desta análise, é a preferência dos cursos de L.Q em tratar as disciplinas de química quântica como eletivas em vez de obrigatórias (Gráfico 3)

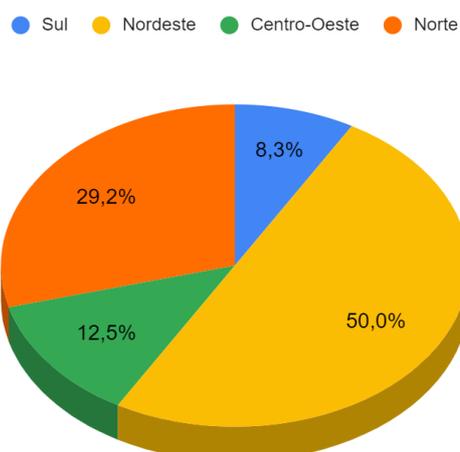
**Gráfico 3** - Ofertas dos componentes de Q.Q como obrigatória e eletivas nos cursos de L.Q do Brasil



**Fonte:** Elaborado pela autora, 2021.

A análise dos componentes da área de Química Quântica Computacional (Q.Q.C), revelou que em todo o Brasil apenas a Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho (UNESP) campus de Bauru, oferta esse componente como disciplina obrigatória no curso de licenciatura em química. Em contrapartida, a análise deste mesmo componente sendo ofertado como disciplina eletiva é mais comum. O Nordeste se destaca como a região que mais oferta os componentes da área de Química Quântica Computacional (Q.Q.C) de forma eletiva, compreendendo 12 ofertas em um universo de 89 cursos de licenciatura em química. A região Sudeste não aparece no Gráfico 4 por não oferecer nenhum componente da área de Q.Q.C de forma eletiva em seu currículo.

**Gráfico 4** - Regiões com a maior oferta de eletivas de Q.Q.C nos cursos de L.Q do Brasil



**Fonte:** Elaborado pela autora, 2021.

Cabe-se nessa pesquisa uma análise em especial ao estado da Paraíba, ao qual a autora está inserida. A Paraíba oferta 7 cursos de Licenciatura em Química nas IES públicas e presenciais, destas, apenas a Universidade Federal da Paraíba (UFPB) campus de Areia e João Pessoa ofertam disciplinas da área de Q.Q como componentes curriculares obrigatórios, e dispõe em seu currículo disciplinas eletivas da área de química quântica computacional. No caso da UFPB é de se esperar que os componentes eletivos de Q.Q.C sejam ofertados com frequência tendo em vista a presença do Laboratório de Modelagem Molecular de Reações Químicas (LMMRQ) inaugurado em 2013. A maneira que estes componentes são estruturados na matriz do curso merece atenção, pois é necessário priorizar a química quântica como componente básico, para ofertar a posteriori os componentes de Q.Q.C que aplicam os conhecimentos previamente apresentados, sendo assim uma eletiva ofertada com pré-requisitos.

## 5. CONCLUSÃO

O conceito de revolução é entendido, comumente, como uma transformação radical de determinada estrutura política, social, econômica, cultural ou tecnológica, isto é, tudo o que diz respeito à vida humana. Mais de 100 anos se passaram desde o surgimento da teoria quântica, seu surgimento foi conturbado e vimos na apresentação deste trabalho que surgiram inúmeros céticos sobre a teoria quântica. Em 1900 Lord Kelvin chegou ao ponto de sugerir que a física havia atingido seu limite e que somente duas nuvens negras ameaçavam seu horizonte. E foi justamente as tentativas de explicar estes resultados que levaram à elaboração de duas novas teorias, que alterariam de forma decisiva a física como era conhecida até então: a Teoria da Relatividade e a Teoria Quântica (P.S. ROSA, 2004, p.1) . O futuro, como consequência deste passado, também será quântico, e mudará novamente a estrutura de toda uma sociedade. Se a educação é a base para essa mudança, estarão os profissionais de hoje preparados para tal? Este artigo mostra que não.

Os dados revelam que os profissionais de educação dos cursos de química do Brasil, estão carentes de conhecimentos básicos de sua própria ciência, e ao repassar este conhecimento para seus alunos toda uma sociedade regride. O mínimo a se fazer é mudar o currículo, já não é cabível tratar uma ciência tão bem fundamentada e impactante como subtema de outro componente curricular. Entretanto, muitos alegam sua dificuldade, ou a não necessidade de se trabalhar este componente em um curso de licenciatura e sim de bacharel; sustentar esse discurso é negligenciar o papel transformador do professor na sociedade, e consequentemente no futuro desta.

Com esta pesquisa foi possível observar que a oferta dos componentes das áreas de Q.Q. e Q.Q.C no Brasil não representa nem metade dos cursos de licenciatura presentes em cada região. Apenas um curso apresenta Q.Q.C como disciplina obrigatória, e ao se comparar a oferta dos componentes de Q.Q. nos cursos de L.Q do Brasil é possível perceber uma maior preferência de tratá-los como eletivas do que como obrigatórias.

Logo, sugere-se a implementação do componente obrigatório de química quântica no currículo dos cursos de licenciatura em química do Brasil, além de dispor na grade de componentes eletivos a disciplina de química quântica

computacional. Quando inserido na matriz obrigatória do curso, é comum o componente de química quântica estar presente no sexto período, entretanto, recomenda-se sua inserção no terceiro período, pois além de se tratar de um componente básico para o aprendizado de outras ciências, o aluno, em sua maioria, já teria familiaridade com as disciplinas de Cálculo 1 e 2, o que facilitaria o entendimento matemático do componente.

Como concluinte do curso de licenciatura em química da Universidade Estadual da Paraíba (UEPB), e apaixonada pela área de química quântica ao qual tive o privilégio de conhecê-la apenas em projetos de pesquisa, trago votos de mudanças no currículo do curso da minha própria instituição formadora assim como, para as demais IES do país.

## REFERÊNCIAS

- BADASH, Lawrence. Rutherford and Boltwood: Letters on Radioactivity. New Haven: Yale University Press, 1969.
- BARIN, C. S. Introdução à Atomística. **Fundamentos Químicos**. Universidade Federal de Santa Rita, p. 1-10.
- BRASIL. Ciências da Natureza, Matemática e suas Tecnologias. Brasília: Ministério da Educação, Secretaria de Educação Básica, 2006a. (Orientações curriculares para o ensino médio; v. 2).
- BRASIL. **Parecer CNE/CES 1.303/2001** - Diretrizes Curriculares Nacionais para os Cursos de Química. Brasília: MEC, 2001. BRASIL.
- CARUSO, F.; OGURI, V. A eterna busca do indivisível: do átomo filosófico aos quarks e léptons. **Química Nova**, n. 20, p. 324-334, 1997.
- CARVALHO-SILVA, V. H.; CAMARGO, L. T. F. M. O Impacto do Ensino dos Conceitos de Mecânica Quântica na Graduação em Química. **Revista Processos Químicos**, Goiás, p. 181-183, jan./jun. 2018.
- CECON, Kleber. Um exemplo de negação do conceito de elemento na filosofia natural. **História da Ciência e Ensino, Construindo Interfaces**, v. 8, p. 68-89, 2013.
- COSTA, Alexandre. Mito e filosofia em Empédocles. **Anais de Filosofia Clássica**, v. VI, n. 11, p. 99-110, 2012.
- COMPTON, A. H. A quantum theory of the scattering of X-rays by light elements. *Physical Review*, [série 2] 21: 483-502, 1923.
- DARRIGOL, O. Quantum theory and atomic structure, 1900-1927. In: NYE, Mary Jo. *The modern physical and mathematical sciences*. Cambridge: Cambridge University, 2003, p.331-349. (The Cambridge History of Science, v. 5).
- DE BROGLIE, Maurice. *Sur les spectres corpusculaires des éléments*. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris* 172: 274-275, 1921.
- ECKERT, M. How Sommerfeld extended Bohr's model of the atom (1913-1916). **The European Physical Journal H**, Germany, v. 39, p. 141-156, 2014.
- E-MEC. Cadastro Nacional de Cursos e Instituições de Educação Superior Cadastro e-MEC. Disponível em: <<https://emec.mec.gov.br/>>. Acesso em 01 de maio de 2021.
- FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **Lições de física de Feynman: a edição definitiva**. Porto Alegre: Bookman, p. 1798, 2008.
- FILGUEIRAS, C. A. L. Duzentos anos da teoria atômica de Dalton. **Química Nova na Escola**, n. 20, p. 38-44, nov. 2004.

FREIRE, O. Jr; PESSOA, O. Jr; BROMBERG, J. L. **Teoria Quântica: Estudos históricos e implicações culturais** . Campina Grande-PB/ São Paulo-SP, 2011.

FREITAS, L. C. G. F. Prêmio Nobel de Química em 1998: Walter Kohn e John A. Pople. **Química Nova**. São Carlos, v. 22, p. 293-298, nov. 1998.

GARBER, Elizabeth. Some reactions to Planck's law, 1900-1914. *Studies in the History and Philosophy of Science* 7: 89-126, 1976.

GASYNA, Z. L.; RICE, S. A. Computational Chemistry in the Undergraduate Chemistry Curriculum: Development of a Comprehensive Course Formula. **Journal of Chemical Education**, Chicago, v. 76, n. 7, p. 1023-1029, july. 1999.

GIL, Dario. The future is quantum. **IBM Research Blog**, 2017. Disponível em: <The future is quantum | IBM Research Blog>. Acesso em: 01 de maio de 2021.

GOMES, J. F.; PERES, G. L. Um olhar sobre o componente curricular de química quântica da UFFS campus Realeza-PR. **EDEQ - 37 anos: Rodas de formação de professores na Educação Básica**, Paraná, p. 1-8, nov. 2017.

HOYER, U. 1981. Introduction. In: NBCW 2, pp. 103-134

JAMMER, Max. The conceptual development of quantum mechanics. New York: MacGraw-Hill, 1966.

KUHN, Thomas S. Black-body theory and the quantum discontinuity (1894-1912). Oxford: Oxford University Press, 1978.

KRAGH, Helge. **Before Bohr: Theories of atomic structure 1850-1913**. RePoSS: Research Publications on Science Studies 10. Aarhus: Centre for Science Studies, University of Aarhus, 2010.

LAIDLER, K. J. The story of quantum chemistry. Part 1: The old quantum theory. **CHEM 13 NEWS**, Ottawa, jan. 1990.

LEVINE, I. N. Quantum Chemistry . 7. ed. Nova York: Pearson, 2014.

LEWARS, E. G. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics . 2. ed. Canada: Springer, 2011.

MEHRA, Jagdish & RECHENBERG, Helmut. The historical development of quantum theory. New York: Springer, 1982-1987. 5 vols.

MOREIRA, A. M. Partículas e interações. **Física na Escola**, Porto Alegre, v. 5, n. 2, p. 10-14, 2004.

PROJETO POLÍTICO PEDAGÓGICO - PPC: Química (Licenciatura)/ Universidade Federal da Fronteira Sul; Núcleo Docente Estruturante. - Realeza/PR, 2019.

MULHOLLAND, A. J; AMARO, R. E. **COVID-19 - Computational Chemists Meet the Moment**. ACS Publications. Reino Unido, v. 60, n.12, p.5724-5726, dec. 2020.

OCHTERSKI, J. W. Using Computational Chemistry Activities To Promote Learning and Retention in a Secondary School General Chemistry Setting. **Journal of Chemical Education**, Connecticut, v. 91, p. 817-822, 2014.

PAIS, Abraham, Einstein and the quantum theory. *Reviews of Modern Physics* 51: 863-914, 1979.

ROSA, P. S. **Louis de Broglie e as ondas de matéria**. 2004. Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin", São Paulo, 2004.

SANTOS, P. S. **Estudo dos mecanismos de formação das espécies PN e NS no meio interestelar, em cometas e atmosferas planetárias**. 2008. Dissertação (Mestrado em Química) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008.

SCHMIDT, D. G. **Erwin Schrödinger: a compreensão do mundo infinitesimal através de uma realidade ondulatória**. 2008. Dissertação (Mestrado em História da Ciência), Pontifícia Universidade Católica de São Paulo, São Paulo, 2008.

SILVA, J. L. P. B.; CUNHA, M. B. M. O modelo atômico quântico em livros didáticos de química para o ensino médio. Bahia, p. 1-10, 2008.

SOBRAL, J. B. M; MACHADO, R. B. **Computação Quântica: Aspectos Físicos e Matemáticos- Uma abordagem algébrica**. Florianópolis, 2019. *E-book*.

SPARAVIGNA, A.C. Robert Grosseteste and the Four Elements. **International Journal of Sciences**, Italy, v. 2, n. 12, p. 42-45, dec. 2013.

TAVARES, O. A. P. Ernest Rutherford e o Átomo Nuclear. **Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas**, Rio de Janeiro, n. 002, p. 1-7, 2011.

VASCONCELLOS, C. A. Z. Efeito Fotoelétrico. Departamento de Física (IF-UFRGS), p. 1-6.

WHEATON, Bruce R. The tiger and the shark. Empirical roots of wave-particle dualism. London: Cambridge University Press, 1983.