



INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO CEARÁ
IFCE *CAMPUS* FORTALEZA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E
MATEMÁTICA (PGECM) ENSINO DE QUÍMICA E BIOLOGIA

MURILO RODRIGUES DOS SANTOS

QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE
PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.

FORTALEZA

2025

MURILO RODRIGUES DOS SANTOS

QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE
PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.

Dissertação apresentada ao curso de Mestrado Acadêmico em Ensino de Ciências e Matemática do Programa de Pós-graduação em Ensino de Ciências e Matemática do Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – *Campus* Fortaleza, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Área de concentração: Ensino de Química

Orientadora: Profa. Dra. Caroline Goes Sampaio

FORTALEZA

2025



INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO CEARÁ
Av. 13 de maio, 2081 - Bairro Benfica - CEP 60040-531 - Fortaleza - CE - www.ifce.edu.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

Processo: 23256.005169/2025-16

Interessado: Murilo Rodrigues dos Santos

MURILO RODRIGUES DOS SANTOS

QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE
CAMPUS MARACANAÚ

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) *Campus* de Fortaleza, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Ensino de Ciências e Matemática.

Aprovada em: 08/05/2025.

BANCA EXAMINADORA

Profa. Dra. Caroline de Goes Sampaio (orientadora)

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Estado do Ceará (IFCE)

Profa. Dra. Maria Cleide da Silva Barroso

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Estado do Ceará (IFCE)

Prof. Dr. Albino de Oliveira Nunes

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Estado do Rio Grande do Norte (IFRN)



Documento assinado eletronicamente por **Maria Cleide da Silva Barroso, Coordenador(a) do PGECM**, em 09/05/2025, às 10:01, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Caroline de Goes Sampaio, Professora do Ensino Básico, Técnico e Tecnológico**, em 14/05/2025, às 15:25, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Albino Oliveira Nunes, Usuário Externo**, em 18/05/2025, às 16:29, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade do documento pode ser conferida no site https://sei.ifce.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 informando o código verificador **7365911** e o código CRC **76FFA127**.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

Instituto Federal do Ceará - IFCE

Sistema de Bibliotecas - SIBI

Ficha catalográfica elaborada pelo SIBI/IFCE, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

S237q Santos, Murilo.

Química Computacional Aplicada: : Uma formação inicial de professores de química do IFCE - Campus Maracanaú / Murilo Santos. - 2025.

177 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado) - Instituto Federal do Ceará, Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática, Campus Fortaleza, 2025.

Orientação: Profa. Dra. Caroline de Goes Sampaio.

1. TDIC. 2. Formação Docente. 3. Química Computacional. I. Título.

CDD 510.07

AGRADECIMENTOS

Antes de tudo, rendo graças à Santíssima Trindade – Pai, Filho e Espírito Santo – por me ter sustentado em cada passo desta caminhada, nada do que aqui se apresenta teria sido possível sem a misericórdia do Pai, a presença redentora do Filho e a luz vivificante do Espírito. Ao Pai eterno, fonte de toda sabedoria, agradeço pelo dom da vida, pela vocação que me foi confiada e por me permitir trilhar o caminho do conhecimento com propósito. Ao Verbo encarnado, Jesus Cristo, meu Mestre por excelência, agradeço por ensinar-me, com sua vida, que a verdade se busca com humildade, se defende com coragem e se serve com amor. Ao Espírito Santo, que guia os corações e ilumina as mentes, agradeço as inspirações silenciosas, pela consolação nos momentos de cansaço.

À minha amada noiva, Rafaela Fernandes, cuja presença se faz necessária em minha vida. Agradeço por sua paciência, por sua serenidade, por seu apoio no decorrer dessa caminhada; agradeço por seu amor. Nesta obra deixo eternizado a minha dedicação de três pequenas estrofes da música de *Eu não existo sem você* de Agostinho dos Santos, mas que fora interpretada por Tom Jobim: *“Assim como o oceano Só é belo com luar Assim como a canção Só tem razão se se cantar Assim como uma nuvem Só acontece se chover Assim como o poeta Só é grande se sofrer Assim como viver Sem ter amor não é viver Não há você sem mim E eu não existo sem você”*.

A minha família, por todo apoio. Em especial à minha mãe, Luzanira que fez tudo o que pode para eu chegar aonde cheguei.

Aos amigos que estiveram comigo ao longo desta caminhada: Matheus Rocha, Alan Barros, Fábria Santos e Helias Joaquim; agradeço a cada um de vocês pelas risadas, pelos conselhos e principalmente pela amizade que cultivamos.

Agradeço a minha orientadora, Caroline de Goes Sampaio, por todo carinho, acolhimento e conhecimento que me foi passado. É lindo ver o entusiasmo nos olhos daqueles que nos inspiram, e em todos os momentos de minha carreira acadêmica, Carol foi para mim esse exemplo inspirador.

Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) por todo apoio financeiro.

E aos demais, cujos nomes não foram citados, mas que de alguma forma contribuíram para minha formação como pessoa; a cada um de vocês, meu mais fraternal abraço.

“A dor e o sofrimento são sempre inevitáveis para uma consciência ampla e um coração profundo”.

– *Crime e Castigo*, Fiódor Dostoiévski

RESUMO

No que se refere às metodologias apoiadas nas Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC), observa-se, frequentemente, a presença de uma abordagem interdisciplinar, adotada com o intuito de tornar o processo de aprendizagem mais eficaz e significativo. No entanto, tais metodologias nem sempre são desenvolvidas de forma alinhada à realidade dos alunos em diferentes níveis educacionais, revelando a necessidade de uma reformulação mais profunda na formação docente — uma formação mais consistente, que incentive pesquisas contínuas voltadas a metodologias de ensino que sejam dinâmicas, atualizadas, compatíveis com as múltiplas realidades escolares e de fácil aplicação prática. Partindo dessas reflexões, esta obra propôs analisar uma intervenção científica envolvendo o uso de ferramentas de Química Computacional Aplicada (com ênfase introdutória em Mecânica Quântica e na Teoria do Funcional da Densidade), orientada por um enfoque educativo baseado nas TDIC, e suas contribuições para a formação inicial de professores. A investigação foi realizada com uma turma do 1º semestre do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará – Campus Maracanaú. Para isso, adotou-se um estudo de caso qualitativo, de natureza exploratória e descritiva, com a participação de sete estudantes matriculados na disciplina de Química Geral I. De modo geral, os dados qualitativos obtidos a partir das respostas dos participantes revelaram que, embora os discentes apresentassem afinidade com a disciplina de Química, demonstraram dificuldades tanto com a linguagem matemática inerente à área quanto com a articulação entre teoria e prática em seu cotidiano. A intervenção, fundamentada nas TDIC, proporcionou uma aprendizagem mais significativa: ao final do processo, os estudantes apresentaram bom desempenho nas atividades relacionadas à aplicação de técnicas computacionais no estudo de mecanismos de reações orgânicas. Isso contribuiu para o desenvolvimento de uma postura mais crítica, especialmente quanto à utilização da linguagem matemática e aos conhecimentos oriundos da Mecânica Quântica em sua formação como futuros docentes.

Palavras-chave: TDIC; Formação Docente; Química Computacional; Teoria Funcional da Densidade

ABSTRACT

With regard to methodologies supported by Digital Information and Communication Technologies (DICT), an interdisciplinary approach is frequently observed, adopted with the aim of making the learning process more effective and meaningful. However, such methodologies are not always developed in alignment with the students' realities across different educational levels, highlighting the need for a more profound reformulation of teacher education — one that is more consistent and encourages continuous research into teaching methodologies that are dynamic, up to date, compatible with the diverse realities of schools, and easily applicable in practice. Based on these reflections, this work set out to analyse a scientific intervention involving the use of Applied Computational Chemistry tools (with an introductory emphasis on Quantum Mechanics and Density Functional Theory), guided by an educational approach grounded in DICT, and its contributions to initial teacher training. The investigation was carried out with a group of first-semester students enrolled in the Chemistry Teacher Education Programme at the Federal Institute of Education, Science and Technology of Ceará – Maracanaú Campus. To this end, a qualitative case study of an exploratory and descriptive nature was adopted, involving the participation of seven students enrolled in the General Chemistry I course. In general, the qualitative data obtained from the participants' responses revealed that, although the students showed an affinity for the subject of Chemistry, they also demonstrated difficulties both with the mathematical language inherent to the field and with the articulation between theory and practice in their daily academic routine. The intervention, grounded in DICT, enabled a more meaningful learning experience: by the end of the process, students performed well in activities related to the application of computational techniques in the study of organic reaction mechanisms. This contributed to the development of a more critical stance, particularly regarding the use of mathematical language and the knowledge derived from Quantum Mechanics in their formation as future educators.

Keywords: DICT; Teacher Education; Computational Chemistry; Density Functional Theory.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – localização da instituição de ensino	10
Figura 2 – Nuvem de palavras denotando os termos que repetitivos nas respostas fornecidas pelos discentes	47
Figura 3 – nuvem de palavras sobre os termos que se destacaram nas respostas dos discentes.	Erro! Indicador não definido.
Figura 4 – nuvem de palavras feita pelo IRAMUTEQ com base nas respostas dos discentes participantes desta pesquisa quando perguntados sobre a modelagem matemática.....	Erro! Indicador não definido.
Figura 5 – nuvem de palavras elaborada pelo software que reforça o termo teórico e empírico em química.	64
Figura 6 – os termos mais presentes nos discursos dos discentes sobre a integração entre o cálculo e a química.....	Erro! Indicador não definido.
Figura 7 – nuvem de palavra com os termos referentes à ligação química mais utilizado pelos participantes da pesquisa.	71
Figura 8 – referente aos termos mais utilizados pelos participantes, denotando a MQ como ferramenta para compreensão do comportamento quântico de fenômenos químicos.....	74
Figura 9 – nuvem de palavras com os termos que explanam os termos de maior importância na teoria abordada.....	78
Figura 10 – nuvem de palavras gerada com base nos termos mais relevantes pelo programa.....	84
Figura 11 – nuvem de palavras sobre a importância do empirismo na futura prática docente	91
Figura 12 – nuvem de palavras sobre os discursos dos participantes quanto ao uso da ferramenta de modelagem matemática.....	Erro! Indicador não definido.
Figura 13 – nuvem de palavras com os termos mais importantes no discurso dos discentes.....	101
Figura 14 – nuvem de palavras dos termos mais comuns encontrados nos discursos dos discentes.	106
Figura 15 – nuvem de palavras gerada pelo software quanto aos termos mais utilizados pelos discentes em suas respostas.....	109

Figura 16 – nuvem de palavras referentes ao uso da modelagem matemática.	114
Figura 17 – nuvem de palavra com os termos relevantes nas respostas dos discentes referentes à Mecânica Quântica.....	117
Figura 18 – nuvem de palavras dos termos mais utilizados quando questionados sobre a utilização da Teoria Funcional da Densidade como ferramenta utilizada no aprendizado de química no ensino superior.	121

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – curso de graduação dos estudantes.....	41
Gráfico 2 – rede escolar frequentada pelos discentes no Ensino Médio	41
Gráfico 3 – renda familiar per capita	42
Gráfico 4 – gráfico referente à disposição dos discentes quanto a algum tipo de deficiência	42
Gráfico 5 – disposição de ferramentas utilizadas pelos discentes participantes para estudos em suas respectivas residências	43
Gráfico 6 – análise textual feita no software IRAMUTEQ em busca de termos repetitivos para a formação da nuvem de palavras	46
Gráfico 7 - análise feita pelo <i>software</i> IRAMUTEQ das respostas dos discentes mediante a pergunta sobre o impacto profissional da ferramenta computacional.	49
Gráfico 8 – gráfico referente a dificuldade em Química no decorrer da vida acadêmica.	50
Gráfico 9 – análise feita no IRAMUTEQ sobre a utilização de conceitos de mecânica quântica no ensino de Química.	54
Gráfico 10 – resultado da análise feita no IRAMUTEQ sobre a utilização da modelagem matemática como ferramenta no ensino de Química	57
Gráfico 11 – número de hápax relativamente alto devido a as respostas cedidas pelos participantes não serem justificadas	60
Gráfico 12 – resumo das ocorrências e do número de hápax quanto ao discurso dos discentes	64
Gráfico 13 – número de hápax referente aos termos sobre o uso do cálculo em química.....	67
Gráfico 14 – número do hápax acerca da pergunta realizada sobre ligações químicas	70
Gráfico 15 – número de hápax referente ao discurso sobre a MQ aplicada ao entendimento de fenômenos químicos.....	73
Gráfico 16 – análise do IRAMUTEQ sobre as respostas dos discentes acerca da Teoria Funcional da Densidade.	77
Gráfico 17 – resposta dos discentes quanto a resolução da equação de Schrödinger para sistemas multieletrônicos.	78

Gráfico 18 – resposta dos discentes quanto a unidade básica da Teoria Funcional da Densidade.	79
Gráfico 19 – resposta dos discentes sobre quais parâmetros não poderiam ser encontrados utilizando técnicas de química computacional.	80
Gráfico 20 – opções marcadas pelos discentes quanto aos parâmetros que não podem ser representados matematicamente.	80
Gráfico 21 – respostas dos discentes sobre as estratégias para propor um mecanismo de reação orgânica.	81
Gráfico 22 – número de hápax, com base nas repostas dos discentes sobre suas dificuldades no aprendizado em química.	84
Gráfico 23 – análise do IRAMUTEQ acerca das respostas sobre a carga horária prática do curso.	87
Gráfico 24 – número de hápax sobre as repostas quanto à futura prática docente.	90
Gráfico 25 – gráfico léxico sobre as respostas dos discentes participantes quanto à modelagem matemática.	93
Gráfico 26 – número de hápax sobre os pontos em comum nas respostas dos discentes.	97
Gráfico 27 – análise do <i>software</i> IRAMUTEQ sobre os discursos dos discentes sobre o uso da TFD.	100
Gráfico 28 – número de hápax quanto as respostas dos discentes sobre os entraves no aprendizado de química.	103
Gráfico 29 – número de hápax quanto ao questionamento sobre a carga horária experimental.	106
Gráfico 30 – análise do programa IRAMUTEQ sobre o discurso dos participantes da pesquisa quando questionados sobre a utilização da experimentação em sua prática docente.	109
Gráfico 31 – número de hápax referente ao discurso dos discentes sobre a utilização de modelagem matemática.	113
Gráfico 32 – número de hápax quanto as respostas dos discentes sobre a utilização da Mecânica Quântica como ferramenta de aprendizado em química.	116
Gráfico 33 – número de hápax referente ao uso da TFD como ferramenta de aprendizado em química.	120
Gráfico 34 – nível de satisfação dos discentes	122
Gráfico 35 – a utilização da Química Computacional como ferramenta didática.	122

Gráfico 36 – percepção dos discentes quanto ao conteúdo de Mecânica Quântica abordada na intervenção.....	123
Gráfico 37 – respostas dos discentes quando questionados sobre a implementação de uma disciplina de Química Computacional na grade curricular de seu curso superior.	124

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – descrição dos momentos da pesquisa.....	34
Quadro 2 – respostas dos discentes referente a pergunta sobre o impacto da Química Computacional na formação acadêmica	44
Quadro 3 – respostas dos discentes quanto ao impacto Química Computacional em sua atuação profissional.....	47
Quadro 4 – respostas dos discentes sobre os fatores que dificultam seu aprendizado em Química.	50
Quadro 5 – resposta dos participantes sobre a utilização de conceitos da mecânica quântica aplicada a Química no processo de facilitar o processo de aprendizagem.....	52
Quadro 6 – resposta dos participantes da pesquisa quando questionados sobre a modelagem matemática aplicada a problemas químicos.....	55
Quadro 7 – respostas dos discentes quanto a utilização de métodos computacionais no ensino de Química.	58
Quadro 8 – respostas dos participantes quanto a perguntas relacionadas sobre assuntos específicos sobre a Química do ensino superior e as dificuldades relacionadas a seu aprendizado.....	61
Quadro 9 – resposta dos discentes sobre suas percepções quanto ao empirismo da Química.....	62
Quadro 10 – respostas dos participantes quanto ao uso da Matemática do Ensino Superior em química.	65
Quadro 11 – resposta dos discentes quando questionados sobre as ligações químicas e suas causas.	68
Quadro 12 – conhecimento dos discentes sobre a aplicação da mecânica quântica para o ensino de química.	71
Quadro 13 – resposta dos discentes quanto ao seu conhecimento sobre TFD.	75
Quadro 14 – respostas dos discentes sobre seus entraves no aprendizado em química.....	82
Quadro 15 – respostas dos discentes acerca da carga horária experimental do curso de Licenciatura em Química.....	85
Quadro 16 – resposta dos participantes quando questionados sobre a experimentação em sua futura prática docente.....	87

Quadro 17 – respostas dos discentes que responderam sobre o uso da modelagem matemática na proposição dos mecanismos do tipo SN2.	91
Quadro 18 – discurso dos discentes participantes quando questionados ao uso da MQ como ferramenta de aporte ao entendimento de química.	94
Quadro 20 – resposta dos discentes quanto aos entraves pessoais no aprendizado de química.....	102
Quadro 21 – respostas dos discentes quanto à carga horária prática e suas implicações didáticas.	104
Quadro 22 – respostas dos discentes quanto sua prática docente futura e o uso da experimentação.....	107
Quadro 23 – respostas dos discentes sobre a utilização da modelagem no aprendizado de química.	111
Quadro 24 – respostas dos discentes quando questionados sobre o uso da Mecânica Quântica como ferramenta de apoio ao aprendizado de química.	114
Quadro 25 – respostas dos discentes quanto ao uso da TFD no aprendizado de química.....	117

SUMÁRIO

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO CEARÁ	1
IFCE CAMPUS FORTALEZA	1
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA (PGECM) ENSINO DE QUÍMICA E BIOLOGIA.....	1
1. INTRODUÇÃO	1
2. REFERENCIAL TEÓRICO	6
2.1. <i>O ensino da Química no ensino superior e suas dificuldades</i>	6
2.1.1. <i>A utilização de TDIC na formação inicial de professores de Química</i>	7
2.2. <i>Computador como ferramenta didática no Ensino de Química</i>	9
2.3. <i>Teoria Funcional Da Densidade</i>	12
2.4. <i>Teoria da Aprendizagem Significativa</i>	14
3. PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS.....	19
3.1. <i>Pesquisa Qualitativa</i>	20
3.2. <i>A carência de estratégias metodológicas para se trabalhar o ensino de Química no ensino superior</i>	23
3.3. <i>Campo de pesquisa</i>	30
3.4. <i>Participantes da pesquisa</i>	31
3.5. <i>Procedimentos de coleta</i>	32
3.6. <i>Planejamento e Aplicação da intervenção</i>	34
3.7. <i>Procedimentos de análise</i>	37
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	40
4.1 <i>Aspectos sociais dos discentes participantes e percepções iniciais sobre Química Computacional</i>	40
4.2 <i>Quanto aos aspectos referentes ao conhecimento individual em Química</i>	60
4.3 <i>Aspectos pertinentes à aplicação da Teoria Funcional da Densidade e métodos computacionais como estratégia para o ensino de química: uma aplicação em mecanismos de reação orgânica</i>	78
4.4 <i>Aspectos de aprendizagem: pré-teste (aplicado antes da intervenção)</i>	82
4.5 <i>Aspectos de aprendizagem: pós-teste (aplicado após a intervenção)</i>	101
4.6 <i>Pesquisa de satisfação quanto ao conteúdo programático da intervenção didática</i>	121
5. CONSIDERAÇÕES FINAIS	125
REFERÊNCIAS	127

1. INTRODUÇÃO

No Ensino Superior em Química existem uma gama de disciplinas que utilizam a matemática como principal ferramenta para a resolução de problemas fazendo uso do formalismo matemático¹ como instrumento de análise para determinado sistema químico, tais disciplinas compartilham o mesmo espaço de componentes específicos como Química Geral, Química Orgânica, Química Inorgânica, Físico-Química, Química Analítica, bem como disciplinas experimentais (MORAIS & JUNIOR, 2014).

Segundo Ortega, Pires e Lima (2018) a utilização do formalismo matemático nas disciplinas de Química no Ensino Superior pode ser uma ferramenta muito importante na compreensão e distinção de propriedades físico-químicas de sistemas. Contudo, segundo os autores o formalismo matemático advindo dos cursos de cálculo diferencial e integral não é levado a sério em disciplinas que necessitem de um tratamento matemático dos dados para a distinção de conceitos interligados. Tal defasagem, na percepção dos autores, ocorre até mesmo nas melhores universidades do país.

Os livros de apoio matemático voltados para a aplicação em físico-química, muitas vezes tornam a abordagem rasa ou semelhante àquelas já encontradas em livros de cálculo diferencial e integral, de modo que é insuficiente na contextualização com as disciplinas de Química (ORTEGA; PIRES; LIMA, 2018).

Tal “abandono” do formalismo matemático aplicado à Química do Ensino Superior pode fazer com que conceitos e teorias importantes para o desenvolvimento desta área enquanto ciência seja levado ao reducionismo. De acordo com Nagel (1961) existem duas condições para que uma teoria seja reduzida: a conexão e a derivação. Segundo o mesmo autor, existem duas vertentes que causam a redução de uma teoria (antes aparada por aporte matemático) em outra (reduzida a apenas uma compreensão meramente filosófica e/ou conceitual); sendo estas vertentes hetero e homogênea.

O reducionismo homogêneo a teoria é reduzida à outra sem o complemento de novos conceitos ou ideias. Entretanto, para o reducionismo heterogêneo ocorre

¹ O formalismo matemático pode ser entendido como a utilização da linguagem matemática pura que descreve algum conceito.

a absorção de outras teorias em uma outra a fim de que ocorra a completude de uma ideia formal (OLIVEIRA & GOMES, 2021).

De acordo com Oliveira e Gomes (2021), a redução que algumas teorias químicas, em especial àquelas que remetem ao comportamento de átomos, moléculas e sólidos passam no Ensino Superior são do tipo homogênea. Pois, segundo os autores:

[...] a Química poderia ser derivada da física, via a solução da equação de Schrödinger, e os demais conceitos poderiam ser derivados ou acrescidos. A resolução da equação de Schrödinger propicia os números quânticos que são característicos na Química, para explicar a ideia de orbitais atômicos. São derivadas desses conceitos as teorias que explicam a ligação Química como a *Linear Combination of Atomic Orbital* (LCAO). Então, muitos dos conceitos da Química são consequências de teorias derivadas da teoria quântica (OLIVEIRA & GOMES, 2021).

Desse modo, se faz necessário por parte dos discentes em Química a compreensão sólida, advinda do formalismo matemático, dos conceitos voltados à matemática presente na Mecânica Quântica de modo a realizar definições corretas a respeito sobre a estabilidade de isômeros, estabelecimento e entendimento de mecanismos de reação, caracterização de produtos intermediários, estudo sobre aromaticidade entre outros (MORGON, 2001).

A utilização do formalismo matemático se faz necessário para a compreensão de teorias químicas e físicas de modo que, seu significado não caia em um reducionismo filosófico. Pois, o reducionismo pode acarretar implicações negativas para a área da ciência Química à medida que, exclui as possibilidades de o discente do ensino superior melhor compreender conceitos químicos trazendo consigo dificuldades quanto ao ensino desta ciência de modo a contribuir negativamente na formação de professores (OLIVEIRA & GOMES, 2021).

Dentro dos cursos de Graduação em Química, na disciplina de Química Geral são introduzidos os conceitos iniciais à mecânica quântica dentro dos conteúdos pertinentes aos orbitais atômicos. De acordo com Atkins e Jones (2006), os orbitais atômicos são expressos por meio das funções de onda dos elétrons de um determinado sistema (átomo, sólido ou molécula). Estas funções matemáticas – advindas da equação de Schrödinger - possuem suas características essenciais

relativamente simples, porém são deixadas de lado (ATKINS & JONES, 2006).

Mesmo com a utilização do formalismo matemático para explicar diversos conceitos relacionados à mecânica quântica aplicada à Química (como no exemplo supracitado de orbitais atômicos), Oliveira e Gomes, (2021), apontam que, quando tratado nos cursos de nível superior em Química tais conceitos encontram seu uso antirrealista na mecânica quântica. Em outras palavras, existe uma diferença quando se trata dos aspectos explicativos matemáticos quando comparados aos aspectos ontológicos.

A utilização da linguagem matemática é tida como uma aliada na resolução de problemas do cotidiano, este dialeto pode ser expresso por meio da modelagem matemática. Esta técnica segundo Pedrosa, Siqueira e Mafra (2015) pode ser considerada uma arte que interpreta situações problemáticas buscando soluções exatas para tais problemas.

De acordo com Pedrosa, Siqueira e Mafra (2015) uma das principais utilizações da modelagem matemática aplicada à ciência Química reside no fato do aluno querer realizar experimentos em laboratório tendo como elemento quantitativo os dados matemáticos previamente calculados.

Segundo os mesmos autores há uma importância, quase sempre despercebida pelo discente, em utilizar a modelagem matemática no ensino superior em Química. Desse modo, a utilização desta técnica de resolução de problemas com outras ferramentas matemáticas como, por exemplo equações diferenciais, auxilia o aluno do ensino superior na tomada de decisões em situações que envolvam um rigor elevado na comprovação de uma hipótese ou teoria (PEDROSA, SIQUEIRA E MAFRA, 2015).

Desse modo, a utilização da ferramenta de modelagem e a utilização da matemática do ensino superior é útil na previsão de comportamentos de sistemas que estão sob efeito de diversas variáveis (BOYCE & DIPRIMA, 2010). A utilização desta técnica pode ser a melhor solução quando o processo em questão demanda tempo, um alto importe, ou quando se está trabalhando com sistemas atômicos, moleculares e/ou sólidos. Todavia é imprescindível que o modelo utilizado seja válido quando comparado com resultados empíricos.

Segundo Boyce e DiPrima (2010) o processo de modelagem matemática

pode ser resumido em três etapas: a construção, a análise e a validação do modelo.

Segundo os autores a última etapa a ser tomada pelo processo de modelagem é a validação, na qual se compara os resultados teóricos com os obtidos de maneira experimental, quando possível. Tal validação se faz necessária quando se estuda variáveis termodinâmicas em sistemas atômicos complexos.

Para sistemas atômicos, torna-se inviável a comprovação experimental de modo físico, pois a maioria do maquinário utilizado para realizar tal processo empírico é demasiado caro. Para isso, se faz necessário a utilização de simulações computacionais que possam condizer com os parâmetros de modelagem adotados.

Com a utilização da modelagem matemática é possível identificar as variáveis que governam os processos dos sistemas a serem estudados (PEDROSA; SIQUEIRA E MAFRA, 2015). Toda via, é preciso que se faça uso de ferramentas físico-químicas para compreender o que os dados matemáticos remetem no mundo físico.

Em 1964, os químicos Hohenberg e Kohn fundamentaram a Teoria do Funcional da Densidade (TFD), na qual descreveram que, por meio de um potencial externo, todas as propriedades de um sistema eletrônico complexo podem ser determinadas por meio da densidade eletrônica do estado fundamental do sistema (MONTEIRO, 2023, p. 17-18).

Com a utilização da densidade eletrônica para predizer, matematicamente as propriedades de sistemas moleculares a TFD se destacou como o primeiro método a propor simulações em sistemas quânticos utilizando funcionais que não os advindos das funções de onda dos elétrons.

Tendo em vista o que foi exposto, o objetivo geral deste trabalho está em analisar a utilização de conhecimentos de Química Quântica Computacional como ferramenta didática facilitadora no processo de formação docente para com os estudantes de graduação em Licenciatura em Química do Instituto Federal do Ceará, Campus Maracanaú. Com esta premissa o trabalho visa, como objetivos específicos os seguintes aspectos:

1. Avaliar as contribuições de um curso introdutório de mecânica quântica

aplicada à Química, abordando aspectos que facilitem a compreensão dos aspectos iniciais voltados à Química computacional bem como a funcionalidade dos softwares envolvidos para a utilização destes em sua formação docente

2. Compreender os conceitos quânticos pertinentes a composição da matéria (o movimento quântico dos átomos) e cálculos quânticos, em especial aqueles voltados para a compreensão das teorias de ligação química abordadas no curso superior de Química;
3. Utilizar parâmetros termodinâmicos obtidos através de cálculos computacionais a fim de realizar comparações com os dados colhidos experimentalmente, disponibilizados na literatura, com o intuito de validar a ferramenta teórica proveniente da química quântica e comparar com os dados obtidos empiricamente e disponibilizados na literatura acadêmica;

Desse modo, o presente trabalho busca analisar o papel do formalismo matemático e da modelagem no Ensino Superior em Química, com ênfase na compreensão de conceitos fundamentais da Mecânica Quântica e sua aplicação na Química Computacional.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

O subsídio bibliográfico deste trabalho contempla o uso Teoria Funcional da Densidade no estudo de propriedades da matéria bem como a formação de compostos químicos, bem como o computador como ferramenta utilizada para realizar os cálculos quânticos e a importância da aprendizagem significativa mediante ao contexto sociocultural na qual o discente está inserido. Em suas seções, estão tópicos como a teoria funcional da densidade, uso da Química computacional no ensino de Química e aprendizagem significativa.

2.1. *O ensino da Química no ensino superior e suas dificuldades*

Embora a Química seja uma ciência caracterizada por seu dinamismo e avanços tecnológicos significativos, há um entrave nos processos relacionados a seu ensino formal. Tais dificuldades podem estar relacionados com a forma tradicional de ensinamento desta ciência por meio das aulas expositivas que se baseiam na memorização conceitual, esses entraves se estendem a todas as subáreas da ciência Química e de modo especial a Química Orgânica teórica, em especial em seus mecanismos de reações (ALVES, SANGIOGO, PASTORIZA, 2019).

Para Roque e Silva (2019) o ensino de Química orgânica é uma área pouco investigada no ensino superior e uma das disciplinas em que mais ocorrem reprovações. As dificuldades encontradas pelos autores remetem a falta de uma interconexão dos conceitos estudados em Química Orgânica com outras áreas de estudo químico, além das dificuldades interpretativas dos códigos e linguagem Química.

Corroborando com a problemática encontrada pelos estudos de Roque e Silva (2019) o trabalho realizado por Alves, Sangiogo e Pastoriza (2019) indicam que as problemáticas do ensino de Química Orgânica no Ensino Superior ocasionam desinteresse em aprender, por parte dos alunos, e em ensinar, por parte dos professores.

Algumas das principais dificuldades encontradas pelos discentes e relatada pelos docentes no trabalho de Alves, Sangiogo e Pastoriza (2019) são: falta de conhecimentos prévios não adquiridos no Ensino Médio e, posteriormente, em disciplinas de Química a nível de graduação; o alto grau de abstração dos alunos

em visualizar moléculas em 3 dimensões para a compreensão de assuntos voltados à estereoquímica; a complexidade em elaborar mecanismos de reação orgânica.

Desse modo, mesmo que não haja muitas pesquisas como indicam Roque e Silva (2019) sobre os ensino de Química Orgânica no Ensino Superior, há segundo alguns autores, (SILVA, SILVA E NUÑES, 2004); (SILVA e BATALINI, 2020); (RAUPP, 2015), algumas propostas metodológicas que poderiam ser utilizadas como ferramenta facilitadora de ensino como por exemplo: a utilização de artigos científicos como recurso didático; o processo empírico utilizando materiais de baixo custo; a utilização de ferramentas digitais para visualização de conceitos, ideias, teorias que não podem ser vistos no mundo macroscópico.

A Química Computacional e suas ferramentas são uma forma de facilitar a complexidade existente no processo de aprendizagem para os conceitos relacionados a mecanismos de reações orgânicas pois baseiam a proposição dos mecanismos de reações em objetos menos abstratos e mais concretos (MARIANO, *et. al.*, 2008).

Contudo, a utilização de métodos de Química Computacional pode trazer consigo algumas problemáticas como por exemplo, utilizar métodos *ab initio* na construção de um sistema eletrônico simples que descreva, matematicamente um aspecto de interesse particular a ser estudado desconsiderando alguns aspectos como por exemplo a necessidade se assumir uma reação simplificada em uma única etapa (MARIANO, *et. al.*, 2008).

Todavia, segundo Mariano *et. al.* (2008) tais simplificações são realizadas a fim de reduzir o tempo computacional de cálculo pois evitam a necessidade de incluir o meio reacional na resolução dos cálculos em tais mecanismos ocorrerá a formação de um carbocátion na qual há a necessidade de se estabilizar com a utilização de um solvente polar.

2.1.1. A utilização de TDIC na formação inicial de professores de Química

Na perspectiva de Gois (2020) com a utilização cada vez mais ampla de ferramentas tecnológicas, em diversos períodos temporais, possibilita o a indivíduos o desenvolvimento de habilidades distintas ocorridas por meio da socialização. Tal

desenvolvimento pode potencializar exercícios de cidadania no que tange ao acesso de informações precisas, utilização crítica das ferramentas; bem como a participação em debates nos mais variados espaços da sociedade. O autor ainda ressalta que, mediante esse cenário, o uso das TDIC em cenários formais de aprendizagem tem sido amplamente discutido, denotando suas possibilidades e desafios no ambiente acadêmico. Pois nos demais espaços da sociedade tais ferramentas têm ganhado cada vez mais relevância como, por exemplo, em espaços profissionais, lazer, contato social indireto (SANTOS, 2019).

Para alguns autores (LUDOVICO; BARCELLOS, 2019) o uso crítico-reflexivo das TDIC em atividades de ensino em espaços acadêmicos guarda certa familiaridade com a formação inicial de docentes em seus respectivos cursos de graduação. Para Silva e Queiroz (2017) para o ensino de Química o uso da TDIC, por exemplo, tem seu foco centralizado na formação inicial dos profissionais. Segundo os autores, é no processo de formação inicial que os futuros profissionais atuantes no Ensino Básico, em suas mais diferentes áreas de conhecimento, refletem sobre *como* utilizar as mais diversas abordagens em atividades de ensino, cujo foco está voltado no desenvolvimento do senso crítico de crianças e adolescentes sobre os conteúdos ensinados bem como as próprias ferramentas tecnológicas utilizadas.

Na percepção de Beja e Rezende (2014), um elemento essencial na formação inicial de professores, encontra-se no Estágio Supervisionado, na qual o indivíduo irá realizar atividades reflexivas acerca da docência como profissão e a utilização das TDIC como ferramenta auxiliar (em vários aspectos, não apenas o de auxílio no processo de aprendizagem, mas, também, como identidade docente). É nesse momento que muitos licenciando refletem de maneira crítica sobre o processo de planejamento docente, em especial sobre a escolha correta de abordagens de ensino que mais se adequem aos diversos temas e conteúdos. Desse modo, o uso das TDIC pode ser entendido como fundamental na abordagem de conteúdos relacionados da Química; assim para que os futuros docentes o considerem relevante em sua aplicação em sala de aula são necessárias discussões teóricas sobre a temática em disciplinas da própria graduação (REIS; LEITE; LEÃO, 2019).

Assim, a utilização das TIC em atividades de ensino toma uma roupagem importante no saber docente e na percepção dos próprios professores (PERIN; FREITAS; ROBLES, 2019). Segundo os pesquisadores Faraoum Júnior e Cirino (2016), essa especificidade no conhecimento docente pode ser desenvolvida na

formação inicial e tem como objetivo potencializar o uso desse tipo de ferramenta na sala de aula no futuro do professor de Química.

Na perspectiva de Gois (2020), a aprendizagem advinda do uso da TDIC por parte dos licenciandos em Química pode ser aprofundada com atividades desenvolvidas no estágio direcionado para a utilização destas ferramentas tecnológicas. Para além de um simples uso das tecnologias, é necessário que haja uma articulação entre os conteúdos escolares e conhecimentos pedagógicos, visando impulsionar a melhoria dos processos de ensino.

Corroborando com a ideia defendida por Gois, de que é necessário que haja um preparo na formação inicial de professores quanto ao uso de tecnologias, tem-se a ideia defendida por Leite (2015), existe uma aversão por parte de alguns professores quanto ao uso pedagógico de tecnologias, sejam estas modernas ou arcaicas. Isso advém do fato de que muitos professores já formados não estão (nem são) preparados para o uso pedagógico das tecnologias, sobretudo ao uso das TDIC. Outro fator problemático percebido é a adequação das tecnologias ao conteúdo que vai ser ensinado e aos propósitos de ensino.

Na perspectiva de Gabani e Diniz (2009), os conhecimentos que são desenvolvidos durante a formação inicial são, em vários momentos, colocados em evidência quando o professor se vê atuante em sala de aula, frente a situações que ele não pôde vivenciar.

Segundo Leite (2015), as TDIC têm contribuído na utilização das tecnologias pois facilitam a troca de informações e conhecimentos, na área da Educação isso não é diferente, pois são utilizadas como recurso pedagógico quando inseridas no cotidiano dos centros acadêmicos. já que oferecem várias ferramentas que colaboram com o ensino.

2.2. Computador como ferramenta didática no Ensino de Química

A utilização de ferramentas computacionais em Química pode ser definida segundo a *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) como “computational chemistry is a discipline using mathematical methods for the calculation of molecular properties or for the simulation of molecular behaviour. It also includes, e.g., synthesis planning, database searching, combinatorial library manipulation (IUPAC, 1997, p. 1141).”

Para Morgon (2001), a utilização de métodos computacionais pode ser útil em diversas subáreas da Química. Para a Química Orgânica, por exemplo, não é diferente, segundo o autor a utilização de tais métodos computacionais podem contribuir no estudo da estabilidade relativa de isômeros; no estudo de aromaticidade dos compostos, obtenção e análise de espectros de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), o entendimento de mecanismos de reação entre outras áreas de estudo de interesse Químico.

Segundo Atkins, de Paula e Freedman (2019) o principal desafio da Química Computacional está em resolver a equação de Schrödinger para sistemas multieletrônicos que, para alguns autores (ATKINS, DE PAULA & FREEDMAN, 2019); (MORGON, 2001) é analiticamente inviável.

Todavia, o campo de Química Computacional vem crescendo no cenário científico como aponta Atkins *et. al.* (2009) devido ao avanço ocorrido em *hardwares* e *softwares* eficientes de simulação em dinâmica molecular. Tais facilidades têm sido utilizadas em áreas que fazem o uso de cálculos químicos como, por exemplo a síntese de fármacos, resolução de problemas que envolvam aspectos de Química Ambiental, desenvolvimento de nanomateriais, no estudo de propriedades atômicas em sistemas moleculares (ALLOUCHE, 2011).

A utilização de técnicas computacionais vem sendo utilizada desde a década de 1960 como ferramenta de aprendizagem devido as possibilidades de uso das novas tecnologias emergentes (RAUPP, SERRANO & MARTINS, 2008).

De acordo com Raupp, Serrano e Martins (2008) o químico B. Duke, na universidade de Lancaster, Inglaterra, utilizou métodos de Química Computacional para explicar propriedades de compostos aromáticos. Os autores ainda explicitam que a metodologia adotada pelo pesquisador: elaborado em um curso de Química Quântica e utilizando programa para calcular matematicamente propriedades referente aos orbitais moleculares.

A iniciativa adotada por Duke se baseou na tentativa frustrada de cientistas da computação em introduzir técnicas computacionais como metodologia de ensino de aspectos químicos no ensino superior. Tal abordagem se deu devido a utilização de métodos computacionais em pesquisas químicas já realizadas naquela época. (RAUPP, SERRANO & MARTINS, 2008).

No ensino de Química o uso de computadores pode se tornar aliado do professor no processo ensino/aprendizagem, tendo em vista que são altamente capazes de proporcionar a visualização, a níveis moleculares, reações químicas bem como simular fenômenos físico-químicos. De acordo com Firmino *et al* (2020) é preciso usar este recurso de forma controlada e organizada para que essa tecnologia não se torne um entrave no processo de ensino/aprendizagem.

De acordo com Jucá (2006), a Química é uma ciência que necessita de recursos didáticos para que forneça uma melhor compreensão de determinados temas a serem estudados pelos discentes. Considerando que a ciência Química é conhecida por possuir certo grau de dificuldade para os estudantes; segundo Ferreira *et al* (2021) a Química raramente é vista em um contexto cotidiano, ou seja, falta uma significação que é evidenciada pela falta de interdisciplinaridade desta ciência com outras áreas de conhecimento.

Segundo Machado (2016), o emprego das tecnologias digitais advindas por meio de softwares permite a simulação e demonstração das mais diversas variáveis questão presentes nos fenômenos de transformação da matéria. Ainda de acordo com Machado (2016):

Por meio de seu emprego adequada e pedagogicamente envolvido numa abordagem significativa dos conteúdos, constata-se a existência de ações educativas com uso de ferramentas tecnológicas. Estas permitem que sejam estudados os arranjos geométricos, as ligações químicas, a atomística, os processos físico-químicos e ainda os compostos orgânicos (MACHADO, 2016, p. 104).

Além de realizar simulações que consideram uma série de variáveis físicas que interferem em reações químicas, a ferramenta didática na figura do computador ainda possibilita correlacionar as mais diversas áreas do conhecimento. Dentre as áreas mais lógicas a serem correlacionadas como Matemática, Física, Biologia, a Química Computacional consegue a interdisciplinaridade com a astronomia no estudo de componentes orgânicos formados no espaço sideral (ROSA, *et.al*.2019).

Como apontam Rosa *et al.* (2021) e Miranda *et al.* (2019), cerca de 20 % do carbono encontrado no meio interestelar se encontra na forma de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (HPAs). Os compostos analisados são obtidos por meio de bandas espectrais obtidos por telescópios espaciais. Os HPAs podem ter um de seus átomos de carbono substituídos por átomos de nitrogênio ou oxigênio, caso isso ocorra, a reação dá origem a compostos complexos que desempenham importante papel na origem da vida como é conhecida.

Pode-se denotar a importância da aplicação desta ferramenta computacional também no ensino, por meio da pesquisa científica, Machado (2016) aponta que a aplicação adequada das ferramentas computacionais pode ampliar a prática docente e promover a pesquisa científica.

2.3. Teoria Funcional Da Densidade

Um importante passo para o desenvolvimento da Química enquanto ciência que busca compreender as transformações sofridas pela matéria se deu nos campos da Física. Mais especificamente nos campos que viriam a ser conhecido como Mecânica Quântica. A história desta ciência começa com a resposta do físico Max Planck (1858-1947) ao problema da *Radiação do Corpo Negro*. Este problema consistia em corpos que, ao serem aquecidos, primeiro escureciam e depois começavam a emitir radiação em diferentes frequências do espectro luminoso. Cada substância possui uma assinatura de frequência específica. Para Planck, os átomos estavam oscilando em um Movimento Harmônico Simples (MHS) onde a energia era diretamente proporcional a frequência de oscilação. A proposta de Max Planck foi a de que a energia poderia ser quantizada e estava armazenada em pequenos pacotes que ficou conhecido como *quanta*. (HOLLAUER, 2007. p.2-7).

De acordo com Quaglio (2021) em 1923, Louis de Broglie propôs que a luz poderia ser considerada uma partícula (como podia ser constatado pelo efeito fotoelétrico proposto por Albert Einstein em 1905 e os elétrons poderiam apresentar movimentos ondulatórios e seu comprimento de onda poderia ser associado por $\lambda = h/p$. Em 1926, o físico austríaco Erwin Schrödinger, utilizando-se da analogia óptico-mecânica de William Rowan Hamilton, conseguiu desenvolver uma equação, que ficou conhecida como equação de onda, para a proposição de Louis de Broglie.

A equação de onda proposta por Schrödinger determina a função de onda de um sistema, seja ele um átomo, uma molécula ou um sólido. Esta função de onda³

² λ representa o comprimento de onda, h é a constante de Planck e tem seu valor $6,62 \times 10^{-34} m^2 Kg/s$, já o termo p representa a quantidade de momento da partícula.

³ Schrödinger acreditava que a função de onda indicava com precisão a posição de uma partícula no espaço e no tempo, contudo o princípio da incerteza proposto por Werner Heisenberg indica que não é possível saber estas informações simultaneamente. A aproximação de um parâmetro torna o segundo muito menos preciso. Porém, em 1928 o físico Max Born propôs que a função de onda indica a probabilidade de encontrarmos uma partícula em uma determinada região espacial.

contém toda a informação necessária para determinar o estado do sistema. Segundo Silva (2009), poucos são os sistemas que possuem uma solução analítica exata (limitando-se apenas para o átomo de hidrogênio, que possui apenas um elétron) e soluções numericamente aproximadas podem ser inviáveis para aplicação computacional.

De forma a encontrar uma solução da equação de Schrödinger para sistemas mais complexos os físicos Fermi e Thomas desenvolveram um método que se baseava na densidade eletrônica. Não seria uma solução exata, seria uma aproximação. A técnica ficou conhecida como Thomas-Fermi. O modelo proposto pelos cientistas era puramente estatístico e buscava aproximar a distribuição de elétrons em átomos. Este modelo de resolução é o precursor da Teoria Funcional da Densidade (TFD) (ATKINS; DE PAULA; FREEDMAN, 2011).

Para Custódio (2019) a TFD é fundamentada no teorema de Hohenberg-Kohr; esse teorema relaciona a densidade, $\rho(r)$, e o número de partículas, N , no estado fundamental de um sistema submetido a um campo de ação com potencial externo $v(r)$ com a função de onda de um sistema descrita por $\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N)$. Como se observa na Equação 1. Dessa maneira, a função de onda que descreve tal sistema pode ser dado pelo funcional da densidade:

$$\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N) = \Psi_0[n_0(r)] \quad (1)$$

Ou seja, para descrever um sistema por sua funcional de densidade tem-se que considerar a densidade eletrônica de todas as partículas envolvidas, bem como a ação de potenciais externos que agirão sobre essas partículas.

Segundo Aquino e Borges (2019), a TFD surge como alternativa aos métodos *ab initio* e os métodos semiempíricos ⁴empregados no estudo de sistemas moleculares em função de seus estados fundamentais e propriedades físicas. Ainda segundo os autores as vantagens em se utilizar a TFD ao invés dos outros métodos se deve a:

⁴ São métodos computacionais que utilizam dados empíricos disponibilizados pela literatura, mas que, pela escassez, suprem a falta de dados disponíveis com métodos numéricos de integração

[...] ganho em velocidade computacional e espaço em memória. Esse método é utilizado para cálculos de otimização de estruturas e propriedades espectroscópicas, tais como, ultravioleta, fotoeletrônica, ressonância magnética nuclear (RMN) e ressonância paramagnética eletrônica (RPE). O método é capaz de descrever sistemas moleculares relativamente grandes com eficiência e custo computacional relativamente baixo, comparado aos métodos *ab initio* (AQUINO & BORGES, 2019, p.62).

Desse modo, pode-se observar as vantagens de utilização do método TFD quando comparados aos métodos *ab initio*, no qual é preciso calcular a função de onda para cada elétron em um espaço tridimensional (considerando que o movimento do elétron compreende as coordenadas espaciais x, y, z) e não para o sistema como sendo um só.

De acordo com Silva (2009) a TFD é utilizada para estudar a estrutura eletrônica de sistemas complexos (aqueles com mais de um elétron), contudo, segundo alguns autores (MORGON & CUSTÓDIO (1994)); (AQUINO & BORGES (2019)) a utilização do método vai além dos sistemas complexos pois, utiliza da densidade eletrônica e a repulsão de coulomb (elétron-elétron), (elétron-núcleo) para formalizar um conceito mais acessível em termos químicos descritivos.

Com isso pode-se constatar que a Teoria Funcional da Densidade utiliza da densidade eletrônica para descrever a distribuição de carga elétrica em uma superfície tridimensional (átomo, molécula ou sólido). A utilização desta teoria tem se mostrado presente em estudos de interesse químico como por exemplo, em adsorção da cadaverina e putrescina em nanotubos de carbono (FERREIRA, 2020), a elaboração de nova geometria fractal doping para nanofibras de grafeno e a otimização de cristal (ZINAD, *et.al.*, 2020). A utilização da ferramenta computacional também se deu mediante a sua aplicação em sala de aula como ferramenta auxiliadora de aprendizado em Química Orgânica e Bioquímica (ORDOÑEZ, 2023), entretanto, as buscas realizadas nos portais: Google Acadêmico, *ScieloBrasil*, Periódicos da CAPES, SciencieDirect com as seguintes palavras chaves: “Teoria Funcional da Densidade” and “Ensino de Química”; “TFD” and “Ensino”; Teoria Funcional da Densidade” and “Ensino Superior”, utilizando o período temporal de 2010 à 2023 não se obtiveram resultados.

2.4. Teoria da Aprendizagem Significativa

De acordo com Moreira (2011) o que rege a aprendizagem significativa é a capacidade construtivista e mudança conceitual. Segundo o autor, para que um ensino seja considerado bom é necessário que este seja construtivista de modo a promover a mudança conceitual e, assim, ser um meio a facilitar a aprendizagem significativa.

Entretanto, Moreira (2010) ressalta que a educação continua a se promover com base nos conceitos de Postman e Weingartner (1969) (dispostos abaixo) classificados como fora de foco:

1. O conceito de “verdade” absoluta, fixa, imutável, em particular desde a perspectiva polarizada do tipo boa ou má.
2. O conceito de certeza. Existe apenas uma resposta “certa” e é absolutamente “certa”.
3. O conceito de entidade isolada, ou seja, “A” é simplesmente “A”, e ponto final, de uma vez por todas.
4. O conceito de estados e “coisas” fixos, com a concepção implícita de que quando se sabe o nome se entende a “coisa”.
5. O conceito de causalidade simples, única, mecânica: a ideia de que cada efeito é o resultado de uma só, facilmente identificável, causa.
6. O conceito de que diferenças existem somente em formas paralelas e opostas: bom-ruim, certo-errado, sim-não, curto-comprido, para cima-para baixo etc.
7. O conceito de que o conhecimento é “transmitido”, que emana de uma autoridade superior, e deve ser aceito sem questionamento.

De maneira oposta a ajudar os discentes a elaborar significados para conceitos como *quiralidade, energia de ligação, assimetria, ácidos e bases, velocidades de reações químicas, mecanismos de reações orgânicas*, na visão de Moreira (2010) está clara que novas ideias foram agregadas a lista de Postman e Weingartner como, por exemplo:

1. O conceito de informação como algo necessário e bom; quanto mais informação, melhor, estamos em plena era da informação.
2. O conceito de idolatria tecnológica; a tecnologia é boa para o homem e está necessariamente associada ao progresso e à qualidade de vida.
3. O conceito de consumidor cômico de seus direitos; quanto mais consumir, melhor; quanto mais objetos desnecessários comprar, melhor; mas deve fazer valer seus direitos de consumidor.

4. O conceito de globalização da economia como algo necessário e inevitável; o livre comércio sem restrições é bom para todos.

5. O conceito de que o "mercado dá conta"; por exemplo, a educação é uma mercadoria que pode ser vendida por qualquer instituição, "o mercado se encarrega" da oferta, da procura, da qualidade. (MOREIRA, 2010, p.4).

Nesta perspectiva, as instituições de ensino ainda buscam transmitir a ilusão de certeza com o adicional de se atualizar tecnologicamente, de modo a competir com outros mecanismos que difundem a informação, desse modo, preparando os discentes (de maneira inadvertidamente) para a sociedade de consumo, o mercado, a globalização; todavia, esta preparação é realizada fora de foco (MOREIRA, 2010).

Uma saída viável para este aprendizado fora de foco seria para alguns pesquisadores (POSTMAN & WEINGARTHNER, 1969); (MOREIRA, 2010) seria adotar uma aprendizagem significativa crítica, tornando o indivíduo apto para viver em sociedade buscando uma melhoria social conjunta.

Para Moreira e Masini (1989) a aprendizagem significativa pode ser caracterizada pela inserção cognitiva entre um conceito novo e um conhecimento pré-existente. Desse modo, o novo conhecimento adquire significados para o indivíduo que aprende; o conhecimento pré-existente se torna mais robusto, mais elaborado em termos de significados, adquirindo mais estabilidade.

De acordo com Moreira (2006) a variável que mais influência no processo da aprendizagem significativa é o conhecimento pré-existente, o autor embasa que só se pode aprender algo a partir de algo já conhecido. Desse modo, é preciso realizar uma averiguação sobre o conhecimento pré-existente e realizar a inserção de conceitos novos mediante a isso.

No que tange a aprendizagem significativa se sabe que o aprendiz não é um mero receptor passivo, pois ele precisa fazer uso dos significados que já estão internalizados em si cognitivamente de maneira não arbitrária para que possa captar os novos significados existentes nos materiais educativos (MOREIRA, 2006).

Nesse processo, ao mesmo tempo que está progressivamente diferenciando sua estrutura cognitiva, está também fazendo a reconciliação integradora de

modo a identificar semelhanças e diferenças e reorganizar seu conhecimento. Quer dizer, o aprendiz constrói seu conhecimento, produz seu conhecimento (MOREIRA, 2006, p. 5)

Entretanto, em oposição a aprendizagem significativa, está a chamada aprendizagem mecânica. Na qual o processo de ancorar novos significados não existe, pois, as informações são apenas memorizadas de maneira arbitrária. Esse tipo de “aprendizagem” é estimulado nas instituições de ensino pois tem como objetivo principal “passar” nas avaliações, mesmo que haja pouquíssima retenção de conteúdos, não requerendo compreensão e não considerando modificações de estado (MOREIRA, 2006).

De acordo com Ausubel (1963), a aprendizagem significativa é um mecanismo enraizado no ser humano que o permite armazenar uma vasta quantidade de ideias e informações presentes em qualquer campo de conhecimento. Segundo o autor, na aprendizagem significativa o processo no qual o indivíduo pode relacionar novas informações se dá de duas maneiras: não arbitrária e substantiva. Assim, é no percurso da aprendizagem significativa que o significado lógico do material de aprendizado se transforma em significado psicológico para o indivíduo.

Na perspectiva defendida por Lacerda, Reis e Santos (2016) a experimentação é um aliado estratégico que promove um aprendizado significativo no ensino de Química, Física ou Biologia, pois consegue interconectar os conteúdos trabalhados em sala de aula na resolução de problemas reais.

Quando se trata do ensino de Química, este sofre críticas devido à sua falta de foco, explanada por Postman e Weingartner (1969), pois o aluno é levado a decorar o nome de fórmulas, compostos, reações e propriedades, de modo que não consegue realizar uma relação científica com a natureza ou a sociedade em que está inserido. Na maioria dos casos, o docente não considera os conhecimentos pré-existentes do discente que foram construídos socialmente ao longo de sua vida (LACERDA, REIS & SANTOS, 2016).

Segundo Schnetzler (2008) a experimentação (que pode ser entendida como física ou de maneira virtual por meio de ferramentas computacionais) se torna relevante quando denota um caráter investigativo onde as ideias podem ser comparadas cientificamente. Desse modo, as experimentações tendem a priorizar o contato dos alunos como fenômenos químicos que possibilitem a criação de modelos

teóricos/experimentais que façam sentido a partir da observação promovendo uma aprendizagem significativa eficiente.

3. PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

Este trabalho possui a natureza de uma investigação aplicada e que seja concordante com os aspectos gerais de seus objetivos, de modo a ser classificado como exploratória e descritiva. O perfil exploratório do trabalho estará voltado para os seguintes elementos específicos: o desenvolvimento da Mecânica Quântica e sua influência na ciência Química por meio da chamada Química Quântica; a utilização do formalismo matemático como ferramenta didática para a compreensão de conceitos voltados às teorias quânticas; o emprego de softwares livres de dinâmica molecular que utilizem o método de cálculo baseado em *Density Functional Theory* como ferramenta pedagógica para a compreensão do formalismo matemático aplicado às teorias quânticas; a praxe do movimento TDIC aplicado ao estudo dos constituintes da matéria e, por fim, uma análise reflexiva acerca dos obstáculos no processo de ensinagem para a definição de conceitos como: densidade eletrônica, camada eletrônica, movimento orbital e função de onda. Desse modo, os materiais são extraídos por meio de consultas em livros, dissertações e teses indexadas em bibliotecas digitais de instituições de Ensino Superior, bem como artigos científicos de periódicos inseridos nas bases de dados: *Science Direct*, *Directory of Open Access Journals* (DOAJ) e *Scientific Electronic Library Online* (SciELO).

Seu caráter descritivo atuou na caracterização do processo de ensino utilizando o formalismo matemático na compreensão das teorias e conceitos pertinentes à Mecânica Quântica aplicada a Química Computacional na formação docente a ser implementada em uma turma do primeiro semestre no Curso de Licenciatura em Química presente no Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – Campus Maracanaú. Logo, a característica descritiva do trabalho se dará com por meio da aplicação da investigação, bem como as experiências assimiladas pelos participantes no decorrer da intervenção didático-científica assim como as associações individuais no processo de ensinagem próprios ao entendimento da Mecânica Quântica e da Química Computacional aplicada à Química.

Logo, foram aplicados questionários de modo a identificar a perspectiva docente e discente acerca dos fins propostos pela intervenção didático-científica. Os procedimentos científicos de investigação desenvolvidos se darão por meio de estudo de caso com abordagem quali-quantitativa, desse modo o trabalho se

qualifica como uma pesquisa mista.

3.1. Pesquisa Qualitativa

Este estudo será desenvolvido por meio de um estudo de caso. De acordo com Creswell (2016), o estudo de caso é uma estratégia investigativa na qual o pesquisador explora, de modo profundo, programas, eventos, atividades, processos, indivíduos unitários ou em coletivo. Os casos podem estar relacionados por um marco temporal de atividade. A coleta de dados neste procedimento metodológico se dá por vários meios por um período prolongado.

Para Yin (2001) o estudo de caso é uma excelente estratégia metodológica quando os pesquisadores utilizam questões do tipo “como” e “por que” em seus trabalhos. Desse modo, se encaixa perfeitamente nas indagações deste estudo que preconiza a entender as concepções dos discentes sobre o uso da mecânica quântica e do formalismo matemático em Química Orgânica.

Um dos aspectos estruturais da investigação em um estudo de caso, segundo Yin (2015) se dá por meio da definição do caso a ser estudado. Mediante a isso, na esfera deste estudo de caso a definição será a as percepções dos estudantes⁵ do primeiro semestre (mediante aos aspectos iniciais de mecânica quântica aplicada a Química e formalismo matemático existente) do curso de Licenciatura em Química, ofertado no Instituto Federal do Ceará (IFCE) – Campus Maracanaú, respeitando o conteúdo curricular da disciplina do referido curso.

Outro aspecto investigativo abordado por Yin (2015) se dá em determinar os dados relevantes a serem coletados. Segundo o autor, tal procedimento deverá ser elaborado e executado minuciosamente pelo pesquisador, haja visto que o estudo de caso possui fontes de evidências multifacetadas na qual os dados precisam convergir de modo triangular (YIN, 2015, p. 18). Com esta premissa, este estudo irá observar os seguintes dados: (a) as concepções existentes dos estudantes sobre mecânica quântica aplicadas ao desenvolvimento da Química bem como o formalismo matemático empregado ao entendimento dos fenômenos decorrentes

⁵ Para este estudo, estudantes que já tenham cursado a disciplina também serão considerados como indivíduos relevantes à pesquisa.

desta ciência; (b) as compreensões discentes sobre a ponte entre a mecânica quântica, Química e as relações tecnologias digitais de informação e comunicação (TDIC); (c) o processo de ensino que leva os estudantes a compreender os conceitos referentes à Química Quântica.

Em um estudo de caso, a análise de dados deve ser correspondente com as indagações iniciais da pesquisa delimitadas pelo pesquisador, ou seja, deve-se adotar um elemento de análise que seja favorável a interpretação dos dados encontrados na pesquisa. De acordo com Yin (2015) a análise dos resultados deve conter características quali e quantitativas do estudo indagado. Para este trabalho, será utilizado a técnica de Análise de Conteúdo de Laurence Bardin.

A elaboração do alicerce desta pesquisa se deu no arremate das problemáticas apresentadas que se encontram no questionário de investigação sobre o processo de ensinagem e obstáculos epistemológicos que recai aos discentes no curso de Licenciatura em Química sobre os conteúdos referentes à mecânica quântica e sua interferência nos mecanismos de seta curva com indagações sobre o conhecimento prévia à intervenção docente.

Yin (2015) indica que na escolha dos casos deve-se considerar os casos que possuam maior probabilidade de esclarecer as questões pertinentes a pesquisa do investigador.

A hipótese levantada por este estudo é de que os estudantes acabam levando os conteúdos abordados pela mecânica quântica, tratada de modo relapso nas disciplinas decorrentes do curso, a um reducionismo filosófico esquecendo-se dos conceitos físicos e das previsões matemáticas feitas pelos modelos quânticos quanto ao comportamento dos elétrons nos processos de seta curva na formação do professor. Estes entraves têm sido evidenciados recentemente em pesquisas educacionais como demonstrado por Oliveira e Gomes (2021) em sua crítica ao reducionismo filosófico do conteúdo pertinente à Mecânica Quântica na formação do professor de Química, sobre o aprofundamento em mecânica quântica para o entendimento do comportamento da matéria na ciência Química apresentada por Schappo (2018), Costa e Schappo (2021) e por Braga e Carvalho (2022).

Para tanto, se faz necessário seguir uma metodologia que se utilize da modelagem matemática voltada para os aspectos quânticos da matéria de modo a contemplar as particularidades químicas de sistemas estudados. Logo, irá se utilizar do método imposto pelos autores Pedrosa, Siqueira e Mafra (2015), que realizam a utilização de modelagem matemática no Ensino Superior de Química seguindo três passos: a construção do modelo, a análise do modelo e a validação via cálculos computacionais utilizando TFD.

A construção do modelo tem por objetivo expressar matematicamente os princípios que governam a problemática. Em tal etapa, é de suma importância identificar corretamente as variáveis, escolher corretamente as unidades de medida e, quando possível, utilizar resultados teóricos já obtidos. A análise dos resultados obtidos consiste em verificar a existência de alguma lei de formação para o modelo que já tenha sido explicitado na literatura. Pois nesta etapa, o que se procura é um ponto de partida simples, utilizando modelos menos complexos (PEDROSA; SIQUEIRA E MAFRA, 2015).

Desse modo, visando lograr êxito nos objetivos propostos por este estudo, se aplicará uma abordagem qualitativa no estudo de caso que, de acordo com Richardson (p.90),

A pesquisa qualitativa pode ser caracterizada como a tentativa de uma compreensão detalhada dos significados e características situacionais apresentadas pelos entrevistados, em lugar da produção de medidas quantitativas de características de comportamentos.

A pesquisa qualitativa visa, em âmbitos descritivos, retratar a complexidade de problemas e hipóteses analisando a interação de variáveis, de modo a compreender e classificar processos sociais, oferecendo contribuições significativas para a criação e/ou modificação de opiniões de determinados grupos (RICHARDSON, 1999, p.80).

Segundo Lima, Harres e Paula (2018), a pesquisa qualitativa é utilizada no meio acadêmico como uma nova perspectiva para a produção e acumulação de conhecimento científico que se dá por meio da interação entre o pesquisador e os sujeitos. Para o autor, a abordagem qualitativa facilita na compreensão mais aprofundada de alguns fenômenos decorrentes no processo de ensino; desse modo,

podendo ser utilizada para investigar diversos contextos.

No presente trabalho, o principal foco a ser estudado refere-se ao processo experimentado por discentes do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE), durante o período acadêmico em que os estudantes cursam a disciplina relativas aos fundamentos e teorias presentes na Mecânica Quântica como Química Orgânica I e II e sua aplicação em tais disciplinas.

3.2. A carência de estratégias metodológicas para se trabalhar o ensino de Química no ensino superior

Segundo alguns autores, (ALMEIDA, 2002; YAMAGUCHI & SILVA, 2019) o baixo desempenho no Ensino Médio nas escolas brasileiras acaba refletindo na performance acadêmica dos discentes do Ensino Superior em seus primeiros competentes curriculares da graduação. Este cenário tem como resultado o abandono do curso devido às reprovações nos primeiros semestres dos cursos. Desse modo, podemos atribuir, como parte dos frutos desse processo os crescentes índices de evasão universitária nos últimos anos (INEP, 2020).

De acordo Yamaguchi e Silva (2019), uma das disciplinas que mais acarretam reprovações no Ensino Superior é a Química Geral. De acordo com os autores as dificuldades que advém da disciplina acabam sendo um fator determinante para a permanência dos discentes nos cursos de graduação, tendo em vista que, muitas vezes, é por meio da Química Geral o primeiro contato dos alunos com o universo da Química na universidade. Haja visto que a importância da disciplina não retem apenas na sua própria seara, mas, também, para outras áreas do saber como, por exemplo Química Orgânica e Bioquímica (para áreas da saúde) e Química Analítica, Inorgânica e Físico-química (para áreas de exatas, engenharias e licenciaturas).

Para Santos, Ribeiro e Souza (2018) é visando este cenário que se torna importante a utilização de diferentes estratégias metodológicas e ferramentas que possam ser utilizadas para contribuir no processo de ensino-aprendizagem da Química, de tal modo que estas estratégias/ferramentas possam ser modificadas e assumam novas configurações de ensino-aprendizagem.

De acordo com os Parâmetros Nacionais Curriculares (BRASIL, 2022) o ensino de Química precisa criar possibilidades que auxiliem os discentes na compreensão do conteúdo e na construção do conhecimento científico, encurtando as relações existente entre ambos, considerando suas implicações na sociedade. Desse modo, como afirmam Santos, Ribeiro e Souza (2018), é preciso utilizar metodologias educacionais que possibilitem aos discentes desenvolverem suas capacidades críticas, criativas e investigativas.

Segundo Amaral (1996) o ensino de um fenômeno químico por meio de uma abordagem empírica possui uma maior significância para o processo de aprendizagem do discente. De acordo com o autor, tais processos experimentais possuem mais relevância do que a mecanização provinda de atividades banais como exercícios. Contudo, vale ressaltar a visão de Monteiro *et. al.* (2021) na qual o autor equipamento para a construção de um laboratório possuem um elevado custo. Corroborando com essa ideia, Oliveira Junior (2020) alega que o uso de ferramentas tecnológicas como: simuladores, vídeos, softwares de interação e/ou realidade aumentada podem substituir os caros equipamentos existentes de um laboratório experimental.

Desse modo, este trabalho realizou um levantamento sobre as instituições públicas de ensino que possuem o curso superior em Química para saber quais possuem em sua grade curricular (seja na modalidade obrigatória (OB) ou optativa (OP)) alguma disciplina que possua algum conhecimento, por mais básico que seja em Mecânica Quântica, Química Computacional, ou ainda, a aplicação de ferramentas computacionais na formação docente, como demonstrado na Tabela 1, abaixo:

Tabela 1 – IES que possuem conhecimentos de Química Computacional.

Instituição de Ensino Superior	Disciplina	Ementa	Modalidade (OP/OB)
Universidade Federal do Ceará	Tecnodocência (modalidade Licenciatura)	Abordagens Científicas Contemporâneas. Teoria de Fluxo. Planejamento e Plano de Aula. Aprendizagem Significativa. Abordagens metodológicas vinculadas às Tecnologias e TDIC. Prática docente.	OP
Universidade Federal do Ceará	Físico-química Teórica IV (modalidade Licenciatura)	Equação de Schroedinger. Operadores, autovalores e autofunções. Modelo da partícula na caixa. Espectros eletrônicos de moléculas orgânicas usando o modelo da partícula na caixa. Postulados da mecânica quântica. Modelo quântico do oscilador harmônico e espectroscopia vibracional de moléculas diatômicas. Rotor rígido e espectroscopia rotacional de moléculas diatômicas. Espectroscopia roto-vibracional de moléculas diatômicas. Átomo de hidrogênio.	OP
Universidade Federal do Ceará	Princípios de Física Moderna (modalidade Licenciatura)	Relatividade especial. Propriedades corpusculares das ondas. Propriedades ondulatórias das partículas. O Átomo. Mecânica quântica. Teoria quântica do Átomo do Hidrogênio. O núcleo. Radioatividade	OP
Universidade Federal do Ceará	Química Inorgânica Teórica I (modalidade Bacharelado)	Princípios da Mecânica Quântica: a Equação de Schrödinger e o Átomo de Hidrogênio. Orbitais atômicos, Átomos Multieletrônicos e Termos Espectroscópicos. Periodicidade química. Sólidos iônicos. Modelos de ligação química: Lewis, Teoria de Ligação de Valência e Teoria do Orbital Molecular. Simetria de Orbitais. Simetria Molecular. Teoria do orbital molecular para moléculas poliatômicas.	

Universidade Federal do Ceará	Físico-química Teórica IV	Equação de Schroedinger. Operadores, autovalores e autofunções. Modelo da partícula na caixa. Espectros eletrônicos de moléculas orgânicas usando o modelo da partícula na caixa. Postulados da mecânica quântica. Modelo quântico do oscilador harmônico e espectroscopia vibracional de moléculas diatômicas. Rotor rígido e espectroscopia rotacional de moléculas diatômicas. Espectroscopia roto-vibracional de moléculas diatômicas. Átomo de hidrogênio.	OB
Universidade Estadual do Ceará	Informática aplicada à Química	Não foi encontrado documento que descrevesse, de maneira clara e concisa, quais conteúdos são trabalhados na disciplina.	OP
Instituto Federal do Ceará	Informática aplicada ao Ensino	Introdução à Informática. Internet. Utilização de Recursos da Informática para o Ensino. Softwares Educacionais para o Ensino da Química.	OB
Universidade Regional do Cariri	Computação para Química	Não foi encontrado documento que descrevesse, de maneira clara e concisa, quais conteúdos são trabalhados na disciplina.	OB
Universidade Regional do Cariri	Introdução à Quântica	Não foi encontrado documento que descrevesse, de maneira clara e concisa, quais conteúdos são trabalhados na disciplina.	OP
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira	—	Não existem disciplinas que atendam às exigências propostas pelo pesquisador desta obra	—

Fonte: Elaborado pelo autor (2023),

Como mostra a Tabela 1, nas universidades públicas de Ensino Superior no Estado do Ceará, que ofertam o curso de Química (seja na modalidade de Licenciatura ou Bacharelado), não há uma disciplina específica que trabalhe, de maneira isolada e aprofundada os conteúdos de Mecânica Quântica ou Química Computacional; mesmo que algumas disciplinas, como no caso do Instituto Federal do Ceará e na Universidade Federal do Ceará trabalhem o uso do computador, a ementa das disciplinas é voltada para algo mais simplório, não unindo as aplicações potenciais do computador com Química, detendo-se apenas ao uso pedagógico, de modo trivial. Por sua vez, torna-se difícil analisar a disciplina ofertada pela Universidade Regional do Cariri (Computação para Química) e pela Universidade Estadual do Ceará (Informática aplicada à Química), uma vez que não foi encontrado a ementa de seus respectivos cursos.

O mesmo acontece quando analisamos ao ensino de Mecânica Quântica nos cursos, pois quando são apresentados, são apregoados como ferramentas de disciplinas específicas e não trabalhados de maneira isolada. Toda via, na Universidade Regional do Cariri, a disciplina é trabalhada de maneira exclusiva, mas de forma optativa, e com sua ementa não sendo disponibilizada, torna-se difícil realizar uma análise do curso ofertado.

3.3. *Campo de pesquisa*

Esta pesquisa foi realizada em um *campus* do Instituto Federal do Ceará (IFCE) (Figura 1), localizado no bairro Distrito Industrial, no município de Maracanaú, região metropolitana de Fortaleza. Esta instituição de ensino pública é subsidiada por verba advinda do Governo Federal Brasileiro e possui cursos de formação em vários níveis de ensino – técnico, graduação e pós-graduação. O *campus* em questão oferta dois cursos de nível superior na modalidade de licenciatura – Química e Matemática – funcionando em regime integral e noturno, respectivamente.

Figura 1 – localização da instituição de ensino



Fonte: Google Maps⁶ (2023)

Foi realizada uma investigação com os alunos do 1º semestre do curso de Ensino Superior em Licenciatura em Química. Todos os discentes participantes da pesquisa precisavam estar matriculados na disciplina de Química Geral I (disciplina registrada automaticamente mediante a matrícula dos alunos no curso) Dessa maneira, este estudo pretende formular um diagnóstico contextualizado e satisfatório sobre o processo de absorção de conhecimentos teóricos, quais obstáculos de aprendizagem existentes nos alunos desta instituição de ensino de modo a comparar as dificuldades existentes entre os indivíduos pertinentes ao conteúdo e tendo como suporte de aprendizagem significativa aspectos quânticos, matemáticos e computacionais em sua formação inicial docente.

3.4. Participantes da pesquisa

Os indivíduos participantes dessa pesquisa foram os discentes, maiores de idade, matriculados a disciplina de Química Geral I do curso superior em Licenciatura em Química (cuja modalidade de ensino é integral) pertencente ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará – *campus* Maracanaú.

⁶

https://www.google.com/maps/place/Instituto+Federal+de+Educa%C3%A7%C3%A3o,+Ci%C3%ancia+e+Tecnologia+do+Cear%C3%A1+-%7C+Campus+Maracana%C3%9A/@-3.8720604,-38.6113387,774m/data=!3m2!1e3!4b1!4m6!3m5!1s0x7c752117820684d:0x50bac00cac892a1d!8m2!3d-3.8720604!4d-38.6113387!16s%2Fg%2F1tj_5g84?entry=ttu. Acesso em: 14 de ago. de 2023.

Junto a coordenação do curso foi definido que a intervenção didática aconteceria com data e horário marcados para sua realização dentro das dependências do *Campus* na Semana de Integração Científica (SIC) junto a Semana da Química (SEMANQ), em dois dias de evento. A intervenção se deu nos espaços do laboratório de geotecnia localizado no Bloco I do *Campus* Maracanaú do Instituto Federal do Ceará.

Os critérios considerados para a inclusão dos participantes para esta pesquisa não distinguiram aspectos voltados à idade, cor, raça, sexo ou quaisquer outros parâmetros físicos ou sociais. As restrições existentes serão: os estudantes tenham concordado em participar da pesquisa por meio do preenchimento do Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (Apêndice VII), estejam regularmente matriculados no curso de Licenciatura em Química, que estejam cursando a disciplina de Química Geral I.

3.5. *Procedimentos de coleta*

Os procedimentos iniciais desta pesquisa foram efetuados mediante a assinatura do termo de autorização e existência de infraestrutura para a realização da pesquisa pelo(a) coordenador(a) Departamento de Extensão, Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação (DEPPI) do IFCE – campus Maracanaú (Anexo A). Esse documento foi então inserido digitalmente na Plataforma Brasil juntamente com o esboço do projeto de pesquisa, bem como todos outros documentos⁷ vinculados a esta submissão para o Comitê de Ética e Pesquisa (CEP) pertencente ao Instituto Federal do Ceará. Desse modo, a coleta de dados só poderá ser iniciada mediante a aprovação desta pesquisa pelo CEP/IFCE.

Após este processo, o coordenador do curso foi visitado, e em um esclarecimento verbal, foi detalhado todos os processos de coleta de dados desta obra, de modo que ele ficou ciente do que se tratava a pesquisa e, assim, dando consentimento para que o trabalho fosse realizado nas dependências do bloco um

⁷ O Comitê de Ética e Pesquisa do IFCE estabelece os seguintes documentos oficiais que precisam ser submetidos com a pesquisa: declaração de compromisso de apresentação de resultados, declaração de garantia de regresso dos benefícios da pesquisa, orçamento para a realização da pesquisa, cronograma de execução da pesquisa, Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE) e Termo de Assentimento Livre e Esclarecido (TALE).

(pertencente aos cursos de Licenciatura em Química e Engenharia Ambiental e Sanitária).

Em seguida, foi encaminhado aos discentes da disciplina o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido para a sua participação na pesquisa (Anexo C). A aplicação e aceitação do TCLE foi feito de forma *online* utilizando a extensão do Google, chamado *Forms*, de modo que, os discentes que consentissem em participar da pesquisa seus dados seriam automaticamente coletados pela plataforma e enviados ao pesquisador responsável.

Por fim, com todas as autorizações de pesquisa documentadas e salvas em uma nuvem online para que não corressem o risco de serem perdidas por alguma falha (seja por falha técnica da máquina ou por falha humana no manuseio e tratamento das informações por parte do pesquisador).

O questionário foi aplicado aos alunos que estavam cursando a disciplina de Química Geral I (Apêndice II). Com este questionário, procura-se sondar as percepções iniciais dos alunos acerca da disciplina, bem como seus conhecimentos prévios sobre os assuntos foco desta pesquisa e utilização da mecânica quântica na Química e técnicas de Química Computacional, apoiada na TFD na formação docente. Após a entrega desse instrumento, os alunos tiveram até 60 minutos para preenchê-lo que conteve doze perguntas sendo cinco de múltipla escolha abordando aspectos sociais e 7 versaram sobre os entraves epistemológicos referente à aquisição de conhecimento por parte dos discentes quanto aos possíveis entraves na disciplina bem como as percepções sobre modelagem matemática, uso de simulações computacionais e conhecimento da TFD. A validação deste questionário se dará por meio dos métodos de validação descritos por Lang (1986) de modo que adaptado ao estudo em foco.

Após a aplicação do questionário II, foi realizado, em outro momento um pequeno teste para mensurar o nível de aprendizado dos alunos mediante ao entendimento de conceitos pertencentes à mecânica quântica e técnicas de Química computacional, após um primeiro contato com os assuntos relacionados à disciplina de Química Geral I e atividade docente. Esse teste também visa interpretar em quais pontos os alunos sentem mais dificuldade (quanto aos conceitos matemático-quânticos ou os referentes ao comportamento químico da matéria em escala atômica).

O questionário III (Apêndice III) foi aplicado antes e depois da intervenção tratará das concepções tecnológicas e científicas dos discentes participantes desta pesquisa para mensurar seu grau de instrução em *prompt* de comandos de desktops/notebooks. Constará com 5 perguntas subjetivas referente ao estudo da temática da intervenção, a fim de medir o grau de aceitação decorrente à atividade didática. Esta ferramenta visa mensurar o nível de aceitação ou rejeição dos discentes mediante ao processo de intervenção do pesquisador. Essa assertiva visa, também, mensurar se o nível de aprendizado dos participantes está sendo satisfatório; para tal será utilizado o método de validação de Lang (1986) de maneira adaptada quanto à disciplina foco desta pesquisa.

O questionário IV (Apêndice IV) foi aplicado após a intervenção didática e interpelará os discentes acerca da atividade e o grau de satisfação dos mesmos mediante ao curso aplicado e ao desenvolvimento de suas aprendizagens quanto ao conteúdo de mecanismos de seta curva utilizando a modelagem matemática, a mecânica quântica e as simulações computacionais via TFD. Mediante a isso, este recurso, após entregue, deverá ser preenchido em até 60 minutos e será composto por 5 indagações objetivas na escala *Customer Satisfaction Score* (CSAT) Para tais questionamentos serão abordados 7 alusivas quanto as concepções dos alunos sobre a atividade e seu papel no aprendizado em técnicas de Química Computacional aplicadas a pesquisa acadêmica e atividade docente.

3.6. Planejamento e Aplicação da intervenção

A proposta de intervenção didática (Apêndice VII) desta pesquisa teve uma carga horária total de 18 horas, compreendendo em 10 momentos de pesquisa, com uma carga horária total de, ilustrados no Quadro 1 abaixo.

Quadro 1 – Descrição dos momentos da pesquisa

MOMENTOS DE PESQUISA	CARGA HORÁRIA	DESCRIÇÃO
1º	1h	Apresentação da pesquisa para o coordenador responsável pelo curso de graduação.
2º	4h	Elucidação da pesquisa com os alunos, apresentação da proposta da pesquisa e entrega do TCLE bem como aplicação do questionário I.

3º	2h	Aula de observação da turma, apresentação da proposta da pesquisa, entrega do TCLE.
4º	1h	Aplicação do questionário II.
5º	1h	Aplicação do questionário V.
6º	2h	(Intervenção didática) Realização de curso de formação voltado para a introdução à mecânica quântica e sua aplicação prática em mecanismos de reações orgânicas.
7º	2h	(Intervenção didática) Execução de curso de formação sobre Química computacional e aplicação da TFD em Química orgânica com ênfase em modelagem matemática.
8º	2h	Teste para mensurar os conhecimentos adquiridos pelos alunos, mapeando as dificuldades e as facilidades e aplicação do questionário IV
9º	1h	Aplicação do questionário III.
10º	2h	Aplicação da pesquisa de satisfação.
TOTAL	18h	

Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

O 1º momento foi referente a apresentação do plano de pesquisa para o coordenador do curso de Graduação em Licenciatura em Química de tal modo a elucidar toda a metodologia e cronologia da pesquisa, deixando claro seus objetivos. Este primeiro momento demandou de uma pouca carga horária, levando assim 1 hora para a sua conclusão.

Para o 3º momento, o pesquisador estava presente em uma aula de 2 horas para observação dos estudantes para que, ao término da aula, fosse explanado para os discentes um esclarecimento sobre a pesquisa e convidou os estudantes a participarem da pesquisa. Por meio da concordância dos alunos, foi disponibilizado o *link* para aceite digital do Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE).

O 4º momento correspondeu a aplicação do questionário II aos alunos que estão matriculados na disciplina de Química Geral I de modo a questioná-los sobre as dificuldades de aprendizagem vivenciada por eles em conteúdos relacionados à Química, bem como questionamentos voltados para os entraves matemáticos existentes na disciplina, conteúdos voltados à mecânica quântica e sua aplicação

também serão abordadas no escopo do questionário aplicado neste momento. Desse modo, para a conclusão deste momento o pesquisador necessitou de 1 hora

Desse modo, foi no 5º momento que se deu efetivamente a intervenção didática com a apresentação de um curso de formação voltado para aspectos iniciais sobre a mecânica quântica. Neste momento assuntos como teoria atômica moderna, funções de onda do elétron, equação de Schrödinger e suas aplicações no desenvolvimento da Química Orgânica foram abordados com os discentes. Para esta etapa da pesquisa o pesquisador necessitou de 2 horas para sua elucidação, as etapas seguidas neste minicurso seguiram o modelo de aula apresentada no anexo D. Dentro do escopo do minicurso foi disposto um momento para discursão do conteúdo abordado.

Ainda no 6º momento, o pesquisador utilizou um *notebook* para aplicação da simulação em Química Computacional com as seguintes configurações: processador Intel (R) Celeron (R) N4020C CPU 1.10 GHz; 4 GB de memória RAM. A arquitetura utilizada pelo computador é de 64 bits.

O 7º momento, também se deu no formato de um curso de formação na qual foram abordados aspectos da Teoria Funcional da Densidade, tendo em vista que, no momento anterior, os discentes estudaram sobre mecânica quântica. Para além disso, os aspectos da aplicabilidade da TFD em Química computacional também foram abordados. Neste momento, se mostrou necessário a utilização do laboratório de informática do *locus* da pesquisa, pois foram utilizados programas de modelagem molecular bem como de cálculos computacionais que utilizam a TFD como metodologia de resolução para sistemas atômicos multieletrônicos. Com os resultados obtidos por meio dos cálculos computacionais, os discentes realizaram uma atividade referente ao processo de seta curva, utilizando papel e material de escrita, na qual os indivíduos propuseram mecanismos de reações orgânicas. Após este processo, os alunos realizaram uma modelagem matemática por meio dos cálculos quânticos obtidos, de tal modo a confirmar as hipóteses levantadas no processo de proposição de mecanismos de reações orgânicas.

Dentro do 8º momento, foi aplicado um pequeno teste para mensurar se o processo de ensino aprendizagem dos alunos sobre a elaboração de mecanismos foi eficiente utilizando os recursos abordados no minicurso. O questionário também serviu para mapear os entraves dos alunos acerca da proposição dos mecanismos de

reações orgânicas, modelagem matemática e Mecânica Quântica. Ainda no 8º momento, foi aplicado o questionário IV. Para a conclusão deste momento, o pesquisador necessitou de mais 1 hora.

No 9º momento, o questionário III foi aplicado de modo a mensurar a aprendizagem específica dos discentes acerca da temática de modelagem matemática e mecanismos de seta curva afim de estruturar e mapear as os entraves encontrados pelos alunos durante o processo de ensino aprendizagem. Neste momento, foi necessário do tempo de 1 hora para a conclusão desta etapa.

Por fim, com o 10º momento, foi aplicado aos discentes que participaram deste trabalho uma pesquisa de satisfação quanto ao conteúdo teórico/experimental do curso de formação. Para a conclusão deste momento, foi necessária 1 hora.

3.7. Procedimentos de análise

Este estudo consiste em analisar as dificuldades existentes dentro da disciplina de Química Geral I e busca ainda, utilizar de conceitos referentes à modelagem matemática, mecânica quântica e utilização da Teoria Funcional da Densidade (TFD) como ferramenta didática na compreensão do conteúdo programático da disciplina. Desse modo, para analisar seus resultados utilizará duas metodologias diferentes. A primeira metodologia adotada será Análise de Conteúdo (AC) de Laurence Bardin (2016). A AC deste estudo compreendeu-se em três etapas: pré-análise, exploração do material e tratamento dos resultados e interpretação final.

A primeira etapa (pré-análise), foi composta de uma organização inicial de todos os dados (os questionários aplicados), desse modo, o pesquisador organizou o material coletado por categoria temporal, referente aos semestres em que os discentes cursaram a disciplina. Dessa maneira, se espera caracterizar os dados referente aos obstáculos de aprendizagem dos alunos.

A etapa seguinte consistiu em realizar uma exploração do material obtido. Nesta fase o pesquisador codificou, decompôs e enumerou todo o material coletado.

Para isso se fez uso do *software* IRAMUTEQ⁸ que é um *software* gratuito utilizado para realizar análise textual discursiva.

A metodologia utilizada pelo programa se baseia na análise das perguntas feitas pelo pesquisador e as respostas dadas pelos pesquisados. Dessa maneira, após a leitura dos questionários e das respostas (que serão anexados, um por um pelo pesquisador responsável), o *software* tem como resultado as possíveis unidades de sentido referente às respostas dadas pelos participantes da pesquisa. Mesmo que não haja respostas por parte dos pesquisados, o IRAMUTEQ considera as perguntas não respondidas como sendo de seara desconhecida por parte dos entrevistados.

A utilização do IRAMUTEQ se torna viável para a realização desta pesquisa pois, conforme Martins *et. al.* (2022), este programa já vem sendo utilizado na literatura por pesquisadores do ensino de ciências.

Na última fase, os dados ordenados e selecionados foram tratados para que se pudesse chegar ao resultado deste estudo. Os resultados primitivos, aqueles cujos fatores fugiram de uma área epistemológica, foram lapidados e deram lugar aos resultados mais significativos. Desse modo, os dados considerados significativos estarão dentro de um universo amostral estatístico; assim, foram desdobrados à mensagem referente a cada item interrogado nos questionários aplicados e na interpretação última dos resultados.

A segunda metodologia adotada visou analisar os dados obtidos por meio do questionário IV, que foi aplicado após a intervenção didática. Este questionário teve como base a utilização da escala *Customer Satisfaction Score* (CSAT) e visou mensurar o grau de satisfação dos estudantes quanto à metodologia adotada na intervenção didática.

Na escala CSAT, as respostas obtidas são quantificadas por meio de uma escala dividida em 5 categorias – que vão de 1 a 5, na qual 5 é o mais alto grau de satisfação - que são:

- **Muito insatisfeito (1);**
- **Insatisfeito (2);**
- **Neutro (3);**

⁸ <https://www.iramuteq.org/>

- **Satisfeito (4);**
- **Muito satisfeito (5).**

Desse modo, a moda referente à esta pesquisa foi utilizada para indicar o grau de satisfação dos discentes. Para a elaboração de tabelas e análise estatística deste resultado será utilizado *software* Windows Excel. Para as inferências da análise será adotado um nível de significância de 5%.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados deste trabalho, obtidos por meio de questionários *online* (via Google Forms), estão dispostos em seis subseções. A primeira subseção tratou dos aspectos sociais dos discentes que participaram da pesquisa, bem como seu nível de percepção sobre o processo de aquisição intelectual individual técnico/científica de cada um; entretanto, esta subseção possui um caráter mais generalista acerca das percepções de dificuldades de aprendizado. A segunda subseção objetivou mensurar as percepções dos indivíduos que participaram deste trabalho quanto as perspectivas iniciais acerca do conteúdo referente à mecanismos de reação orgânica, utilização de métodos computacionais operantes na Teoria Funcional da Densidade bem como os conhecimentos químicos ligados a estas searas. A terceira subseção se destinou a mensurar os níveis de aprendizado dos discentes participantes mediante ao entendimento dos conceitos integrados à mecânica quântica e sua aplicação em Química Computacional bem como técnicas de Química Computacional. A quarta subseção, foi aplicada em dois momentos, e teve como objetivo visar o nível de captação dos discentes participantes quanto aos conteúdos referentes as técnicas de Química Computacional. A sexta e última seção serviu para mensurar o nível de satisfação dos indivíduos participantes quanto à aplicação da intervenção, bem como sobre o conteúdo abordado durante o processo.

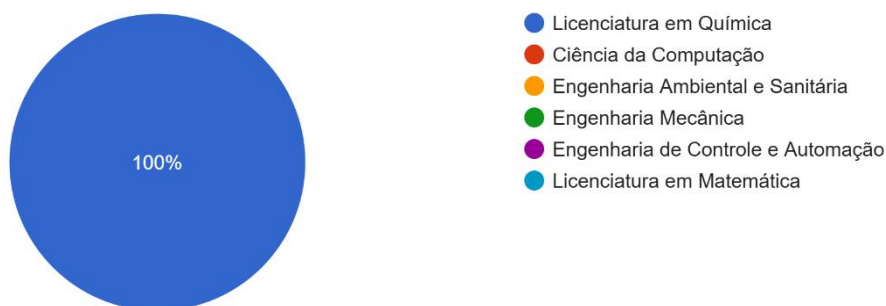
4.1 Aspectos sociais dos discentes participantes e percepções iniciais sobre Química Computacional

Os dados obtidos sobre os participantes deste trabalho foram avaliados, com a finalidade de fundamentar e contextualizar de modo social os níveis de aprendizado adquiridos posteriormente. Na Instituição de Ensino Superior (IES), local na qual esta pesquisa foi realizada, existem 6 (seis) cursos na modalidade de graduação. Dos discentes participantes desta pesquisa 7 deles (o que totaliza o universo inteiro da pesquisa, 100%) é aluno do curso de Licenciatura em Química, conforme mostra o Gráfico 1.

Gráfico 1 – curso de graduação dos estudantes.

Qual seu curso?

7 respostas

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2024).

Por meio do Gráfico 1, constata-se que todos o universo da pesquisa se deu todo com discentes do curso de Licenciatura em Química da IES; contudo, se houvessem alunos de outros cursos de graduação, a intervenção poderia ser realizada da mesma maneira, tendo em vista que o conteúdo programático da intervenção, mesmo sendo destinada para a ciência Química, não impede o benefício para outras áreas científicas.

Além do aspecto acadêmico atual dos discentes, foi analisado o tipo de rede escolar frequentada pelos indivíduos no Ensino Médio. O resultado se encontra no Gráfico 2.

Gráfico 2 – Rede escolar frequentada pelos discentes no Ensino Médio.

Você cursou o Ensino Médio em que rede de ensino?

7 respostas

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2024).

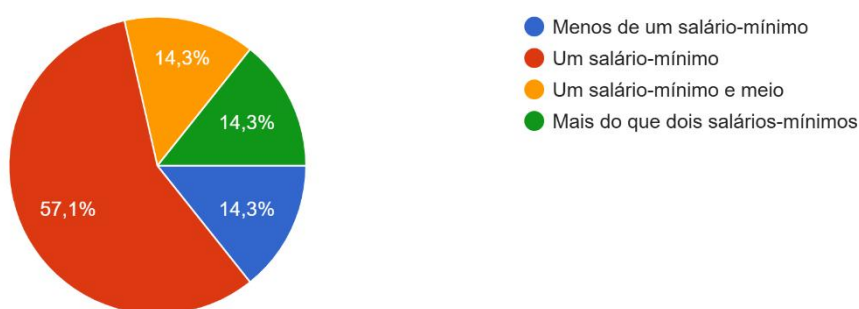
Os discentes, de acordo com o Gráfico 2, informaram que cursaram todo o Ensino Médio em escola da rede pública de ensino.

A renda familiar dos discentes foi examinada, seus resultados estão expostos no Gráfico 3.

Gráfico 3 – Renda familiar per capita.

Quanto equivale a sua renda familiar por integrante

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

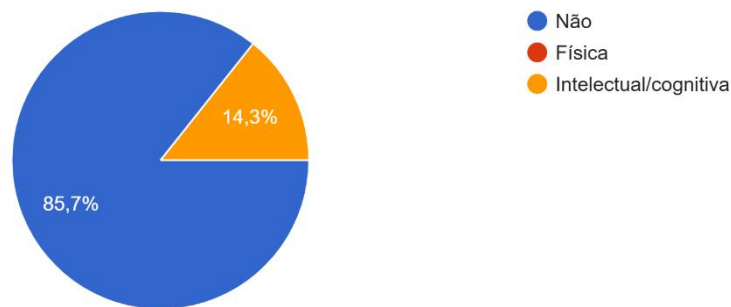
Quanto à renda per capita familiar, 1 participante (14,3%) alega viver com menos de um salário-mínimo; 4 participantes (57,1%) alegam viver com um salário-mínimo; 1 participante (14,3%) com renda de um salário-mínimo e meio e 1 participante (14,3%) com mais do que dois salários-mínimos. Desse modo, constata-se que uma maior concentração de discentes vivendo em famílias com renda de um salário-mínimo por indivíduo.

Os aspectos das deficiências (sejam físicas, intelectuais e/ou cognitivas) também foram investigadas neste estudo e são apresentadas no Gráfico 4, abaixo.

Gráfico 4 – gráfico referente à disposição dos discentes quanto a algum tipo de deficiência.

Você possui alguma deficiência?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

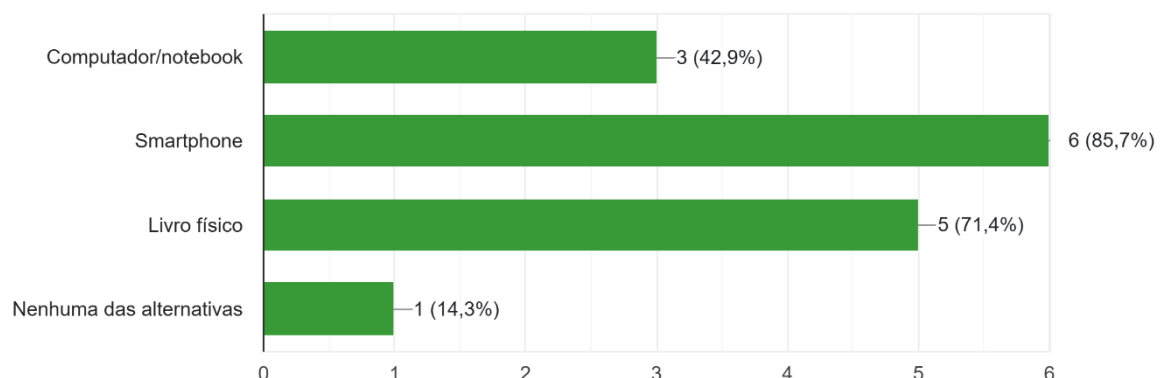
O Gráfico 4, ilustra que 6 discentes participantes (85,7%) declaram não possuir nenhuma deficiência; 1 dos discentes participantes (14,3%) expôs possuir deficiência intelectual/cognitiva.

Foi solicitado aos discentes participantes da pesquisa que expusessem a disposição das ferramentas que dispunham para estudar em suas respectivas residências, os resultados obtidos desta solicitação encontram-se no Gráfico 5.

Gráfico 5 – disposição de ferramentas utilizadas pelos discentes participantes para estudos em suas respectivas residências.

Em sua residência, você dispõe de quais equipamentos para estudar

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Os dados expostos no Gráfico 5 denotam que, das opções disponibilizadas pelo pesquisador, 3 dos participantes (42,9%) informaram que utilizam computador (do tipo

desktop) ou *notebook* para estudarem em casa; 6 dos participantes (85,7%) informaram que, em casa, utilizam o *smartphone* como ferramenta utilizada no estudo; 5 participantes (71,4%) informam que utilizam o livro físico como ferramenta para estudos em casa; apenas 1 participante (14,3%) informou que não dispõe de nenhuma das alternativas como ferramenta utilizada para estudo em seu domicílio.

O Quadro 2 se refere as respostas obtidas para a seguinte pergunta: *Você considera que a Química, mais especificamente conteúdos que abordem a Química Computacional, é uma disciplina importante para sua formação acadêmica? Justifique.*

Quadro 2 – Respostas dos discentes referente a pergunta sobre o impacto da Química Computacional na formação acadêmica

Participante 1	Sim, ao utilizar métodos computacionais para simular e prever o comportamento de moléculas e sistemas químicos, é possível economizar tempo e recursos, além de aprofundar o conhecimento sobre reações e estruturas em nível atômico, o que pode ser difícil ou até impossível de observar diretamente em laboratório.
Participante 2	Sim, para facilitar nossas pesquisas, estudos.
Participante 3	Sim, pois facilita o processo para os alunos que carecem de experimentação em laboratório.
Participante 4	sim, porque facilita o entendimento da parte de computação e poupa reagentes em laboratório e fora q e o novo método de ensino.
Participante 5	Sim, muito importante para abranger nosso conhecimento acadêmico
Participante 6	Sim. Já tive contato com alguns professores que trabalhavam com Química Computacional e vi que pode ser algo bastante prático e mais rápido, por não precisar estar em um laboratório.
Participante 7	Sim, considero a Química Computacional essencial para minha formação, pois integra conceitos químicos com programação, permitindo modelar reações e prever fenômenos moleculares

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

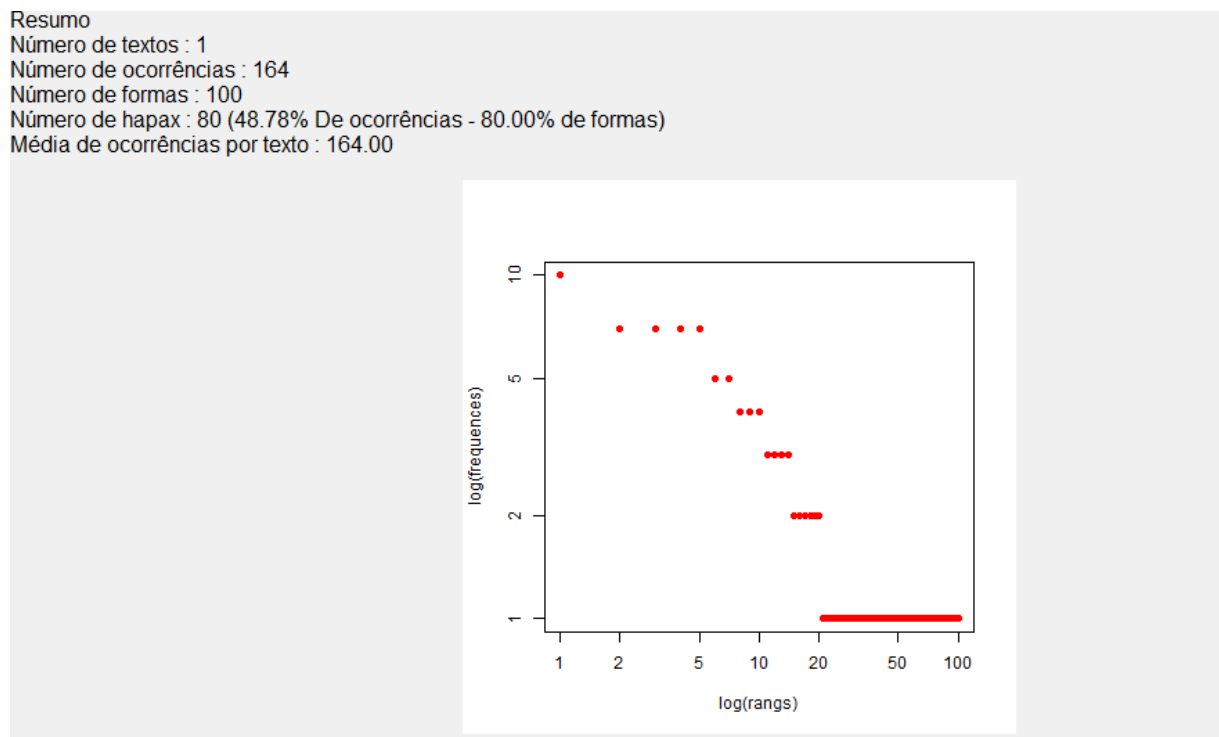
Mediante ao que foi exposto pelos discentes participantes podemos analisar que, em suas respostas, um dos principais pontos a ser destacado pelos indivíduos é a capacidade da Química Computacional de economia de tempo e recursos, especialmente de simular moléculas e sistemas químicos; tal recurso, na fala dos indivíduos participantes é mais eficiente do que realizar experimentos laboratoriais, podemos ver isto na fala do Participante 1: “[...] economizar tempo e recursos”. Podemos perceber ainda, que a Química Computacional é uma ferramenta que facilita o processo de ensino (Participante 3), especialmente para aqueles discentes que apresentam dificuldade no processo empírico ou que não tem acesso fácil ao ambiente do laboratório.

Ainda de acordo com os discentes, podemos perceber que o uso da Química Computacional aparece como uma nova metodologia de ensino (Participante 4) que conecta tecnologias de computação e conceitos químicos, dinamizando o processo de ensino. Para alguns participantes o uso da ferramenta pode ser uma aliada no aprofundamento de conhecimentos que seriam difíceis apenas com experimentos, pois necessitam de uma alta dose de conteúdo teórico (Participante 1) e ainda, fora destacado os possíveis avanços de pesquisa e compreensão científica com a utilização da ferramenta computacional.

Ao realizarmos uma análise das respostas dos participantes deste trabalho no *software* IRAMUTEQ, notamos que o número de hápax⁹ (Gráfico 6) possui um valor de 48,78%, denotando um texto heterogêneo; todavia este elevado valor se deve a utilização de termos conectivos da norma da Língua Portuguesa identificada pelo *software* que leva em consideração os termos que mais se repetem.

⁹Número de palavras que aparecem apenas uma vez no decorrer no texto (SALVATI, 2017).

Gráfico 6 – análise textual feita no software IRAMUTEQ em busca de termos repetitivos para a formação da nuvem de palavras.

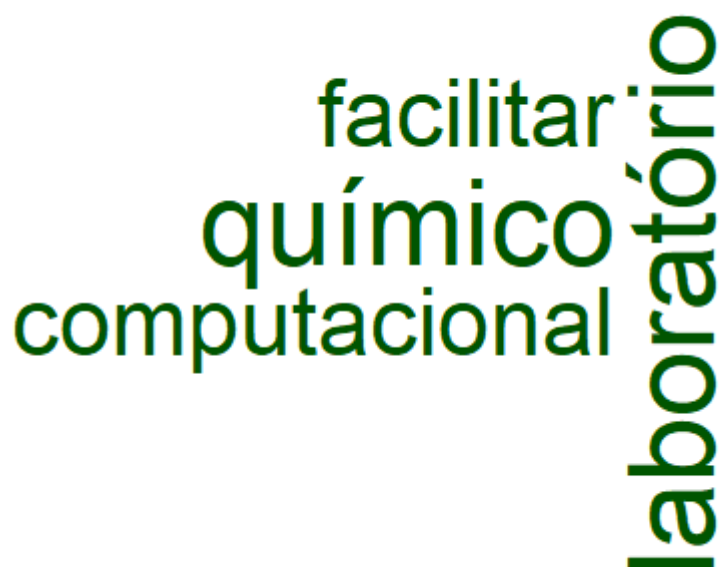


Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Ao analisarmos o Gráfico 6, podemos perceber pela legenda no canto superior esquerdo que, no número total de ocorrências (palavras) há 164; destas o *software* realizou uma análise para saber quais palavras mais se repetiam para que as respostas contidas no Quadro 2 pudessem resultar em uma nuvem de palavra com aquelas mais importantes no escopo das respostas dos discentes participantes deste trabalho.

A Figura 2, é uma nuvem de palavras criada pelo *software* IRAMUTEQ, mediante a uma análise das palavras que mais apareceram nas respostas fornecidas pelos discentes participantes desta pesquisa.

Figura 2 – Nuvem de palavras denotando os termos que repetitivos nas



respostas fornecidas pelos discentes

Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 3, descreve as respostas dos discentes referentes a pergunta: *Você acredita que poderá utilizar a Química Computacional e suas ferramentas em algum momento durante sua vida profissional/acadêmica? Justifique.*

Quadro 3 – respostas dos discentes quanto ao impacto Química Computacional em sua atuação profissional.

Participante 1	Sim, acredito que a Química Computacional e suas ferramentas poderão ser extremamente úteis em minha vida profissional e acadêmica, especialmente se eu estiver envolvido em áreas de pesquisa ou desenvolvimento tecnológico.
Participante 2	Sim, para analisar e compreender interações moleculares complexas.
Participante 3	Sim, para aumentar o aproveitamento dos alunos e estudantes.
Participante 4	Sim, para estudar melhor
Participante 5	Com certeza a química computacional servirá no nosso processo e fora da faculdade.

Participante 6	Sim. Já tive muita curiosidade de ver como funciona, me pareceu interessante, algo que eu gostaria de ver com calma no futuro.
Participante 7	Sim, acredito que poderei utilizar a Química Computacional em minha trajetória acadêmica e profissional. Suas ferramentas permitem modelar reações, prever propriedades de moléculas e otimizar processos químicos, o que pode ser aplicado tanto na pesquisa científica quanto no ensino.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

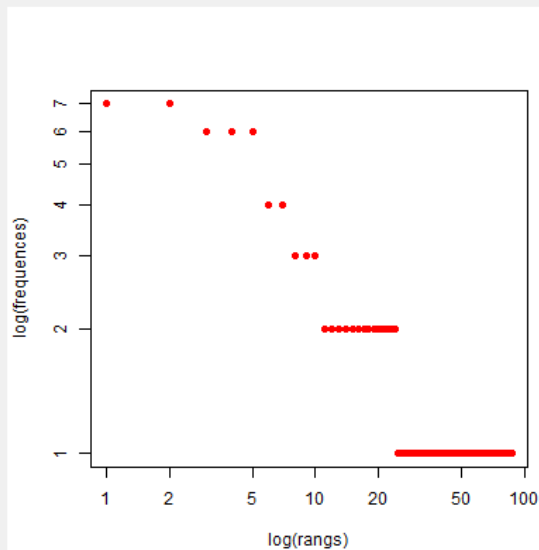
Por meio do que foi exposto pelos discentes em suas respostas, podemos analisar o impacto da Química Computacional na carreira profissional deles. A maioria dos participantes vê a utilização da Química Computacional como uma ferramenta útil especialmente em pesquisas e desenvolvimento tecnológico (Participante 1), ainda, segundo os participantes da pesquisa a Química Computacional pode otimizar os processos em diversas áreas profissionais (Participante 2) como pesquisas científicas e pesquisas voltadas para a área de ensino.

Vale a pena ressaltar que os discentes participantes reforçam a menção da utilização da Química Computacional como uma importante ferramenta educacional que pode proporcionar o entendimento de processos químicos complexos (Participante 3 e Participante 4); vemos também que a ferramenta possui uma aparente versatilidade e impacto no mercado de trabalho pois a menção de que a Química Computacional é útil “dentro e fora da faculdade” (Participante 5) sugere a relevância da ferramenta além do ambiente acadêmico.

Quando analisamos o Gráfico 7, podemos perceber que houve uma redução em seu número de hápax (45%), significando assim uma coesão maior entre as respostas dadas pelos discentes participantes. Entretanto, mesmo que as respostas estejam mais coesas, o programa não conseguiu gerar uma nuvem de palavras satisfatórias pois, poucos foram os termos repetidos para esse fim.

Gráfico 7 - análise feita pelo *software* IRAMUTEQ das respostas dos discentes mediante a pergunta sobre o impacto profissional da ferramenta computacional.

Resumo
 Número de textos : 1
 Número de ocorrências : 140
 Número de formas : 87
 Número de hapax : 63 (45.00% De ocorrências - 72.41% de formas)
 Média de ocorrências por texto : 140.00



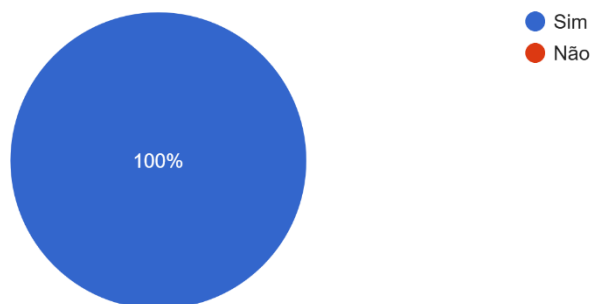
Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Gráfico 8 se refere a dificuldade sentida pelos discentes durante algum momento de sua vida acadêmica (seja nos anos finais do Ensino Fundamental ou no Ensino Médio) na disciplina de Química.

Gráfico 8 – gráfico referente a dificuldade em Química no decorrer da vida acadêmica.

Você já sentiu dificuldades em compreender algum assunto da disciplina de Química em algum momento da sua vida?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos o Gráfico 8, podemos perceber que dos discentes participantes da pesquisa 100% (totalizando 7 alunos) sentiram dificuldade em aprender algum conteúdo de Química no decorrer de sua vida acadêmica.

O Quadro 4 contém as respostas dos participantes quando indagados sobre os motivos que dificultam o processo de aprendizagem em Química. Tais respostas se referem a seguinte pergunta: *Cite abaixo atores que você julgaria como elementos que dificultam o processo de aprendizado em Química.*

Quadro 4 – respostas dos discentes sobre os fatores que dificultam seu aprendizado em Química.

Participante 1	Falta de compreensão dos conceitos fundamentais, matemática, problemas de abstração e visualização
Participante 2	Matemática envolvida
Participante 3	O excesso de teoria e a falta de práticas laboratoriais para melhor fixação.
Participante 4	linguagem técnica e conteúdos rápidos
Participante 5	Química quântica
Participante 6	Linguagem muito técnica, e um avanço um pouco acelerado pra assuntos bastante complexos

Participante 7	Limitações práticas, linguagem técnica
-----------------------	--

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas dos discentes quanto aos fatores que os levam a sentir dificuldades no aprendizado da ciência Química percebemos que vários são os pontos abordados pelos participantes. Tais dificuldades podem ser agrupadas em algumas áreas principais como:

- 1) Dificuldades conceituais e de abstração:
 - Falta de compreensão dos conceitos chaves e problemas com a capacidade de abstração e de visualização (Participante 1);
 - Dificuldades relacionadas com Química Quântica (Participante 5).
- 2) Desafios matemáticos:
 - O processo interdisciplinar que envolve a Matemática e a Química (Participante 1 e Participante 2);
- 3) Falta de experiências práticas e de laboratório:
 - Excesso de teoria e falta de práticas laboratoriais para a fixação dos conteúdos abordados (Participante 3);
 - Problema quanto as limitações práticas (Participante 7);
- 4) Dificuldade com a linguagem técnica utilizada e o ritmo acelerado no processo de ensino
 - Linguagem muito técnica (Participante 4, Participante 6 e Participante 7);
 - Conteúdos rápidos e avanço rápido de conteúdos complexos (Participante 4 e Participante 6).

Essa variedade de dificuldades apresentadas pelos discentes sugere a necessidade de um ensino de Química mais adaptado ao nível de compreensão dos alunos corroborando com o trabalho de diversos pesquisadores (MARCONTES *et. al.*, 2018); (FIGUEREDO & RODRIGUES, 2014); (GALLIAZI, 2003); (CHASSOT, 1990).

O Quadro 5 abaixo contém as respostas dos discentes referente ao seguinte questionamento: *Considerando que a Química é uma ciência que se preocupa em estudar as interações moleculares, você acredita que conteúdos de Mecânica*

Quântica aplicados à esta ciência na sua formação podem facilitar ou prejudicar no processo de aprendizagem? Justifique.

Quadro 5 – resposta dos participantes sobre a utilização de conceitos da mecânica quântica aplicada a Química no processo de facilitar o processo de aprendizagem.

Participante 1	Falta de compreensão dos conceitos fundamentais, matemática, problemas de abstração e visualização
Participante 2	Matemática envolvida
Participante 3	O excesso de teoria e a falta de práticas laboratoriais para melhor fixação.
Participante 4	linguagem técnica e conteúdos rápidos
Participante 5	Química quântica
Participante 6	Linguagem muito técnica, e um avanço um pouco acelerado pra assuntos bastante complexos
Participante 7	Limitações práticas, linguagem técnica

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas dos participantes podemos perceber que eles denotam os potenciais benefícios advindos do aprendizado de conteúdos pertinentes a mecânica quântica no ensino de Química, contudo, eles também destacam desafios importantes relacionados à sua complexidade e forma de ensino.

Na percepção dos discentes um dos benefícios da Mecânica Quântica no ensino de Química se deve a explicar as interações atômicas e moleculares, ligações químicas e reatividade química (Participante 2, Participante 6 e Participante 7). Pois, no entendimento dos participantes, quando bem integrada ao ensino de Química, a mecânica quântica pode enriquecer o entendimento de processos moleculares (Participante 1).

Quanto aos desafios presentes no processo os discentes destacam os seguintes aspectos:

- Complexidade matemática: na utilização de conteúdos pertinentes à mecânica quântica existem componentes matemáticos que podem ser de difícil entendimento caso não sejam explicados de maneira acessível

e contextualizada (Participante 7 e Participante 1);

- Necessidade de um ensino gradual: para que o ensino seja eficaz, a abordagem dos conteúdos precisa ser gradual e focada nas aplicações práticas dentro da ciência Química, do contrário, e tratado de maneira isolada poderá se tornar um obstáculo para os discentes;
- Dependência de perfil individual: pontos importantes a serem destacados, pois é necessário, na visão dos alunos participantes desta pesquisa, o sucesso do ensino depende da facilidade individual que cada aluno terá com os conceitos mais abstratos e matemáticos pertinentes aos conceitos relacionados à mecânica quântica no ensino de Química.

De maneira geral, a Mecânica Quântica, com base nas respostas dadas pelos participantes desta pesquisa, tem um grande potencial para facilitar o aprendizado de Química, desde que seja ensinada de maneira acessível, com a devida ênfase dada em suas aplicações práticas e, para não sobrecarregar os discentes com conceitos excessivamente complexos desde o início.

Ao analisarmos o Gráfico 9, podemos notar que houve uma redução significativa no número de hápax, 38,12%, o que denota, cada vez mais um discurso homogêneo por parte dos discentes participantes.

Gráfico 9 – análise feita no IRAMUTEQ sobre a utilização de conceitos de mecânica quântica no ensino de Química.

Resumo

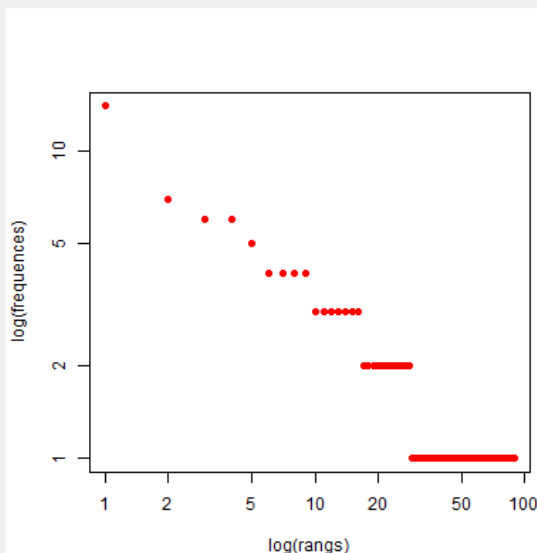
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 160

Número de formas : 89

Número de hapax : 61 (38.12% De ocorrências - 68.54% de formas)

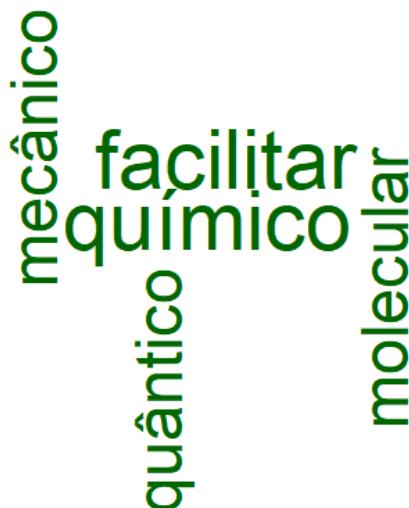
Média de ocorrências por texto : 160.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Com base nos resultados obtidos na análise das respostas foi possível realizar a confecção de uma nuvem de palavras com aqueles termos que mais se destacaram no discurso dos participantes da pesquisa. A Figura 3, ilustra que os termos mais repetitivos pelos discentes ao serem questionados sobre o aprendizado de conceitos pertinentes à mecânica quântica e sua aplicação em Química, entretanto uma que se destaca é: *facilitar*.

Figura 3 – nuvem de palavras sobre os termos que se destacaram nas respostas dos discentes.



Fonte: IRAMUTEQ (2024)

O Quadro 6, se refere às respostas dadas pelos discentes participantes deste trabalho quando questionados sobre a utilização da matemática em problemas relacionados à Química, de maneira contextualizada, sob a forma da seguinte pergunta: *Você acredita que é possível realizar a modelagem matemática (processo de formalizar um problema do mundo real em uma expressão matemática) para calcular a espontaneidade de reações químicas, validando assim os mecanismos propostos? Justifique.*

Quadro 6 – resposta dos participantes da pesquisa quando questionados sobre a modelagem matemática aplicada a problemas químicos.

Participante 1	Sim, acredito que é possível realizar a modelagem matemática para calcular a espontaneidade de reações químicas e, a partir disso, validar os mecanismos propostos. Isso é possível por meio do uso de conceitos termodinâmicos e cinéticos, que são frequentemente aplicados para entender e prever o comportamento das reações químicas
Participante 2	Sim, para validar mecanismos de reações

Participante 3	Sim, pois a matemática é diversificada e pode complementar qualquer matéria e existem alunos com mais facilidades nessa área.
Participante 4	Sim, validar mecanismos compostos e formalizar reações e expressões matemáticas
Participante 5	Acho que trazer coisas da realidade para a aprendizagem é ótimo
Participante 6	Sim. Pois vários princípios já bem estabelecidos, na química e em outras áreas, são fundamentados a partir da matemática.
Participante 7	Sim, é possível realizar a modelagem matemática para calcular a espontaneidade de reações químicas e validar mecanismos propostos.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas obtidas pelos discentes, podemos perceber que eles acreditam que a modelagem matemática desempenha um papel fundamental na compreensão e validação em processos químicos, principalmente aquele ao qual foi direcionado a pergunta: espontaneidade de reações. O uso de tal artifício pode ser usado para calcular a espontaneidade das reações químicas e a validação de mecanismos propostos teoricamente (Participante 1 e Participante 7) com conceitos termodinâmicos e cinéticos pertinentes às reações químicas.

Para alguns discentes (Participante 2 e Participante 4) a matemática é uma ferramenta que, além de ajudar, pode ser utilizada para validar os mecanismos de reações químicas, tal artifício pode ser essencial para entender como as reações químicas ocorrem a nível molecular. A utilização da modelagem matemática pôde ser vista como ferramenta útil para complementar o estudo da química no viés de explicar fenômenos de natureza Química e validar hipóteses (Participante 3), além de trazer uma conexão com a realidade, tornar o aprendizado mais interessante e relevante para os discentes (Participante 5).

Quando analisamos o Gráfico 10, notamos mais uma redução no número de hápax (32,19%), denotando cada vez mais um discurso homogêneo por parte dos discentes participantes, isso denota a coerência entre as ideias de cada indivíduo sobre o questionamento quanto ao uso da modelagem matemática. Tal

homogeneidade discursiva poderá ser representada visualmente na nuvem de palavras (Figura 4).

Gráfico 10 – resultado da análise feita no IRAMUTEQ sobre a utilização da modelagem matemática como ferramenta no ensino de Química.

Resumo

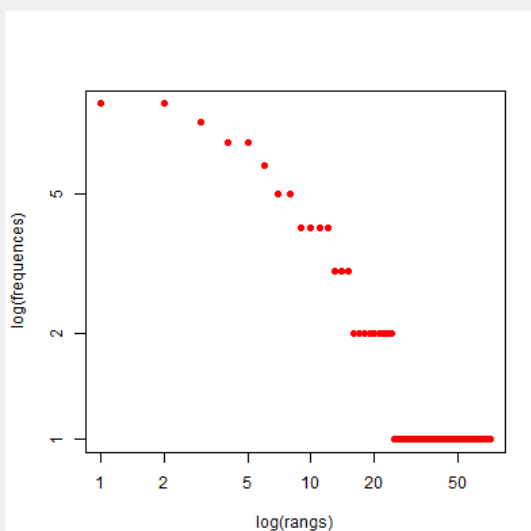
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 146

Número de formas : 71

Número de hapax : 47 (32.19% De ocorrências - 66.20% de formas)

Média de ocorrências por texto : 146.00

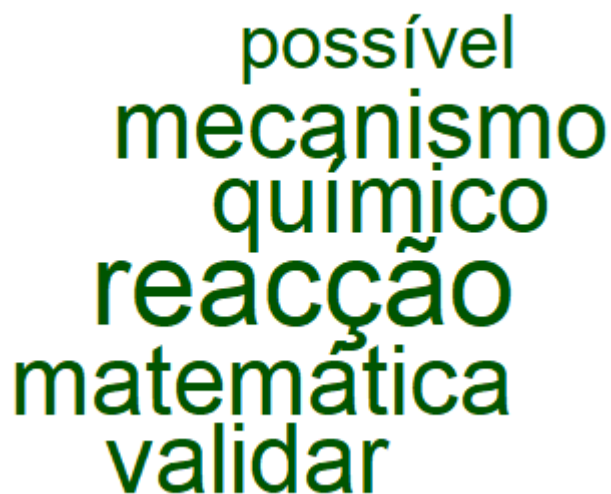


Fonte: IRAMUTEQ (2024)

Com base nas respostas obtidas pelos participantes desta pesquisa, pudemos perceber que os termos mais aparentes em seus discursos a palavra *validar*, presente na Figura 4, é um dos termos que mais aparece, isso denota que, para a população

na qual esta pesquisa foi realizada a utilização da modelagem matemática é uma ferramenta a ser utilizada no ensino de Química.

Figura 4 – nuvem de palavras feita pelo IRAMUTEQ com base nas respostas dos discentes participantes desta pesquisa quando perguntados sobre a modelagem matemática.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 7 contém as respostas dos discentes quanto a utilização de métodos computacionais e sua implicação no processo de ensino e aprendizagem em Química. A pergunta foi realizada da seguinte maneira: *Na sua opinião, simulações computacionais podem facilitar seu processo de aprendizagem quanto aos conteúdos de Química estudados no seu curso? Justifique.*

Quadro 7 – respostas dos discentes quanto a utilização de métodos computacionais no ensino de Química.

Participante 1	Sim, as simulações computacionais oferecem uma forma prática, visual e interativa de aprender Química, permitindo que nós alunos exploremos conceitos complexos de maneira acessível e engajante.
Participante 2	Sim, ajudam na resolução dos processos
Participante 3	Sim.
Participante 4	Sim, simulações controladas e sem perigos

Participante 5	Sim. É uma forma diferente de aprender o conteúdo
Participante 6	Sim. Pois é possível visualizar ligações químicas, ou até mesmo fazer experimentos em laboratórios virtuais, o que acaba facilitando a visualização e o entendimento da química.
Participante 7	Sim, simulações computacionais podem facilitar meu aprendizado, pois permitem visualizar fenômenos abstratos, como interações moleculares e mecanismos de reação, de forma interativa.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Quando questionados sobre o uso de computadores no processo de ensino em Química por meio de simulações, os participantes desta pesquisa se mostraram favoráveis à sua utilização destacando as várias vantagens desse recurso, como a visualização e a facilidade de interação. Tais simulações computacionais permitem a visualização de fenômenos que seriam difíceis de compreender de outra forma, como as interações intermoleculares existentes em uma ligação química (Participante 6 e Participante 7). Os discentes ainda denotaram a possibilidade de explorar os conceitos de maneira interativa tornando o aprendizado dinâmico e envolvente o que pode melhorar o processo de absorção de conteúdo (Participante 1).

Outra vantagem apontada pelos indivíduos é a segurança presente nas simulações, permitindo realizar experimentos sem riscos associados a um laboratório físico, tornando o processo de aprendizagem seguro e acessível (Participante 4). Outro ponto destacado pelos discentes é a abordagem diferenciada advinda pelo uso das simulações computacionais, oferecendo uma forma diferente de aprender, saindo do ensino tradicional e promovendo um aprendizado prático e visual (Participante 5 e Participante 6). Houve ainda, por parte dos indivíduos participantes da pesquisa, a acessibilidade e exploração que veio por meio das simulações. Segundo eles, as simulações tornam conceitos difíceis mais acessíveis, permitindo os discentes explorarem temas complexos como mecanismos de reações e processos moleculares de forma prática e sem a necessidade de recursos físicos (Participante 1 e Participante 7).

Para esta pergunta, ao ter sido realizado a inserção dos dados no *software* IRAMUTEQ o programa não considerou aquelas respostas mais superficiais, de modo

que o número de hápax (43,64%) observado no Gráfico 11 deu um valor acima do esperado, mesmo com a homogeneidade das respostas dos participantes. Desse modo para esta pergunta, que fecha as perguntas referentes à primeira seção, não foi possível realizar uma nuvem de palavras.

Gráfico 11 – número de hápax relativamente alto devido a as respostas cedidas pelos participantes não serem justificadas.

Resumo

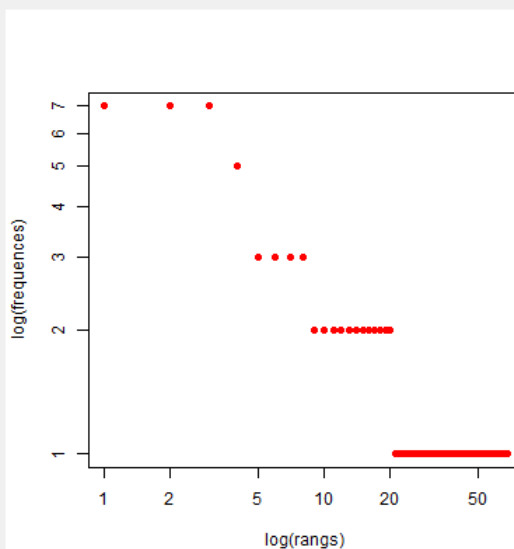
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 110

Número de formas : 68

Número de hapax : 48 (43.64% De ocorrências - 70.59% de formas)

Média de ocorrências por texto : 110.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024)

4.2 Quanto aos aspectos referentes ao conhecimento individual em Química

O Quadro 8 se refere a primeira pergunta da segunda seção de perguntas, de modo que o foco é mensurar as percepções dos discentes sobre a utilização de métodos computacionais operantes junto a Teoria Funcional da Densidade e que auxiliam pesquisadores a propor estratégias de pesquisa/ensino. As respostas obtidas foram a respeito da noção individual dos discentes sobre conteúdos específicos de Química no ensino superior. A pergunta em questão foi: *Você possui alguma noção sobre os seguintes conteúdos da ciência Química: mecanismos de reação orgânica; cálculo de propriedades termodinâmicas de gases; estrutura de campo ligante; espectroscopia de análise? Se sim, justifique em qual (is) conteúdos você apresentou dificuldades de aprendizado.*

Quadro 8 – respostas dos participantes quanto a perguntas relacionadas sobre assuntos específicos sobre a Química do ensino superior e as dificuldades relacionadas a seu aprendizado.

Participante 1	Espectroscopia de análise: a interpretação de espectros, especialmente para compostos complexos. Por exemplo, na espectroscopia de RMN.
Participante 2	Não muito pois, estou no primeiro semestre.
Participante 3	Não me foi estudado ainda até então.
Participante 4	não tive essas disciplinas ainda
Participante 5	Ainda não.
Participante 6	Sim. Cálculo de propriedades termodinâmicas.
Participante 7	Sim. Estrutura de campo ligante, espectroscopia de análise e mecanismos de reação orgânica

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as repostas fornecidas pelos discentes, percebemos a diversidade de experiências e exposições aos conteúdos de Química. Alguns dos participantes da pesquisa já possuem familiaridade com assuntos de Química abordados no nível superior (Participante 1, Participante 6 e Participante 7). Entretanto, os demais alunos mencionaram que ainda não tiveram acesso aos conteúdos mais aprofundados de Química. Tal divisão sugere que os participantes estão em diferentes estágios de seu aprendizado, mesmo que estejam todos no mesmo semestre.

Para este questionamento, optou-se por não realizar a análise com o IRAMUTEQ, tendo em vista que, pelas respostas fornecidas pelos participantes percebe-se que se trata de discursos completamente heterogêneos, desse modo, o número de hápax seria obviamente elevado se tornando impossível, devido a divergência das repostas a construção de uma nuvem de palavras coerente.

As respostas contidas no Quadro 9 são referentes as percepções dos participantes sobre o empirismo existente na química. A pergunta realizada foi: *Na sua opinião as subáreas que compõem a ciência Química podem ser consideradas*

puramente empíricas, ou seja, dependem exclusivamente de testes laboratoriais? Justifique.

Quadro 9 – resposta dos discentes sobre suas percepções quanto ao empirismo da Química.

Participante 1	Não, na minha opinião, as subáreas da ciência Química não podem ser consideradas puramente empíricas e dependentes exclusivamente de testes laboratoriais. Embora a experimentação seja uma parte fundamental da Química, ela não é a única forma de se obter conhecimento ou de desenvolver soluções na área. As subáreas da Química são, na verdade, uma combinação de abordagens empíricas e teóricas, sendo que muitas delas utilizam modelos, cálculos e simulações para compreender e prever comportamentos químicos sem a necessidade de realização de experimentos físicos.
Participante 2	Não pois a química é muito mais abrangente
Participante 3	Não, porque existe a química teórica que não provém de testes.
Participante 4	Na minha opinião, as subáreas da química não podem ser consideradas puramente empíricas, embora a experimentação e os testes laboratoriais desempenhem um papel fundamental no desenvolvimento e validação de teorias. A química é uma ciência que combina tanto aspectos empíricos quanto teóricos.
Participante 5	Sim, precisam passar por testes
Participante 6	Não. Por exemplo, a própria Química computacional, que utiliza bastante da teoria, e não é necessário estar em um laboratório.
Participante 7	Não, as subáreas da Química não podem ser consideradas puramente empíricas, pois envolvem tanto experimentação quanto teoria.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos os discursos dos participantes desta pesquisa quanto ao processo puramente empírico da química, percebemos que a maioria dos

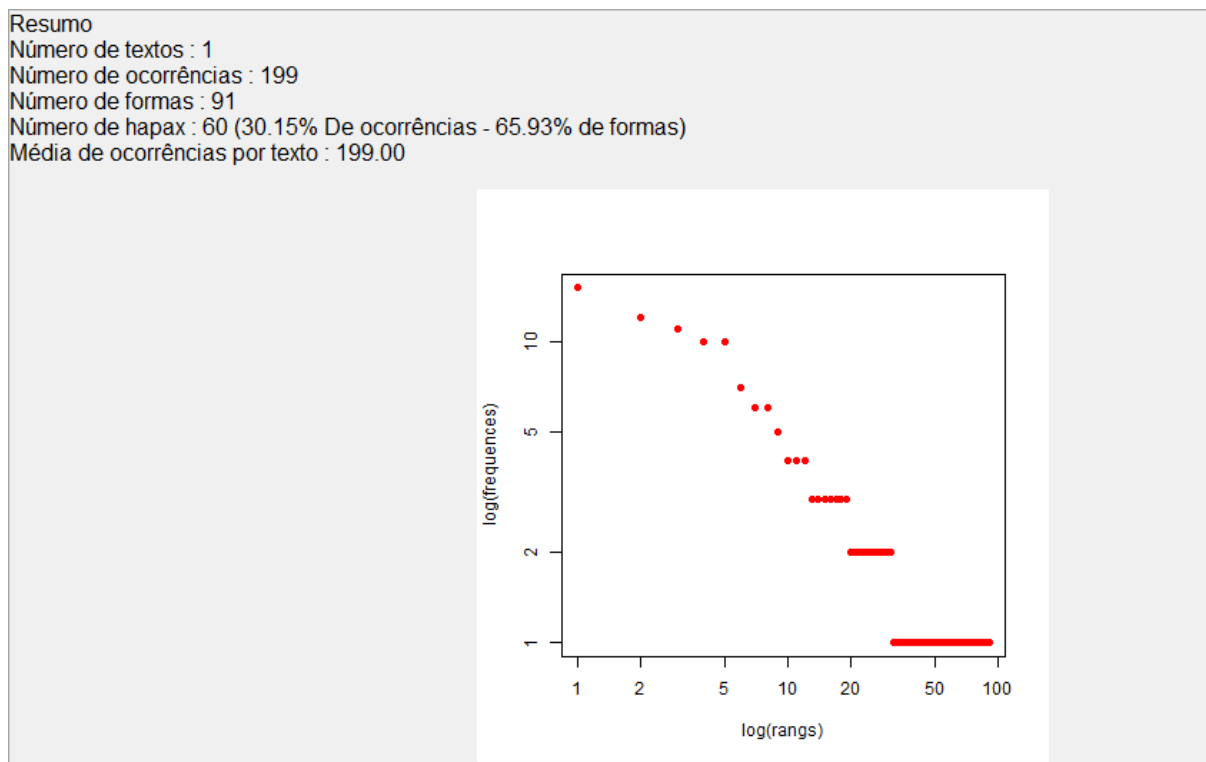
participantes discorda da ideia, destacando que ela envolve tanto a experimentação quanto a teoria. O argumento utilizado pelos discentes (Participante 1, Participante 3, Participante 6 e Participante 7) é que a disciplina de química envolve uma combinação das abordagens teóricas (modelos, cálculos, simulações) e empíricas. Esse ponto destaca a importância que a teoria exerce ao entender fenômenos que não podem ser observados diretamente no laboratório, ou que são difíceis de testar experimentalmente.

Em contrapartida, o restante dos participantes (Participante 2 e Participante 5) estão alinhados a uma visão de que a experimentação é indispensável para a ciência. A fala explicitada pelo Participante 5 em “precisam passar por testes” sugere uma visão mais tradicional que põe a experimentação como principal fonte de conhecimento e comprovação científica.

Todavia, a menção da Química Computacional pelo Participante 6 se mostra relevante, pois traz à tona o impacto das tecnologias modernas e da capacidade de realizar simulações sem necessariamente realizar experimentos físicos. Tal abordagem evidencia o avanço das metodologias científicas que vão além do empirismo tradicional.

Ao realizar a inserção das respostas dadas pelos participantes no IRAMUTEQ, o software revelou que em seu número de hápax (30,15%) foi condizente com os discursos dos participantes (Gráfico 12) que se mostrou bastante homogêneo ao considerar que a ciência química não pode ser definida puramente como empírica.

Gráfico 12 – resumo das ocorrências e do número de hápax quanto ao discurso dos discentes.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Tal redução no número de hápax tornou possível a construção de uma nuvem de palavras (Figura 5) que, de fato, seja coerente com o discurso dos participantes, pois promove termos que intensificam a abordagem teórica e empírica em química.

Figura 5– nuvem de palavras elaborada pelo software que reforça o termo teórico e empírico em química.



Fonte: IRAMUTEQ (2018).

As respostas contidas no Quadro 10 abaixo são referentes à matemática empregada no Ensino Superior nos cursos de Ciências Exatas: Cálculo Diferencial e Integral e como esta linguagem pode interligar aos conteúdos estudados em química além de participarem do processo de previsão de resultados. A pergunta realizada foi: *Comente um pouco sobre sua experiência com a disciplina de Cálculo Diferencial e Integral no curso de Licenciatura em Química, você acredita que os conteúdos de química podem ter suas reações e análises previstas por meio de cálculos matemáticos?*

Quadro 10 – respostas dos participantes quanto ao uso da Matemática do Ensino Superior em química.

Participante 1	Cálculo Diferencial e Integral na Química: O Cálculo Diferencial e Integral é fundamental para a Química, especialmente em áreas como Cinética Química, Termodinâmica e Química Física. Esse conjunto de ferramentas matemáticas permite modelar e entender fenômenos químicos de maneira quantitativa, como as variações de concentração dos reagentes e produtos ao longo do tempo ou as mudanças de energia durante uma reação química.
Participante 2	Não fiz essa disciplina ainda mais os cálculos matemáticos são essenciais para análises de reações
Participante 3	Sim.
Participante 4	Não tive esta disciplina ainda
Participante 5	Tanto a química como os cálculos matemáticos estão ligados
Participante 6	Não fiz.
Participante 7	Não tive essa disciplina ainda, mas acredito que os conteúdos de cálculo diferencial e integral são essenciais para a disciplina de físico-química e entre outras

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

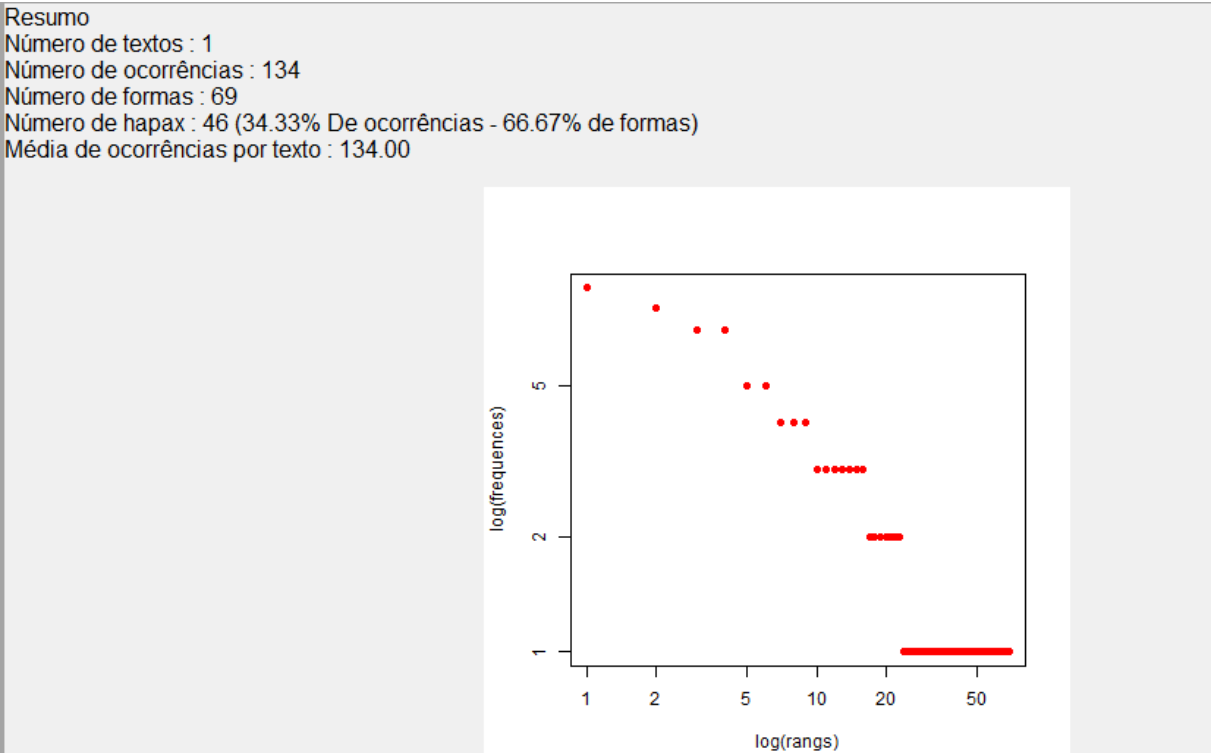
Ao analisarmos as respostas dos participantes, podemos perceber a diversidade de perspectiva existente, especialmente em relação à familiaridade ou não com os conceitos de Cálculo Diferencial e integral aplicado a química. Notamos na fala do Participante 1 uma análise detalhada e bem fundamentada, que destaca

como o Cálculo é essencial em áreas específicas da ciência química, como Cinética química, Termodinâmica e Físico-química. Ele argumenta que ferramentas matemáticas permitem uma modelagem quantitativa dos fenômenos químicos, como mudanças nas concentrações dos reagentes ao longo do tempo e as variações de energia durante uma reação química. Esse tipo de uso do cálculo é comum em muitos ramos da ciência química, onde a precisão dos dados e as previsões quantitativas são cruciais para entender e controlar os processos químicos. O Participante 7 compartilha de uma perspectiva similar ao reconhecer a importância do cálculo em áreas como a Físico-química. Ele sublinha a relevância desses conceitos, mesmo sem ter tido contato com a disciplina ainda, indicando que a ligação entre a química e o cálculo é bastante conhecida por quem estuda a ciência em nível mais avançado.

Alguns participantes (Participante 2, Participante 4, Participante 6 e Participante 7) mencionaram que ainda não tiveram a disciplina ou não estão familiarizados com o cálculo nesse contexto. Isso revela que, em alguns níveis de ensino, o uso do cálculo pode ser visto como algo que ainda está por vir, ou que a conexão entre a química e cálculo pode não ser totalmente evidente para todos os estudantes no início de sua formação. Essa falta de exposição pode dificultar a percepção imediata da importância do cálculo em certas áreas da química.

Embora os participantes possuam discursos divergentes, o número de hápax teve um resultado considerável (34,33%), o que denota uma certa homogeneidade nos discursos como se pode verificar no Gráfico 13, abaixo.

Gráfico 13 – número de hápax referente aos termos sobre o uso do cálculo em química.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

A Figura 6 abaixo, denota os termos mais utilizados pelos discentes ao emitirem suas respostas. A nuvem de palavras foi feita com base nas respostas dos discentes, e pode-se perceber que, os termos referentes ao questionamento são os que mais aparecem.

Figura 6 – os termos mais presentes nos discursos dos discentes sobre a integração entre o cálculo e a química.

possível
mecanismo
químico
reação
matemática
validar

Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 11 contém as respostas dos discentes participantes da pesquisa quando questionados sobre o conteúdo referente a ligações químicas e quais fatores poderiam causá-la. A pergunta feita foi a seguinte: *As reações químicas em geral tratam da movimentação dos elétrons das espécies envolvidas para a formação de novos compostos de interesse científico. Comente um pouco sobre os fatores que podem causar a possível migração eletrônica de uma espécie química para outra.*

Quadro 11 – resposta dos discentes quando questionados sobre as ligações químicas e suas causas.

Participante 1	Diferença de Energia de Ionização e Afinidade Eletrônica Presença de Catalisadores: Catalisadores são substâncias que aceleram as reações químicas, facilitando a migração de elétrons entre as espécies reagentes. Os catalisadores podem atuar de diversas formas, como criando um caminho alternativo de menor energia para a reação ou fornecendo locais de interação mais eficientes, o que diminui a energia de ativação e facilita a transferência de elétrons.
-----------------------	--

Participante 2	Essa movimentação é a base para a formação e quebra das ligações químicas
Participante 3	Transferências de energia presentes nos orbitais.
Participante 4	A migração eletrônica em reações químicas é influenciada por: Eletronegatividade: Elétrons migram para átomos mais eletronegativos. Afinidade eletrônica: Espécies com alta afinidade capturam elétrons mais facilmente. Potencial de ionização: Baixa energia de remoção facilita a doação de elétrons. Estado de oxidação: Estados elevados atraem elétrons, enquanto baixos os doam. Polaridade molecular: Dipolos direcionam a densidade eletrônica. Campos elétricos externos: Influenciam a distribuição eletrônica. Interações intermoleculares: Modulam a capacidade de doar/receber elétrons. Energia de ativação: Temperatura, pressão e catalisadores facilitam a transferência. Delocalização eletrônica: Estabiliza estruturas e promove a migração. Esses fatores determinam a viabilidade e a direção das transferências eletrônicas.
Participante 5	A migração eletrônica entre espécies químicas ocorre quando há transferência de elétrons de uma molécula para outra
Participante 6	A estabilidade de um elemento com uma quantidade X de elétrons.
Participante 7	diferença de eletronegatividade, afinidade eletrônica e energia de ionização

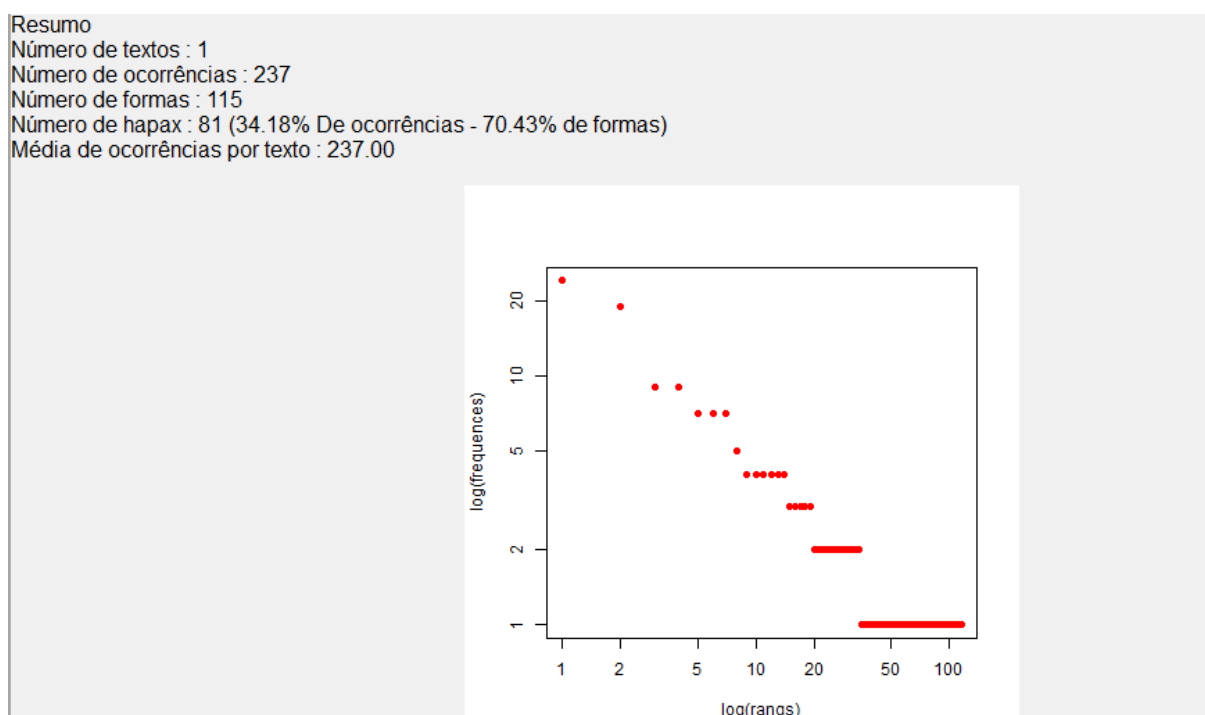
Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos o discurso dos participantes quanto ao questionamento feito percebe-se que há um entendimento aprofundado das condições e fatores que influenciam a transferência de elétrons entre átomos e moléculas. O Participante 4 oferece uma visão largamente abrangente, listando uma série de fatores que afetam a migração eletrônica como, por exemplo, eletronegatividade, afinidade eletrônica, potencial de ionização, estado de oxidação, polaridade, campos elétricos externos; a explicação oferecida, detalha como diferentes propriedades atômicas e moleculares afetam a forma como os elétrons se movem entre as espécies químicas, e como essas transferências influenciam as reações químicas.

O discurso existente nas respostas dos discentes revela um entendimento bastante robusto sobre como a migração de elétrons e as ligações químicas se conectam. A transferência de elétrons, influenciada por diversos fatores como eletronegatividade, afinidade eletrônica e o uso de catalisadores (Participante 1) é essencial para a formação de ligações químicas e a ocorrência dessas ligações. Ademais, a estabilidade das espécies químicas e os efeitos da energia de ativação, estado de oxidação e interações intermoleculares são fatores determinantes para a viabilidade e direção das reações.

Mesmo com todo o conhecimento sobre as ligações químicas e suas ocorrências, quando as respostas foram anexadas ao IRAMUTEQ o número de hápax (Gráfico 14) deu relativamente alto (34,18%), mesmo que o discurso tenha sido homogêneo no processo de conhecimento dos discentes participantes.

Gráfico 14 – número do hápax acerca da pergunta realizada sobre ligações químicas.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Ainda com os dados do programa, foi possível realizar a produção de uma nuvem de palavras, denotando quais os termos mais utilizados pelos participantes na construção de suas respostas. A nuvem de palavras, explicitada na Figura 7 contém

os termos a mais utilizados, o que denota um profundo conhecimento dos discentes participantes.

Figura 7 – nuvem de palavra com os termos referentes à ligação química mais utilizado pelos participantes da pesquisa.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 12 se refere ao conhecimento dos discentes sobre os conteúdos referentes à mecânica, em especial como ferramenta intermediária utilizada para compreensão de conteúdos voltados para a compreensão do conhecimento químico. A pergunta realizada foi: *A Mecânica Quântica descreve, matematicamente, o comportamento do mundo quântico. Comente um pouco sobre seus conhecimentos sobre esta área. Na sua opinião, você acredita que possa haver uma relação entre a Mecânica Quântica e a ciência Química para facilitar os processos que descrevem esta segunda ciência?*

Quadro 12 – conhecimento dos discentes sobre a aplicação da mecânica quântica para o ensino de química.

Participante 1	A Mecânica Quântica não só tem uma relação fundamental com a Química, mas também facilita enormemente a compreensão e a previsão de muitos fenômenos químicos. Por meio da descrição do comportamento dos elétrons em átomos e moléculas, a Mecânica Quântica fornece a base teórica necessária para entender as propriedades químicas e físicas das substâncias.
-----------------------	---

Participante 2	Sim, na minha opinião facilitam muito.
Participante 3	Sim
Participante 4	Não tenho muita noção sobre o assunto.
Participante 5	A Mecânica Quântica é fundamental para entender o comportamento das partículas subatômicas e sua interação. Sua aplicação na Química é crucial para explicar fenômenos químicos.
Participante 6	Sim. Afinal algumas teorias químicas, como o próprio modelo atômico, precisaram de um pouco de Mecânica Quântica para serem formulados.
Participante 7	A Mecânica Quântica explica o comportamento das partículas subatômicas e é essencial para entender as interações moleculares. A Química Quântica aplica esses conceitos para estudar reações e prever propriedades químicas com mais precisão

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Com as respostas obtidas pelos discentes participantes desta pesquisa, podemos perceber a importância dessa área da física (Mecânica Quântica, MQ) para a compreensão profunda dos fenômenos químicos, e como ela é essencial para a construção dos modelos que permitem explicar o comportamento do mundo atômico. Na fala do Participante 1, podemos perceber o papel crucial da MQ na química, pois o indivíduo explica sua importância em descrever o comportamento dos elétrons em átomos e moléculas. Em concordância com essa fala, o Participante 7 complementa, destacando que a Química Quântica aplica os conceitos da MQ para estudar as reações químicas e realizar previsões de propriedades químicas com mais precisão.

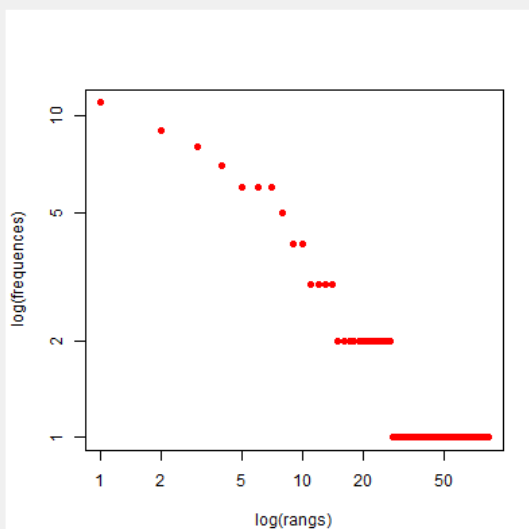
Participantes 2 e Participante 3 afirmam que a MQ facilita muito a compreensão dos fenômenos químicos. Essa opinião reflete um reconhecimento de que os conceitos da MQ tornam mais fácil entender fenômenos complexos, como a formação de ligações covalentes e a teoria das orbitais moleculares, ao invés de depender apenas de modelos clássicos. O Participante 6 reforça a ideia de que várias teorias químicas modernas, como o modelo atômico, não seriam possíveis sem a contribuição da MQ; em contrapartida, o Participante 4 menciona que “não tem muita noção sobre o assunto”, o que é compreensível, considerando que a MQ é uma área complexa e

requer conhecimento sólido de Física e Matemática. Esta falta de noção revela um desafio no ensino de química: a necessidade de tornar conceitos quânticos acessíveis aos estudantes, sem perder a profundidade e a precisão que eles oferecem para entender fenômenos químicos.

O discurso dos discentes deixa claro que a MQ desempenha um papel fundamental na formação do conhecimento químico e é essencial para a explicação de fenômenos químicos a um nível profundo. Embora haja um reconhecimento generalizado de sua importância, a compreensão desse conteúdo pode ser desafiadora para estudantes; ao introduzirmos as respostas no programa IRAMUTEQ, percebemos que o número de hápax (35,00%) tem seu valor condizente com um discurso homogêneo como verificado no Gráfico 15, abaixo.

Gráfico 15 – número de hápax referente ao discurso sobre a MQ aplicada ao entendimento de fenômenos químicos.

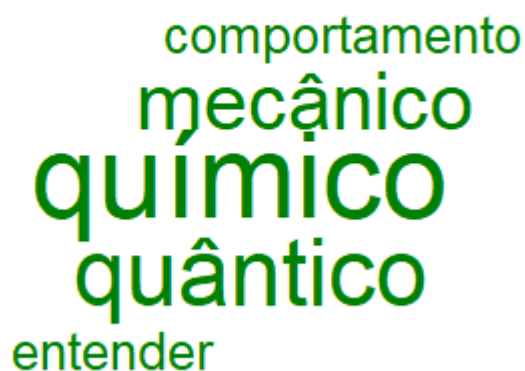
Resumo
 Número de textos : 1
 Número de ocorrências : 160
 Número de formas : 83
 Número de hapax : 56 (35.00% De ocorrências - 67.47% de formas)
 Média de ocorrências por texto : 160.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

A nuvem de palavras, Figura 8, denota que os termos mais utilizados pelos participantes da pesquisa, dizem a respeito da utilização da MQ para a compreensão do conhecimento químico.

Figura 8 – referente aos termos mais utilizados pelos participantes, denotando a MQ como ferramenta para compreensão do comportamento quântico de fenômenos químicos.



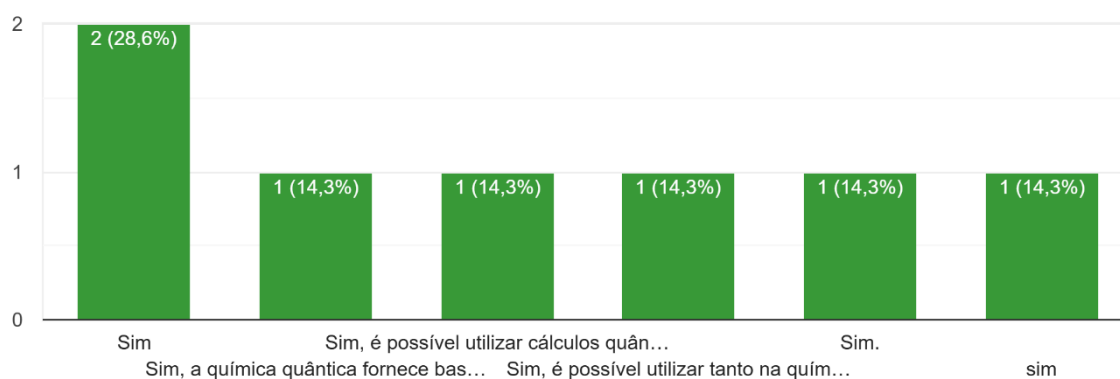
Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Gráfico 15 se contém as respostas dos discentes participantes quando questionados se eles acreditavam que era possível utilizar os cálculos obtidos em Mecânica Quântica (MQ) para prever as propriedades químicas de compostos.

Gráfico 15 – resposta dos discentes quanto a possibilidade de usar os cálculos de propriedades quânticas para prever propriedades químicas

Você acha que é possível utilizar cálculos quânticos para prever propriedades químicas de compostos?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Todos os 7 participantes acreditam que é possível fazer uso dos cálculos obtidos em MQ para prever as propriedades de compostos químicos de interesse. Vale a pena ressaltar que, como o questionário foi realizado via Google Forms, a plataforma registra, em termos percentuais, as respostas dos participantes conforme a sintaxe de escrita utilizada por cada um deles. Desse modo, mesmo que sejam 6 (seis) colunas diferentes, todas possuem o mesmo significado em suas respostas.

O Quadro 13, tem registrado as respostas dos discentes participantes quando eles foram questionados sobre se haviam tido contato com o conteúdo referente a Teoria Funcional da Densidade. Teoria essa, largamente utilizada em cálculos de Química Computacional. A pergunta em questão feita foi: *Comente se você já ouviu falar sobre a Teoria Funcional da Densidade.*

Quadro 13 – resposta dos discentes quanto ao seu conhecimento sobre TFD.

Participante 1	Sim, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT, na sigla em inglês) é uma abordagem fundamental em Química Computacional e em Física do Estado Sólido. Ela se baseia na ideia de que as propriedades de um sistema de muitos elétrons podem ser descritas em termos da densidade eletrônica, ao invés de considerar explicitamente as funções de onda de todos os elétrons do sistema, o que simplifica imensamente os cálculos.
Participante 2	Não.
Participante 3	Propriedades funcionais aplicadas a um sistema de elétrons.
Participante 4	Não.
Participante 5	Sei que é utilizada para estudar o comportamento eletrônico de sistemas químicos e físicos.
Participante 6	Não.
Participante 7	Sim, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT, na sigla em inglês) é uma abordagem fundamental em Química Quântica utilizada para estudar a estrutura eletrônica de moléculas e sólidos.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

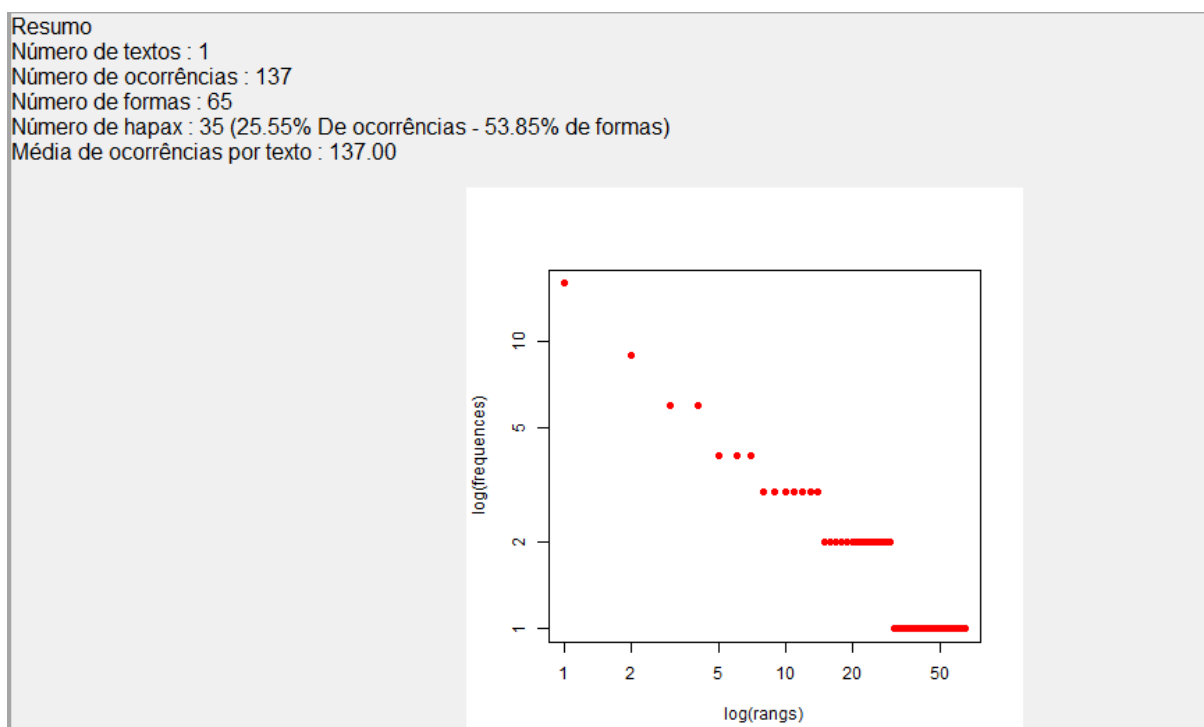
Quando analisamos as respostas dos discentes participantes, podemos classificá-las em 4 (quatro) categorias, sendo elas:

1. Respostas afirmativas: O Participante 1 estrutura uma resposta bem-informada, com uma explicação detalhada e técnica. O indivíduo demonstra um entendimento claro sobre a TFD, ressaltando a ideia central de que a densidade eletrônica existente no sistema, o que simplifica os cálculos. O Participante 7 também discorre uma resposta igualmente afirmativa e técnica, descrevendo que a TFD como uma abordagem fundamental para a Química Quântica.
2. Respostas vagas: O Participante 3 oferece uma resposta extremamente vaga, referindo-se à teoria apenas como “propriedades funcionais aplicadas a um sistema de elétrons”. Embora a menção à “aplicação a sistema de elétrons” seja relevante, o uso da palavra “funcionais” sem mais explicações pode indicar que o participante possui alguma ideia geral, mas carece de compreensão mais profunda da teoria.
3. Respostas negativas: Os Participantes 2, Participante 4 e Participante 6 demonstraram as respostas mais simples, com a palavra “não”. Sugerindo assim que não possuem conhecimento sobre a TFD ou que não estão familiarizados com o termo referente à teoria. Não há explicações ou tentativas de vincular o conceito a algo que já foi estudado, o que pode indicar uma lacuna significativa de conhecimento sobre o tema ou até mesmo uma falta de compreensão da importância da teoria em certos campos da ciência.
4. Respostas parcialmente informadas: O Participante 5 sugere algum conhecimento sobre a TFD, mencionando sua aplicação para “estudar o comportamento eletrônico de sistemas químicos e físicos”. No entanto, a resposta é de fato superficial e carece de detalhes técnicos, como a ideia central da teoria ou os aspectos pertinentes à linguagem matemática empregada ou as técnicas computacionais que tornam a teoria tão relevante.

Podemos perceber que há uma divisão clara nas respostas dos participantes, enquanto alguns demonstram um conhecimento sólido sobre a teoria, os demais não possuem familiaridade com a teoria ou apenas fornecem respostas imprecisas. Essa discrepância pode refletir o nível de preparo acadêmico dos participantes ou na profundidade com que o tema foi abordado. Todavia, tal discrepância sugere também que um reforço na explicação sobre a teoria seria benéfico, especialmente para

aqueles que parecem ter pouco ou nenhum conhecimento sobre a teoria. Contudo, essas divergências no que tange o conhecimento dos participantes da pesquisa não se mostrou ao se inserir as respostas no programa IRAMUTEQ Gráfico 16, pois o *software* retornou um número de hápax baixo (25,55%), que mesmo com a divergência sobre o conhecimento acerca da teoria, as respostas estão coesas em dar a devida importância para a teoria.

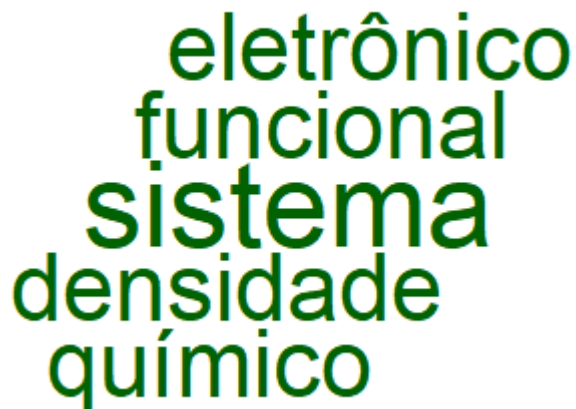
Gráfico 16 – análise do IRAMUTEQ sobre as respostas dos discentes acerca da Teoria Funcional da Densidade.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Com isso, a nuvem de palavras (Figura 9) criada pelo programa, denota que os termos que mais foram proferidos pelos discentes participantes explanam a importância sobre a teoria abordada.

Figura 9 – nuvem de palavras com os termos que explanam os termos de maior importância na teoria abordada



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

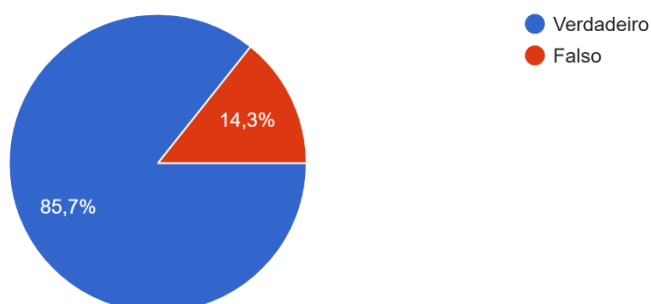
4.3 Aspectos pertinentes à aplicação da Teoria Funcional da Densidade e métodos computacionais como estratégia para o ensino de química: uma aplicação em mecanismos de reação orgânica

O Gráfico 17 denota a resposta dos alunos quando questionados sobre a resolução da equação de Schrödinger para sistemas moleculares multieletrônicos.

Gráfico 17 – resposta dos discentes quanto a resolução da equação de Schrödinger para sistemas multieletrônicos.

É possível resolver a equação de Schrödinger para sistemas moleculares multieletrônicos?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

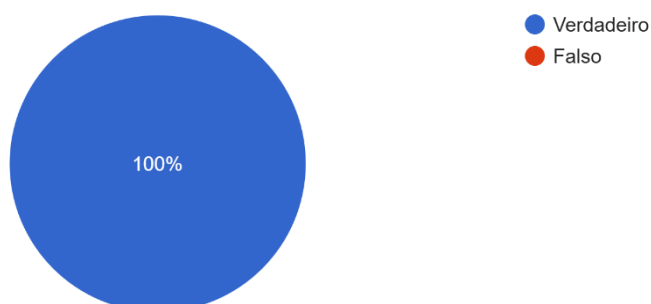
Ao analisarmos o Gráfico 17, podemos perceber que 85,7% dos participantes (6 discentes) marcaram que é possível resolver a equação e apenas 14,3% (1 discente) marcou que não é possível. Entretanto, sabemos que tem se procurado metodologias adequadas para se solucionar a equação, de modo que no Modelo das Partículas Independentes é uma alternativa para resolver a equação, pois introduz simplificações matemáticas significativas para a resolução dos sistemas (FREITAS, 1999).

O Gráfico 18, descreve as respostas dos discentes quando questionados sobre a unidade básica da Teoria Funcional da Densidade.

Gráfico 18 – resposta dos discentes quanto a unidade básica da Teoria Funcional da Densidade.

A entidade básica da Teoria Funcional da Densidade é a densidade eletrônica que descreve a distribuição de carga em um átomo, molécula ou sólido?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

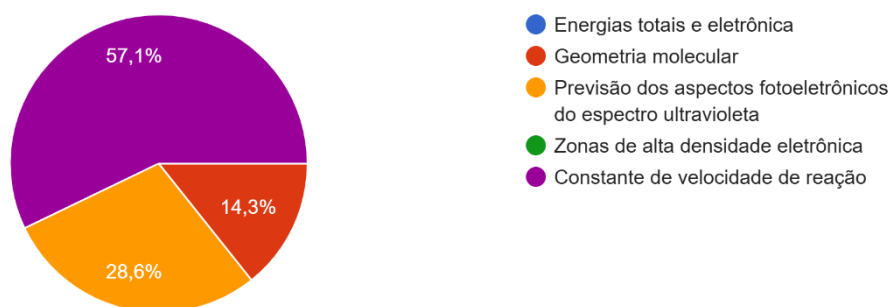
Podemos perceber que 100% dos discentes participantes (7 indivíduos) acreditam ser verdadeiro que o que permite a Teoria Funcional da Densidade emitir seus resultados é a distribuição de carga elétrica presente em um átomo, molécula ou sólido.

O Gráfico 19 contém as respostas dos participantes dessa pesquisa quando questionados sobre quais dos possíveis resultados, das opções disponibilizadas pelo pesquisador, não se poderia obter por meio dos cálculos computacionais para serem utilizados como parâmetros termodinâmicos.

Gráfico 19 – resposta dos discentes sobre quais parâmetros não poderiam ser encontrados utilizando técnicas de química computacional.

Dentro dos possíveis resultados obtidos por meio dos cálculos computacionais em Química, qual não é obtido como parâmetro termodinâmico?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

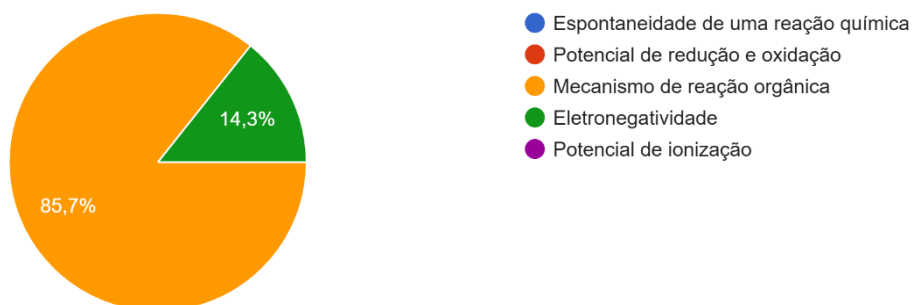
Ao analisarmos o Gráfico 19, percebemos que 4 (57,1%) dos participantes que responderam a pesquisa acreditam que a constante de velocidade de reação é um parâmetro termodinâmico que não pode ser obtido com o uso de cálculos computacionais. A segunda opção que mais obteve votos indica que não se pode realizar previsão dos aspectos referente aos aspectos fotoeletrônicos do espectro ultravioleta, 2 (28,6%) participantes marcaram esta opção. E apenas 1 participante (14,3%) marcou a opção que se referia a geometria molecular.

O Gráfico 20, sinaliza as respostas dos discentes quando questionados qual parâmetro não poderia ser representado na forma de uma modelagem matemática.

Gráfico 20 – opções marcadas pelos discentes quanto aos parâmetros que não podem ser representados matematicamente.

Qual das opções abaixo não pode ser representado por meio de uma modelagem matemática?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

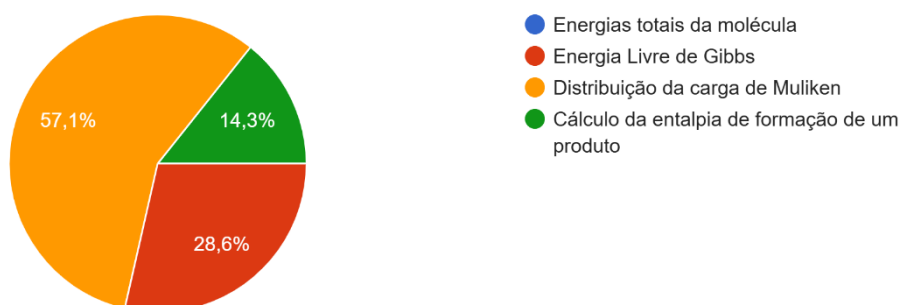
Ao analisarmos o Gráfico 20, notamos que uma boa parcela dos discentes (6 participantes) participantes marcaram a opção de mecanismo de reação orgânica, representando 85,7% do total de indivíduos que responderam. E apenas 1 participante, (14,3%) marcou que a eletronegatividade é um parâmetro que não pode ser representado de maneira matemática.

Os resultados contidos no Gráfico 21 se referem aos fatores mais indicados para elaborar um mecanismo de reação orgânica.

Gráfico 21 – respostas dos discentes sobre as estratégias para propor um mecanismo de reação orgânica.

Dentre os fatores abaixo, qual o mais indicado para a elaboração de um mecanismo de reação orgânica?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Podemos analisar que mais da metade dos participantes da pesquisa, 4 participantes (representando 57,1% das respostas obtidas) acreditam que um parâmetro a ser considerado na proposição de um mecanismo de reação orgânica é a carga de Muliken. A resposta fornecida por 28,6% dos participantes (número percentual que representa 2 participantes) indica que o parâmetro a ser utilizado é a Energia Livre de Gibbs e apenas 14,3% (1 participante) acredita que o cálculo da entalpia de formação de um produto de interesse é o parâmetro a ser utilizado para propor um mecanismo de reação orgânica.

4.4 Aspectos de aprendizagem: pré-teste (aplicado antes da intervenção)

Antes da intervenção didática proposta por esse trabalho, foi feito um levantamento prévio dos conhecimentos dos discentes sobre alguns aspectos da aplicabilidade da química computacional. O Quadro 14, traz as respostas dos discentes quando questionados sobre os seus entraves pessoais no aprendizado de química.

Quadro 14 – respostas dos discentes sobre seus entraves no aprendizado em química.

Participante 1	Conhecimentos básicos de Química, matemática, física..
Participante 2	Para mim, a maior dificuldade é matemática no meu caso, mas tem outros discentes que encontram dificuldades em outros assuntos.
Participante 3	Falta de atividades práticas para a fixação do conteúdo abordado em sala.
Participante 4	Linguagem muito técnica.
Participante 5	No meu caso algumas dificuldades são nos cálculos.
Participante 6	Linguagem muito técnica, e um avanço um pouco acelerado para assuntos bastante complexos.
Participante 7	Os principais entraves no aprendizado de Química incluem a abstração dos conceitos, que dificulta a visualização dos fenômenos, e a linguagem técnica complexa, que pode confundir os alunos. Além disso, a falta de contextualização e exemplos



práticos, a necessidade de conhecimentos matemáticos e metodologias de ensino tradicionais que não envolvem os alunos são fatores que dificultam a aprendizagem.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

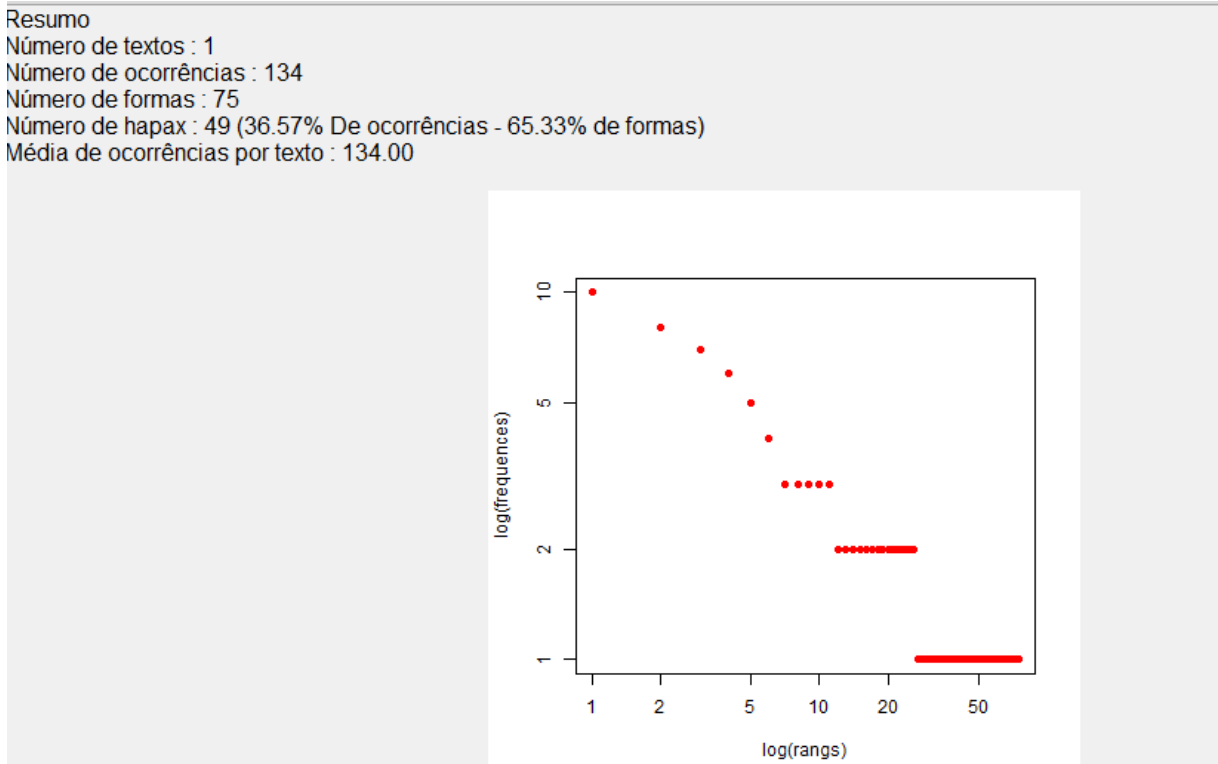
Analisando as respostas dada pelos discentes, podemos perceber que refletem não apenas as dificuldades técnicas relacionadas à matéria, mas também questões pedagógicas e de abordagem de ensino. Na resposta do Participante 1 sugere que ele reconhece a interdependência entre as disciplinas química, matemática e física. O Participante 2 destaca como um ponto de maior dificuldade a matemática. Em ambos os discursos podemos denotar que esta dificuldade pode ser comum entre os alunos que não dominam os aspectos fundamentais das disciplinas base (química, física e matemática).

Para o Participante 3 a falta de atividade prática para fixação de conteúdo é uma crítica importante à metodologia de ensino. A Química, sendo uma ciência tida por empírica, se beneficia enormemente de atividades práticas que permitem ao aluno a visualização e o entendimento de fenômenos discutidos teoricamente. Já para os Participante 4 e Participante 6 a utilização de uma linguagem técnica é um desafio. Considerando que a química possui um vocabulário especializado e, muitas vezes, de difícil acesso para quem não está familiarizado. O Participante 6 destaca ainda o avanço acelerado em temas complexos, tal crítica sugere que o ritmo de ensino pode acabar sendo excessivamente acelerado.

Ao analisarmos os discursos, percebemos que as respostas não são homogêneas e que variam de acordo com o perfil e as necessidades de cada discente. Algumas dificuldades são mais técnicas e relacionadas ao domínio das habilidades em química, matemática e física (Participante 1, Participante 2, e Participante 5). Alguns outros encontram dificuldade devido ao uso de uma linguagem técnica que não lhes é acessível ou ainda, a velocidade de ensino (Participante 4 e Participante 6). A falta de atividades práticas e contextualizadas (Participante 3 e Participante 7) também é um ponto relevante.

Esta divergência nas respostas dos discentes pode ser percebida no número de hápax (36,57%) calculado pelo IRAMUTEQ, indicado pelo Gráfico 22, abaixo:

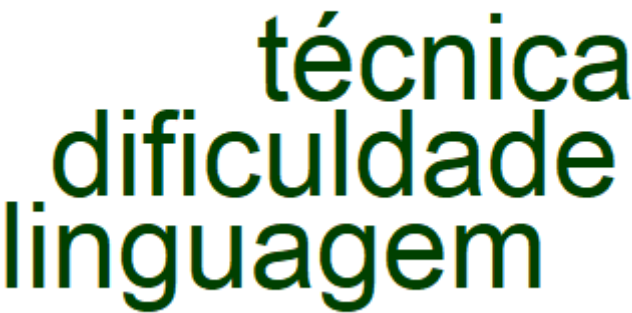
Gráfico 22 – número de hápax, com base nas repostas dos discentes sobre suas dificuldades no aprendizado em química.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Embora várias tenham sido identificadas pelos discentes em suas respostas, a nuvem de palavras, Figura 10, gerada pelo programa IRAMUTEQ destacou que o uso de uma linguagem técnica é a mais relevante.

Figura 10– nuvem de palavras gerada com base nos termos mais relevantes pelo programa.



Fonte IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 15, contém as respostas dos discentes participantes desta pesquisa quando questionados sobre as implicações acerca da pouca carga horária pertencente à experimentação laboratorial e suas consequências no processo de aprendizagem. A pergunta em questão foi a seguinte: *De acordo com Bachelard (1996), o pensamento empírico só se torna claro depois, quando um conjunto de argumentos fica estabelecido. Ou seja, é necessário que haja a construção de uma cadeia de argumentos teóricos para que se possa validá-los por meio da experimentação. Na sua opinião como o discente, a falta de carga horária prática implica algum prejuízo no processo de aprendizagem do educando? Justifique.*

Quadro 15 – respostas dos discentes acerca da carga horária experimental do curso de Licenciatura em Química.

Participante 1	Sim, a maioria de nós temos facilidade em absorver o conteúdo praticando, a falta dele gera um grande desfalque no nosso aprendizado
Participante 2	Implica sim, pois para o aprendizado ser completo precisa ter a junção de aprendizado tanto teórico como prático.
Participante 3	Sim, pois o excesso de teoria pode confundir e não colaborar para o aprendizado do aluno.
Participante 4	A falta de carga horária prática prejudica o aprendizado ao limitar a conexão entre teoria e prática, essencial para consolidar conhecimentos e desenvolver habilidades técnicas. Sem atividades práticas, os alunos têm dificuldade em validar conceitos teóricos, comprometem o senso crítico e perdem oportunidades de aprendizado ativo. Isso pode gerar profissionais menos preparados e com compreensão superficial dos temas. Integrar prática ao ensino é fundamental para uma formação mais completa e significativa.
Participante 5	Sim
Participante 6	Sim. Pois a prática dá uma visão muito mais ampla da teoria, é possível visualizar o que você estava aprendendo e isso te dá um maior entendimento sobre o assunto.

Participante 7	Sim, a falta de carga horária prática pode implicar prejuízos significativos no processo de aprendizagem. A experimentação e a prática são essenciais para validar e concretizar os conhecimentos adquiridos de forma teórica.
-----------------------	--

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

A análise discursiva das respostas dos discentes revela diversas visões sobre a importância da carga horária prática no processo de aprendizagem. As respostas se concentram em destacar a relevância da prática para consolidar e validar o conhecimento teórico, proporcionando uma compreensão mais profunda e aplicável dos conteúdos.

A maioria das respostas fornecidas (pelos Participante 1, Participante 2, Participante 3, Participante 6 e Participante 7) expressa a visão de que a prática é essencial para o aprendizado efetivo. Em termos gerais, as contribuições sugerem que o aprendizado não pode ser completado apenas com a teoria, sendo necessário que os alunos possam vivenciar o conteúdo de maneira aplicada. A resposta emitida pelo Participante 1, por exemplo, aponta que a falta de prática gera um “grande desfalque no nosso aprendizado”, enquanto o Participante 6 menciona que a prática proporciona uma “visão mais ampla” da teoria, facilitando o entendimento.

O Participante 3 levanta uma crítica direta ao excesso de teoria, sugerindo que isso pode “confundir” e “não colaborar para o aprendizado”. Esse ponto é complementado pelo Participante 4, que argumenta que a falta de carga horária prática pode “prejudicar o aprendizado” ao limitar a conexão entre teoria e prática, essencial para a consolidação do conhecimento. A ideia de que a teoria, por si só, é insuficiente para formar um profissional capacitado é recorrente nas respostas.

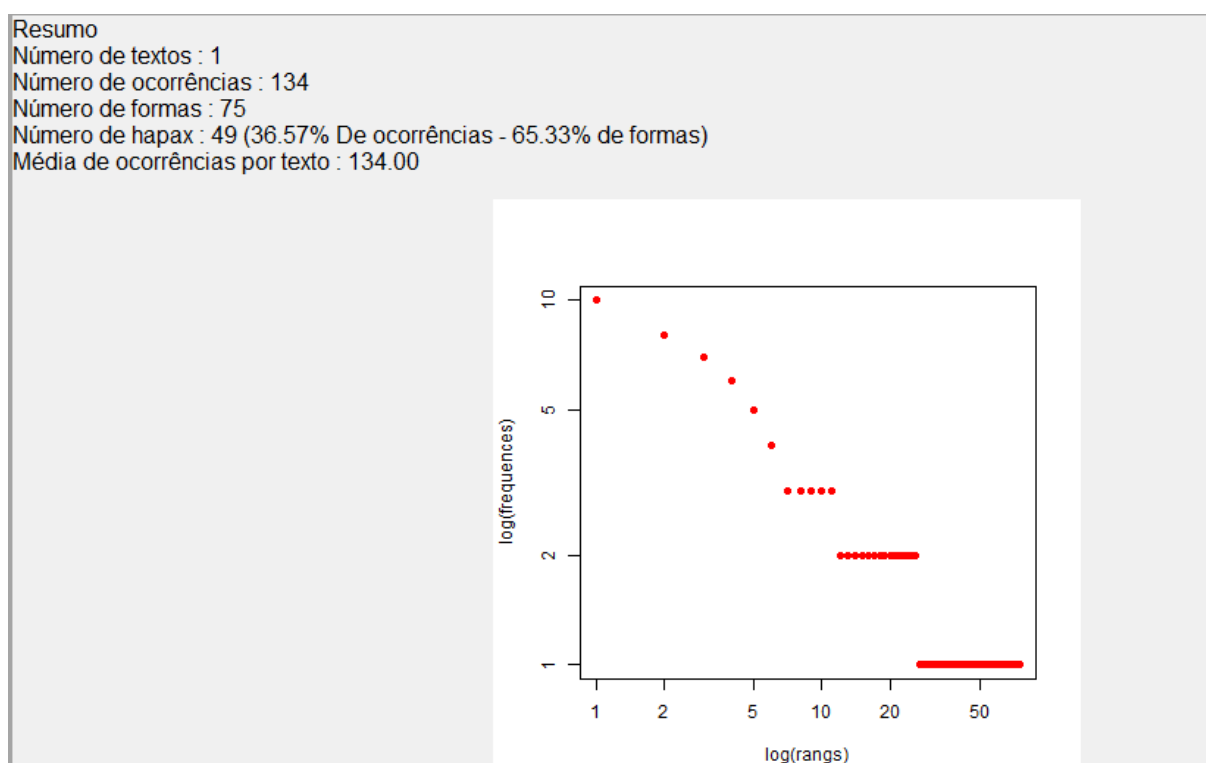
Por sua vez, o participante faz uma afirmação importante ao dizer que “para o aprendizado” ser completo precisa ter a junção de aprendizado tanto teórico quanto prático”. Essa visão de complementaridade é amplamente aceita, já que o conhecimento teórico é visto como a base e a prática como ferramenta para aferir e aplicar esse conhecimento, promovendo uma aprendizagem mais integrada e sólida.

O conjunto das respostas demonstra um entendimento claro de que a carga horária prática é fundamental para um aprendizado completo. A prática é vista, não

apenas como forma de aplicar o conhecimento teórico, mas como uma etapa essencial para internalizar e consolidar os aprendizados.

Quando inserimos as respostas dos participantes no programa IRAMUTEQ, o *software* nos indica que as respostas dos discentes possuem um teor interligado. Percebemos isso ao analisarmos o número de hápax existente que foi calculado pelo programa (36,57%) como mostra o Gráfico 23.

Gráfico 23 – análise do IRAMUTEQ acerca das respostas sobre a carga horária prática do curso.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 16, contém as respostas dos participantes desta pesquisa quando questionados sobre a experimentação em sua futura prática docente. A pergunta realizada foi a seguinte: *Quando possível, a fim de verificar o processo de uma aprendizagem significativa, docentes realizam uma demonstração dos conceitos estudados fora do ambiente da sala de aula. Em sua futura prática docente, ao fazê-lo, você sente que esta exemplificação torna o aprendizado mais atraente para o educando? Justifique.*

Quadro 16 – resposta dos participantes quando questionados sobre a experimentação em sua futura prática docente.

Participante 1	Sim, como eu disse mais acima, a maioria dos alunos tem maior facilidade em aprender os conteúdos quando se é mostrado de forma prática
Participante 2	Sim, pois precisamos de atividades diversas para o aprendizado não ser monótono
Participante 3	Sim
Participante 4	Sim, exemplificar conceitos fora da sala de aula torna o aprendizado mais atraente, pois conecta a teoria ao mundo real, engaja os alunos, estimula sentidos e habilidades práticas e promove senso crítico. Isso enriquece o aprendizado, tornando-o mais dinâmico e significativo.
Participante 5	<i>Preferiu não responder</i>
Participante 6	Sim. Pois estimula o envolvimento dos alunos de diversas maneiras.
Participante 7	Sim, acredito que realizar demonstrações dos conceitos estudados fora do ambiente da sala de aula pode tornar o aprendizado mais atraente e significativo para o educando. Ao levar os alunos a vivenciarem a aplicação prática de conceitos em contextos reais, seja em laboratórios, visitas a empresas, ou até mesmo em atividades cotidianas, é possível despertar o interesse e a curiosidade dos alunos.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas fornecidas pelos discentes, notamos que revela um consenso entre os participantes sobre a importância de integrar atividades práticas no ensino, para tornar o aprendizado mais envolvente e significativo. As respostas destacam os benefícios de conectar teoria e prática de maneiras variadas, com um foco especial na motivação, no engajamento e na aplicação real do conhecimento. Assim, podemos realizar a divisão dos discursos em tópicos significativos.

1. Consenso sobre a importância de atividades práticas:

A maioria dos participantes (Participante 1, Participante 2, Participante 3, Participante 4, Participante 6 e Participante 7) afirma positivamente que em sua

futura prática docente devem integrar atividades que tragam os alunos para fora do ambiente teórico tradicional. Essa integração é vista como uma forma de tornar o aprendizado mais interessante e eficiente. O Participante 1, por exemplo, repete a ideia de que “a maioria dos alunos tem maior facilidade em aprender conteúdos quando se é mostrado de forma prática”, uma argumentação que ressoa com a visão geral de que a prática facilita o processo de aprendizagem.

2. Diversificação para evitar monotonia:

O Participante 2 levanta um ponto importante sobre a necessidade de “atividades diversas”, sugerindo que a prática não deve ser uma abordagem única, mas sim diversificada. Isso visa evitar que o aprendizado se torne “monótono”. O uso de diferentes formas de aplicação, como laboratórios, atividades externas e visitas a empresas, pode ajudar a manter o interesse dos alunos e estimular sua curiosidade, ponto de vista esse apontado também pelo Participante 7.

3. Foco no desenvolvimento de senso crítico e na experiência concreta:

O Participante 7 destaca o valor de levar os alunos a “vivenciarem a aplicação prática de conceitos em contextos reais”. Esse ponto complementa a argumentação do Participante 4, ao afirmar que a prática permite “despertar o interesse e a curiosidade dos alunos”. Aqui, o senso crítico também surge como um objetivo importante do ensino prático de química, ao promover uma reflexão mais profunda sobre o conteúdo aprendido e suas aplicações no mundo real.

As respostas indicam um consenso claro sobre a importância de integrar atividades práticas no futuro da prática docente. A maioria dos participantes acredita que isso não apenas torna o aprendizado mais interessante e envolvente, mas também mais significativo, ajudando os alunos a conectarem a teoria com o mundo real, a desenvolver habilidades criativas e a manter o engajamento ao longo do processo. A ênfase está em tornar o ensino mais dinâmico e interativo, utilizando atividades variadas que permitam aos alunos experimentarem e aplicar os conceitos estudados em contextos reais.

Ao utilizarmos o programa IRAMUTEQ para analisar as respostas dos participantes notamos a coerência existente entre suas respostas. O número de hápax

encontrado (37,58%) confirma essa homogeneidade do discurso. O Gráfico 24, abaixo, demonstra o resultado obtido pelo programa.

Gráfico 24 – número de hápax sobre as repostas quanto à futura prática docente.

Resumo

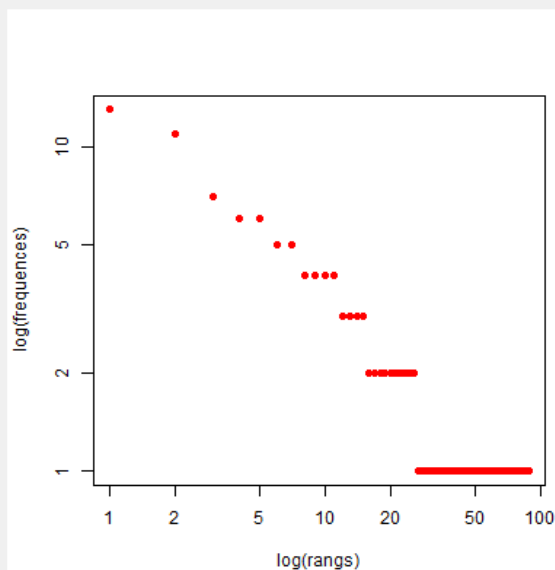
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 165

Número de formas : 88

Número de hapax : 62 (37.58% De ocorrências - 70.45% de formas)

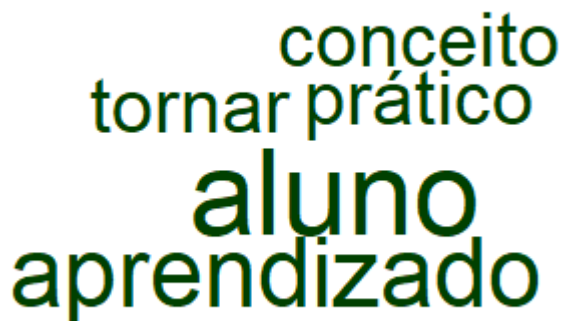
Média de ocorrências por texto : 165.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Número de hápax acima retornou uma nuvem de palavras (Figura 11) com os termos mais comum encontrados nos discursos dos discentes pesquisados, denotando uma importância reconhecida, de modo individual, o uso da experimentação como ferramenta didática.

Figura 11– nuvem de palavras sobre a importância do empirismo na futura prática docente



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 17 contém as respostas dos discentes quando questionados sobre o processo de modelagem matemática na proposição de um mecanismo de reação orgânica (do tipo SN2), sendo esta estratégia uma das formas de aplicação da química computacional. Este questionamento veio sob a pergunta: *A Teoria do Estado de Transição trabalha aspectos de modelagem matemática para a elaboração de diagramas de energia livre em reações do tipo SN2. Na sua opinião, a utilização da modelagem matemática para validar o mecanismo proposto pelo discente poderia ser uma ferramenta positiva ou negativa no processo de aprendizagem?*

Quadro 17 – respostas dos discentes que responderam sobre o uso da modelagem matemática na proposição dos mecanismos do tipo SN2.

Participante 1	A modelagem matemática é uma ferramenta positiva porque integra teoria e prática, promovendo uma compreensão mais profunda dos mecanismos de reação e desenvolvendo habilidades importantes para o aprendizado e a aplicação de conceitos químicos.
Participante 2	Positiva, pois promove a visualização, validação e aprofundamento do conhecimento.
Participante 3	Sim, pois a matemática por si só já embasa muitos outros conteúdos na área de exatas.
Participante 4	A modelagem matemática para validar mecanismos, como em reações SN2, é uma ferramenta positiva no aprendizado, pois

	facilita a compreensão visual dos conceitos, desenvolve o pensamento crítico, integra teoria e prática, promove o aprendizado ativo e prepara os alunos para desafios acadêmicos e profissionais.
Participante 5	Positiva
Participante 6	Positiva. Pois contribui tanto para a compreensão dos conceitos quanto para o desenvolvimento de habilidades analíticas e práticas.
Participante 7	A utilização da modelagem matemática para validar o mecanismo de reações SN2 é uma ferramenta positiva no aprendizado. Ela permite que os alunos compreendam conceitos teóricos de forma concreta, visualize como fatores afetam a reação e testem hipóteses de maneira prática, tornando o conteúdo mais interessante e relevante.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao realizarmos a análise das respostas fornecidas revela alguns padrões consistentes, bem como variações ao nível de detalhe e ênfase nas justificativas como, por exemplo, o consenso positivo sobre a modelagem matemática como uma ferramenta positiva no processo de aprendizagem, destacando suas vantagens de diferentes formas, mas sempre com foco em aspectos semelhantes.

Vários participantes mencionam como a modelagem matemática integra teoria e prática, tornando o aprendizado mais completo e conectado à realidade. Esse ponto aparece explicitamente nas respostas do Participante 1 e Participante 4, que falam sobre como a modelagem proporciona uma compreensão mais profunda dos conceitos.

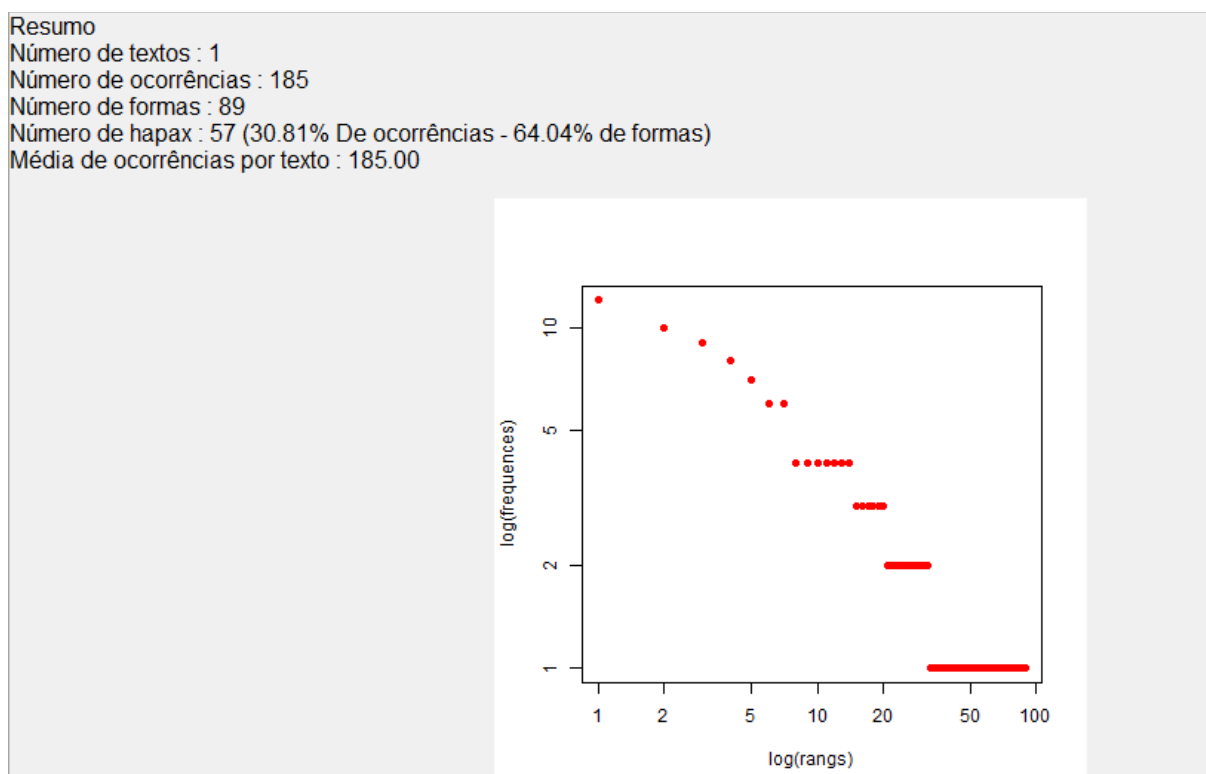
A importância do desenvolvimento de habilidades, tanto analíticas quanto práticas, é mencionada por muitos participantes. O Participante 6, por exemplo, destaca que a modelagem contribui tanto para a compreensão dos conceitos quanto para o desenvolvimento de habilidades. Esse ponto também é ressaltado pelo Participante 4, que enfatiza o pensamento crítico e o aprendizado ativo. E embora nem todos os participantes mencionem explicitamente, alguns ressaltam que a modelagem matemática é uma ferramenta poderosa para a área química. O

Participante 4 faz uma referência direta a reação SN2, enquanto o Participante 7 fala sobre como a modelagem torna o conteúdo mais interessante e relevante no contexto químico.

Alguns participantes, como o Participante 4, sugerem que a modelagem prepara os alunos para desafios acadêmicos e profissionais, o que está relacionado ao preparo que a modelagem oferece para uma aplicação mais prática e realista do conhecimento.

Estes pontos revelam a compreensão compartilhada dos benefícios da modelagem matemática, com ênfase em sua utilidade. O *software* IRAMUTEQ, ao realizar uma análise de tais respostas denota essa homogeneidade dos discursos quando apresenta um número de hápax baixo (30, 81%) como demonstrado no Gráfico 25, abaixo:

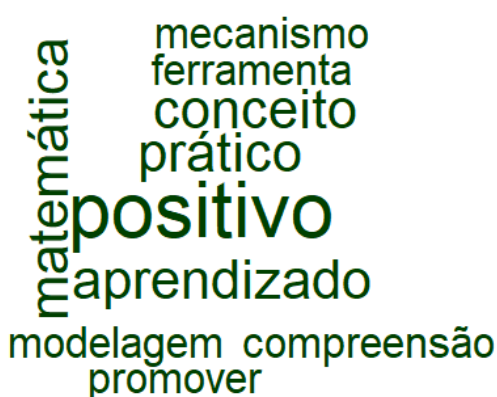
Gráfico 25 – gráfico léxico sobre as respostas dos discentes participantes quanto à modelagem matemática.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

A Figura 12, traz a nuvem de palavras referente aos termos mais utilizados pelos discentes participantes em seus discursos sobre o uso da modelagem matemática, com essa nuvem podemos notar a importância dada pelos participantes sobre esta ferramenta.

Figura 12– nuvem de palavras sobre os discursos dos participantes quanto ao uso da ferramenta de modelagem matemática.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 18 contém os discursos dos discentes participantes desta pesquisa quando questionados sobre a utilização da Mecânica Quântica (MQ) como ferramenta no aprendizado de química. As respostas foram obtidas com base na seguinte pergunta: *A Mecânica Quântica (MQ) é uma ferramenta muito utilizada fora do País para na realização de estudos envolvendo Química Orgânica. Em algumas literaturas, os aspectos quânticos são levados em consideração para aprofundar os estudos sobre as interações eletrônicas que ocorrem entre as espécies químicas de um sistema. Qual sua opinião sobre a utilização de conceitos voltados à MQ como ferramenta de apoio ao estudo de Química, facilitaria ou prejudicaria o processo de aprendizagem dos discentes? Justifique.*

Quadro 18 – discurso dos discentes participantes quando questionados ao uso da MQ como ferramenta de aporte ao entendimento de química.

Participante 1	A utilização de conceitos voltados à Mecânica Quântica (MQ) como ferramenta de apoio ao estudo de Química pode, sem dúvida,
-----------------------	---

	facilitar o processo de aprendizagem dos discentes, desde que aplicada de forma adequada e progressiva.
Participante 2	Pode ser uma ferramenta facilitadora no aprendizado na área mas tem que ter atenção quanto ao aprendizado como um todo e alguns discentes que encontrem dificuldades, a mecânica quântica tem o potencial de enriquecer o aprendizado, desenvolver o raciocínio científico, e preparar os alunos.
Participante 3	Sim. Uma complementa a outra.
Participante 4	A utilização da Mecânica Quântica (MQ) na Química Orgânica pode ser benéfica, pois aprofunda o entendimento das interações eletrônicas, desenvolve habilidades analíticas e integra teoria e prática. Ela ajuda a explicar fenômenos complexos que a Química clássica não aborda. Contudo, sua complexidade pode ser desafiadora para iniciantes, sendo essencial uma introdução gradual e bem contextualizada. Quando aplicada corretamente, a MQ facilita o aprendizado e oferece uma visão mais completa dos fenômenos químicos.
Participante 5	Facilitaria
Participante 6	Facilitaria. Pois se for ensinado de maneira correta, o entendimento da Mecânica Quântica, por ser uma ciência está bastante ligada aos estudos atômicos, pode facilitar o entendimento das interações moleculares.
Participante 7	A Mecânica Quântica pode ser facilitadora ao aprofundar o entendimento das interações moleculares, mas também pode ser desafiadora sem uma base sólida em física e matemática, tornando o aprendizado mais abstrato.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas fornecidas pelos discentes participantes desta pesquisa notamos as diferentes perspectivas sobre a utilização da Mecânica Quântica (MQ) quando utilizada no aprendizado de Química. Tais perspectivas variam entre o entusiasmo, cautela e reconhecimento da complexidade do tema.

Um referencial existente nos discursos está centrado na ideia de que a MQ, se bem aplicada, pode facilitar o aprendizado de química, particularmente àqueles voltados as interações moleculares e atômicas. Alguns participantes (Participante 2, Participante 4 e Participante 6) sugerem que a MQ pode facilitar a aprendizagem, seja pela compreensão das interações moleculares, do raciocínio científico ou pela integração da teoria e prática. Podemos notar uma dessas sugestões na fala do Participante 2, quando ele diz: “A mecânica quântica tem potencial de enriquecer o aprendizado, desenvolver o raciocínio científico, e preparar o aluno”. Desse modo, podemos concluir que, na visão dos participantes, a MQ tem um papel enriquecedor e que pode ajudar a formar uma base mais sólida no entendimento de fenômenos químicos.

Todavia, outro grupo de participantes (Participante 1, Participante 4 e Participante 7) destacam em suas respostas a dificuldade de aprender MQ sem uma base sólida e sugere que, sem um preparo adequado, a MQ pode se tornar deveras abstrata ou até sobrecarregar os alunos e ocasionar um efeito contrário ao desejado. No discurso dos discentes deste grupo, há o compartilhamento de uma ideia com a preocupação com a complexidade da MQ e a necessidade de uma abordagem pedagógica cuidadosa. Uma introdução gradual e a necessidade de uma base sólida em física e matemática são vistas como condições para que a MQ seja bem absorvida pelos alunos.

Em geral, as respostas podem ser agrupadas em perspectivas discursivas principais: facilitador de aprendizagem, complexidade e atenção pedagógica. Quando analisamos estes pontos pelo programa IRAMUTEQ, notamos que o número de hápax (32,01%) gera um valor de discurso mais homogêneo (Gráfico 26), isso se deve aos parâmetros iguais que foram abordados (supracitado) pelos discentes participantes.

Gráfico 26 – número de hápax sobre os pontos em comum nas respostas dos discentes.

Resumo

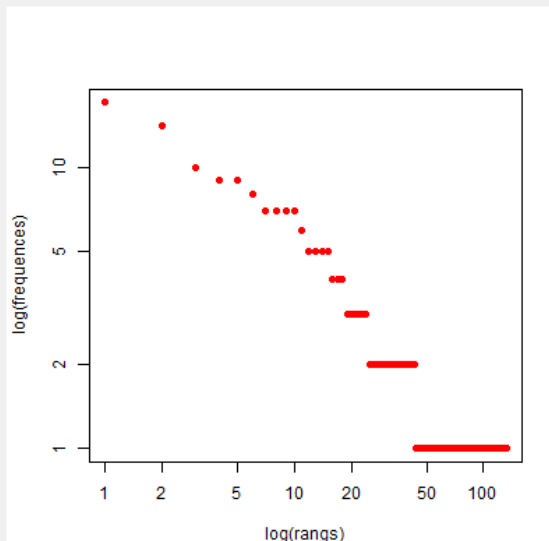
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 278

Número de formas : 132

Número de hapax : 89 (32.01% De ocorrências - 67.42% de formas)

Média de ocorrências por texto : 278.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 19 contém as respostas dos discentes participantes desta pesquisa quando questionados sobre a utilização da Teoria Funcional da Densidade (TFD) e suas aplicações de pesquisa como, por exemplo, a composição virtual de mapas eletrostáticos e o uso dos parâmetros obtidos por meio dos cálculos para a proposição de mecanismos de reações orgânicas do tipo SN2. A pergunta realizada foi a seguinte: *A Teoria Funcional da Densidade (TFD) utiliza funcionais para calcular parâmetros termodinâmicos em sistemas atômicos/moleculares o que facilita muito o estudo, por parte dos químicos teóricos e computacionais, sobre aspectos que regem o comportamento da matéria e a movimentação dos elétrons de uma espécie química para outra. Na sua opinião, a utilização dos resultados obtidos por meio da TFD como, por exemplo, mapa de potencial eletrostático, poderiam acarretar em benefícios para o aprendizado em, por exemplo, mecanismos de reações orgânicas? Justifique.*

Quadro 19 – respostas dos discentes quanto a utilização da Teoria Funcional da Densidade.

Participante 1

Sim, a utilização dos resultados obtidos por meio da Teoria Funcional da Densidade (TFD), como o mapa de potencial

	eletrostático, pode acarretar benefícios significativos para o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas.
Participante 2	Sim, pode trazer grandes benefícios para o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas
Participante 3	Sim, pois essa exemplificação tornaria mais fácil a compreensão do aluno.
Participante 4	A utilização da Teoria Funcional da Densidade (TFD), como mapas de potencial eletrostático, beneficia o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas ao ajudar a visualizar interações moleculares, identificar regiões reativas e entender o movimento dos elétrons durante as reações. Isso melhora a compreensão dos mecanismos e aproxima os alunos de abordagens modernas de pesquisa, desenvolvendo também habilidades analíticas e críticas essenciais para o estudo de Química.
Participante 5	Sim, oferece benefícios significativos para aprendizagem de mecanismos de reações orgânicas.
Participante 6	Sim. Pois a TFD, ao fornecer uma maneira de descrever a distribuição de densidade eletrônica e as interações entre átomos e moléculas, permite uma compreensão mais aprofundada dos fatores que influenciam a reatividade química.
Participante 7	Sim, a utilização da TFD, como mapas de potencial eletrostático, pode beneficiar o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas. Esses mapas ajudam a visualizar as interações entre moléculas, como a distribuição de cargas e o ataque de nucleófilos, tornando os conceitos de reatividade e transição mais claros e conectados à prática. Isso facilita a compreensão dos mecanismos e a previsão de reações químicas.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas podemos perceber que há diferentes perspectivas sobre os benefícios dessa teoria para o ensino, particularmente no que se refere aos mecanismos de reações orgânicas. Alguns discentes reconhecem que a TFD tem o potencial de facilitar a compreensão dos mecanismos de reação orgânica. Esses participantes compartilham a visão de que a TFD pode ter um impacto positivo e

significativo no aprendizado de mecanismos de reações orgânicas, especial ao fornecer uma representação visual (como os mapas de potencial eletrostático da molécula). Esta percepção pode ficar evidente na fala do Participante 1:” A utilização dos resultados obtidos pela teoria [TFD], como o mapa de potencial eletrostático, pode acarretar benefícios significativos [...].

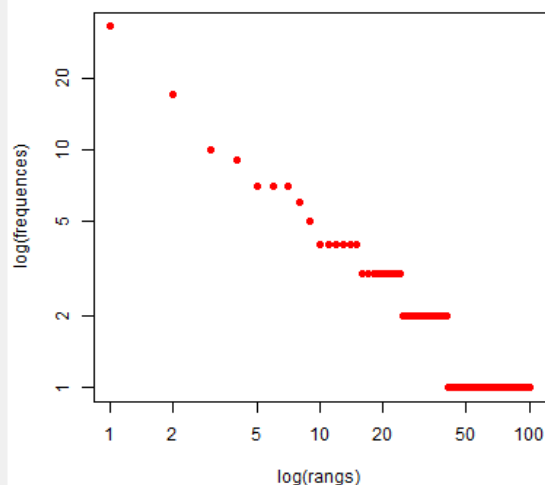
Outro ponto em comum denotado pelos discentes (Participante4, Participante 6 e Participante 7) é o destaque para a visualização das interações moleculares, como a distribuição de cargas e o comportamento dos elétrons nas reações, o que facilita a compreensão dos mecanismos químicos. Na visão dos discentes, a TFD contribui para a compreensão mais clara da reatividade química, das regiões reativas e do comportamento dos elétrons durante as reações. Desse modo, a visualização das distribuições de cargas e dos movimentos eletrônicos é vista como uma maneira eficaz de tornar os conceitos mais concretos e compreensíveis para os alunos.

A análise das respostas revela dois principais pontos de vista: os benefícios do aprendizado de mecanismos de reações orgânicas e a visualização das interações moleculares. Esses pontos em comum demonstram que a TFD pode ser uma ferramenta poderosa e eficaz no ensino de química, especialmente no que se refere à compreensão de mecanismos de reação orgânicas, pois ajuda os alunos a visualizarem conceitos complexos de maneira acessível, ao mesmo tempo em que promove o desenvolvimento de habilidades analíticas.

O Gráfico 27 demonstra que os discursos proferidos pelos discentes está consonante entre si, pois o número de hápax (24,59%) retornado pelo programa IRAMUTEQ condiz com um discurso extremamente coeso.

Gráfico 27 – análise do *software* IRAMUTEQ sobre os discursos dos discentes sobre o uso da TFD.

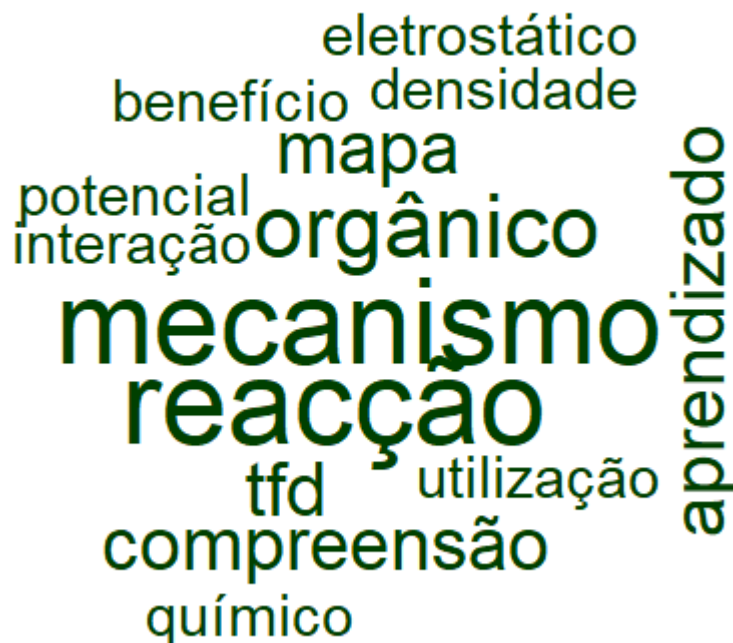
Resumo
Número de textos : 1
Número de ocorrências : 244
Número de formas : 100
Número de hapax : 60 (24.59% De ocorrências - 60.00% de formas)
Média de ocorrências por texto : 244.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O programa conseguiu ainda realizar uma nuvem de palavras (Figura 13) com os termos que mais foram repetidos pelos discentes. E podemos denotar a importância da utilização da TFD no ensino de química, em especial o ensino de reações orgânicas.

Figura 13 – nuvem de palavras com os termos mais importantes no discurso dos discentes.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

4.5 Aspectos de aprendizagem: pós-teste (aplicado após a intervenção)

As respostas que estão nesta seção foram obtidas por meio de um questionário realizado após a intervenção do pesquisador para mensurar o nível de dificuldade sentida pelos discentes participantes desta pesquisa, deste modo, como eles já haviam tido um contato mais aprofundado com as ferramentas de química computacional, as mesmas perguntas feitas no tópico 6.4 do presente trabalho foram refeitas, para saber se haveria alguma mudança nas respostas fornecidas.

O Quadro 20, abaixo, contém as respostas dos participantes deste trabalho quando questionados sobre os entraves que mais comuns no aprendizado dos discentes quanto ao seu aprendizado em química. A pergunta realizada novamente foi: *Quais são, em sua opinião, os entraves de aprendizagem mais comuns existentes nos discentes quanto ao aprendizado nos conhecimentos de Química? Justifique.*

Quadro 20 – resposta dos discentes quanto aos entraves pessoais no aprendizado de química.

Participante 1	Conceitos básicos da Química, matemática
Participante 2	Matemática
Participante 3	Falta de atividades práticas para a fixação do conteúdo abordado em sala.
Participante 4	Linguagem muito técnica
Participante 5	A química abrange vários assuntos ao mesmo tempo, então talvez essa seja a dificuldade de vários alunos
Participante 6	Linguagem muito técnica, e um avanço um pouco acelerado pra assuntos bastante complexos
Participante 7	Os principais entraves no aprendizado de Química incluem a abstração dos conceitos, a complexidade da terminologia técnica, a falta de conexão com a prática, dificuldades com matemática e metodologias de ensino tradicionais. Esses desafios podem ser superados com abordagens mais dinâmicas e contextualizadas, tornando o aprendizado mais acessível e interessante.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as novas respostas dos discentes, embasada no mesmo questionamento, mas, desta vez, após a intervenção didática do pesquisador, podemos perceber diversos obstáculos no aprendizado de química, que refletem os aspectos metodológicos e conceituais da disciplina. Notamos em algumas respostas (Participante 1 e Participante 2) a dificuldade encontrada no aspecto matemático necessário para compreender certos aspectos químicos.

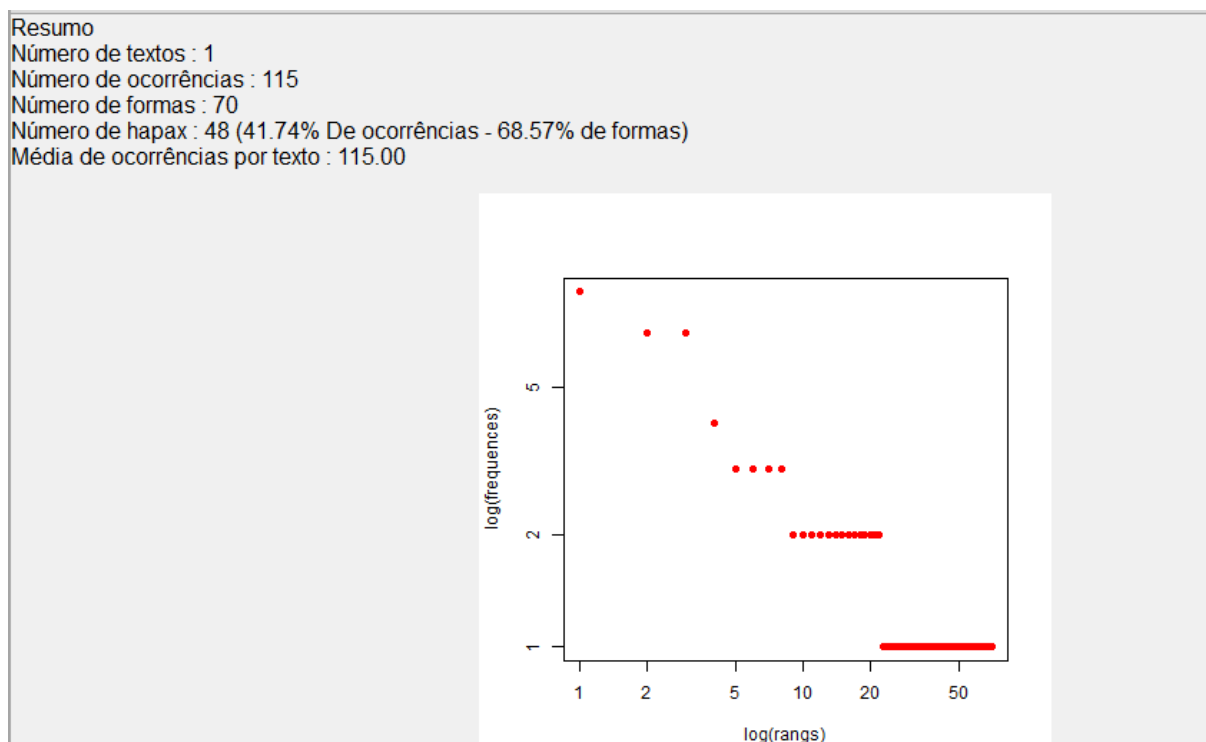
Pela fala do Participante 3, a ausência de atividades prática pode tornar o conteúdo mais abstrato e difícil de ser compreendido e fixado pelo estudante. Outro aspecto denotado pelos discentes é uso de uma linguagem técnica difícil de compreender é uma barreira significativa, dificultando o entendimento dos conceitos (Participante 4 e Participante 6).

O participante 5 denota ainda que a química cobre muitos temas complexos ao mesmo tempo, o que pode ser um desafio para os alunos que não conseguem fazer

conexões entre os diferentes conteúdos existentes. Um ponto que também chama a atenção é a falta de abordagens mais dinâmicas e práticas, como metodologias mais contextualizadas, é vista como um fator que contribui para o desafio do aprendizado (Participante 7).

Ao compararmos ambos os momentos (pré e pós teste) notamos que o discurso é muito semelhante quanto aos entraves denotados pelos discentes. E isso se mostra quando analisamos o número de hápax (41,74%) para as respostas dos discentes. Quando comparado ao mesmo coeficiente feito no momento pré-teste (36,57%) é um número diferente, denotando um discurso mais heterogêneo em comparação com o primeiro, podemos perceber isso ao analisarmos o Gráfico 28. Como resultado desta diferença entre os discursos o programa IRAMUTEQ não conseguiu produzir uma nuvem de palavras coerente.

Gráfico 28 – número de hápax quanto as respostas dos discentes sobre os entraves no aprendizado de química.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 21 contém as respostas dos discentes participantes quando questionados sobre a carga horária prática do curso e como isso implica no aprendizado. As respostas foram obtidas com base na pergunta: *De acordo com Bachelard (1996), o pensamento empírico só se torna claro depois, quando um*

conjunto de argumentos fica estabelecido. Ou seja, é necessário que haja a construção de uma cadeia de argumentos teóricos para que se possa validá-los por meio da experimentação. Na sua opinião como o discente, a falta de carga horária prática implica algum prejuízo no processo de aprendizagem do educando? Justifique.

Quadro 21 – respostas dos discentes quanto à carga horária prática e suas implicações didáticas.

Participante 1	Sim, a maioria dos alunos tem maior facilidade em aprender os conteúdos quando se é mostrado de forma prática, a falta dela causa grande desfalque no aprendizado
Participante 2	Sim, pois precisa ser um conhecimento tanto teórico como prático
Participante 3	Sim, pois o excesso de teoria pode confundir e não colaborar para o aprendizado do aluno.
Participante 4	A falta de carga horária prática prejudica o aprendizado ao limitar a conexão entre teoria e prática, essencial para consolidar conhecimentos e desenvolver habilidades técnicas. Sem atividades práticas, os alunos têm dificuldade em validar conceitos teóricos, comprometem o senso crítico e perdem oportunidades de aprendizado ativo. Isso pode gerar profissionais menos preparados e com compreensão superficial dos temas. Integrar prática ao ensino é fundamental para uma formação mais completa e significativa.
Participante 5	Sim, pois a carga horária implica bastante na aprendizagem
Participante 6	Sim. Pois a prática dá uma visão muito mais ampla da teoria, é possível visualizar o que você estava aprendendo e isso te dá um maior entendimento sobre o assunto.
Participante 7	Sim, a falta de carga horária prática pode implicar prejuízos significativos no processo de aprendizagem. A experimentação e a prática são essenciais para validar e concretizar os conhecimentos adquiridos de forma teórica.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

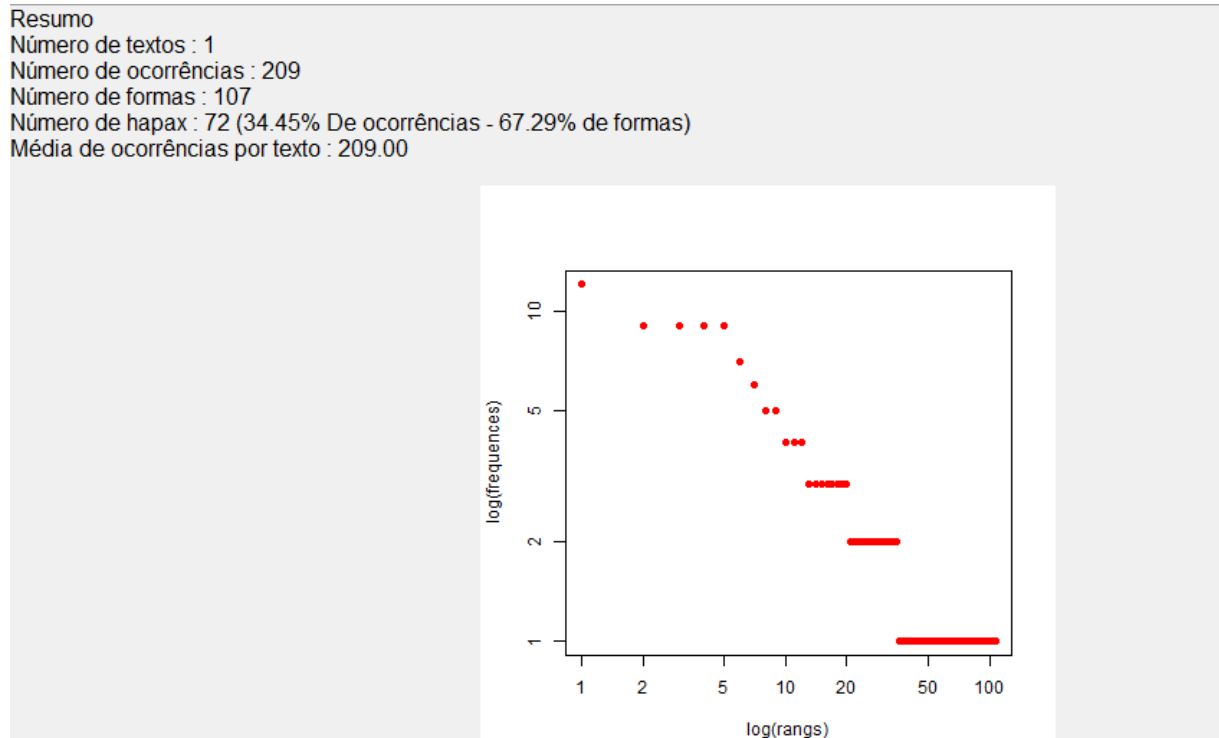
Quando analisamos as respostas dos discentes notamos que, na percepção deles, a carga horária prática é essencial para o aprendizado eficaz de química. Os principais pontos destacados são:

1. Integração entre teoria e prática: na percepção do Participante 4, a ausência de atividades práticas limita a capacidade dos alunos de conectar teoria com a realidade, o que compromete o entendimento e a aplicação dos conceitos. O discente denota que a teoria sem a prática pode ser abstrata e difícil de compreender.
2. Importância da prática para afixação: no discurso proferido pelos Participante 1, Participante 2 e Participante 6 denotam a facilidade de aprender quando podem ver a teoria sendo aplicada de maneira prática, o que reforça o entendimento e a memorização dos conceitos.
3. Excesso de teoria: o Participante 3 denota que o excesso de teoria sem a devida prática pode confundir os discentes e dificultar a aprendizagem, pois eles não conseguem visualizar o impacto dos conceitos na prática.
4. Desenvolvimento de habilidades técnicas: na fala de alguns participantes (Participante 4 e Participante 7) a prática é vista como essencial para o desenvolvimento de habilidades técnicas, que são fundamentais para a formação de profissionais bem-preparados. A falta de atividades práticas pode resultar em uma compreensão superficial do conteúdo.
5. Impacto na formação completa: no discurso do Participante 4 integrar atividades práticas ao ensino de química não só melhora a compreensão dos conceitos, mas também torna o aprendizado mais significativo, promovendo uma formação mais completa e enriquecedora.

Desse modo, é amplamente reconhecido pelos participantes que a carga horária prática deve ser ajustada para garantir que os alunos não apenas adquiram conhecimento teórico, mas também validem e consolidem por meio da experimentação e da aplicação prática dos conteúdos.

Quando os discursos dos discentes questionados é interpretado pelo *software* IRAMUTEQ, Gráfico 29, nos retorna uma coerência nas respostas, pois o número de hápax dado (34,45%) condiz com um discurso muito coeso por parte dos participantes.

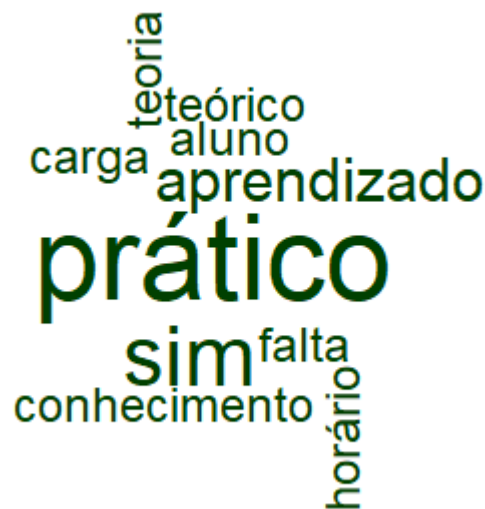
Gráfico 29 – número de hápax quanto ao questionamento sobre a carga horária experimental.



Fonte: IRAMUTE (2024).

As respostas têm várias palavras conectivas em comum que foram analisadas pelo programa e retornaram sob a forma de uma nuvem de palavras, como mostra a Figura 14.

Figura 14– nuvem de palavras dos termos mais comuns encontrados nos discursos dos discentes.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 22, traz as respostas dos discentes quando questionados sobre a utilização de experimentos em sua futura prática docente. As respostas obtidas a partir da seguinte pergunta: *Quando possível, a fim de verificar o processo de uma aprendizagem significativa, docentes realizam uma demonstração dos conceitos estudados fora do ambiente da sala de aula. Em sua futura prática docente, ao fazê-lo, você sente que esta exemplificação torna o aprendizado mais atraente para o educando? Justifique.*

Quadro 22 – respostas dos discentes quanto sua prática docente futura e o uso da experimentação.

Participante 1	Sim, como eu disse a maioria dos alunos tem maior facilidade em aprender os conteúdos quando se é mostrado de forma prática, isso os torna mais interessante e atrativo para os alunos
Participante 2	Sim, pois se torna um aprendizado menos monótono. Logo se torna mais atrativo para o aprendizado dos discentes.
Participante 3	Sim
Participante 4	Sim, exemplificar conceitos fora da sala de aula torna o aprendizado mais atraente, pois conecta a teoria ao mundo real, engaja os alunos, estimula sentidos e habilidades práticas e promove senso crítico. Isso enriquece o aprendizado, tornando-o mais dinâmico e significativo.
Participante 5	Sim, estudar fora da sala de aula torna alguns assuntos mais práticos de serem aprendidos
Participante 6	Sim. Pois estimula o envolvimento dos alunos de diversas maneiras.
Participante 7	Sim, acredito que realizar demonstrações dos conceitos estudados fora do ambiente da sala de aula pode tornar o aprendizado mais atraente e significativo para o educando. Ao levar os alunos a vivenciarem a aplicação prática de conceitos em contextos reais, seja em laboratórios, visitas a empresas, ou até mesmo em atividades cotidianas, é possível despertar o interesse e a curiosidade dos alunos

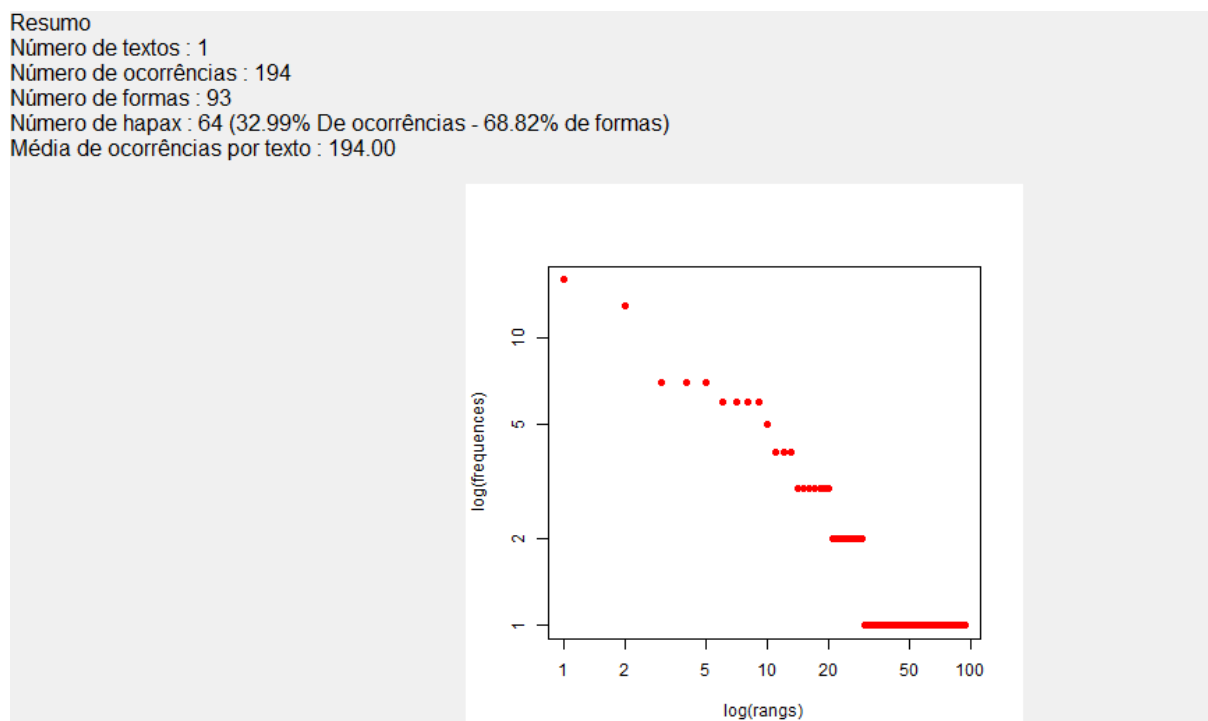
Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas dos discentes participantes podemos perceber que a maioria reconhece a importância da experimentação e da prática no processo de ensino e aprendizagem, enfatizando que isso torna os conteúdos mais interessantes, engajadores e significativos. Na fala de alguns deles (Participante 1 e Participante 2) a experimentação torna o aprendizado menos monótono e mais envolvente o que facilita a compreensão dos alunos e desperta maior interesse pelos conteúdos. Já para outra parcela dos discentes que participaram da pesquisa (Participante 4 e Participante 7) a utilização dos conceitos fora do ambiente de sala de aula e o processo de conexão com situações reais, seja por meio de atividades práticas ou exemplificações, torna o aprendizado mais dinâmico e significativo. Isso permite que os alunos vejam as aplicações práticas dos conceitos que estudam na teoria.

Na percepção dos discentes a experimentação também estimula o desenvolvimento de habilidades práticas e promove o senso crítico dos alunos (Participante 4), envolve os alunos de diferentes maneiras que estimulam os sentidos e as habilidades, resultando em um aprendizado mais sólido e diversificado (Participante 6).

Quando realizamos a análise dos discursos dos discentes pelo programa IRAMUTEQ, Gráfico 30, nos retorna um número de hápax (32,99%) que denota um discurso coeso por parte dos discentes, ou seja, em suma, os discentes acham que a experimentação é importante para uma prática docente efetiva.

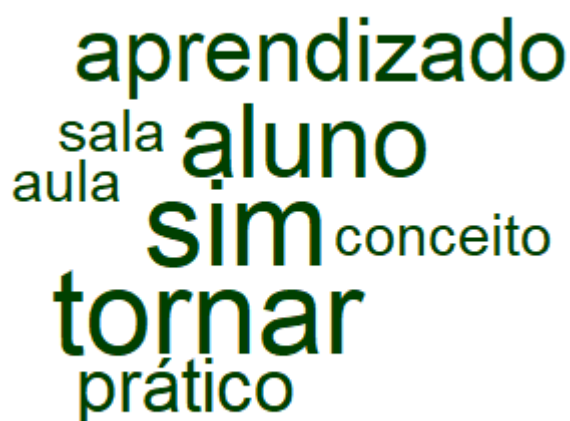
Gráfico 30 – análise do programa IRAMUTEQ sobre o discurso dos participantes da pesquisa quando questionados sobre a utilização da experimentação em sua prática docente.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O programa ainda foi capaz de construir uma nuvem de palavras, Figura 15, com os termos mais utilizados pelos discentes, termos esses que denotam a importância da experimentação em suas futuras práticas docentes.

Figura 15 – nuvem de palavras gerada pelo software quanto aos termos mais utilizados pelos discentes em suas respostas.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 23 traz as respostas dos discentes quando questionados sobre a utilização da modelagem matemática para validar conceitos químicos, como por exemplo os mecanismos de substituição bimolecular. As respostas foram obtidas com base na seguinte pergunta: *A Teoria do Estado de Transição trabalha aspectos de modelagem matemática para a elaboração de diagramas de energia livre em reações do tipo SN2. Na sua opinião, a utilização da modelagem matemática para validar o mecanismo proposto pelo discente poderia ser uma ferramenta positiva ou negativa no processo de aprendizagem?*

Quadro 23 – respostas dos discentes sobre a utilização da modelagem no aprendizado de química.

Participante 1	A utilização da modelagem matemática para validar o mecanismo proposto pelo discente em reações do tipo SN2 pode ser uma ferramenta positiva no processo de aprendizagem.
Participante 2	Positiva
Participante 3	Sim, pois a matemática por si só já embasa muitos outros conteúdos na área de exatas.
Participante 4	A modelagem matemática para validar mecanismos, como em reações SN2, é uma ferramenta positiva no aprendizado, pois facilita a compreensão visual dos conceitos, desenvolve o pensamento crítico, integra teoria e prática, promove o aprendizado ativo e prepara os alunos para desafios acadêmicos e profissionais.
Participante 5	Positiva
Participante 6	Positiva. Pois contribui tanto para a compreensão dos conceitos quanto para o desenvolvimento de habilidades analíticas e práticas.
Participante 7	A utilização da modelagem matemática para validar o mecanismo de reações SN2 é uma ferramenta positiva no aprendizado. Ela permite que os alunos compreendam conceitos teóricos de forma concreta, visualize como fatores afetam a reação e testem hipóteses de maneira prática, tornando o conteúdo mais interessante e relevante.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

A maioria dos participantes concorda que a utilização da modelagem matemática na validação de conceitos químicos é uma abordagem positiva e vantajosa no processo de aprendizado, no discurso de alguns discentes (Participante 1 e Participante 7), a modelagem matemática permite aos alunos a visualização e a compreensão de maneira mais concreta os conceitos químicos, para o caso exemplificado na pergunta (reações do tipo SN2) facilitaria a conexão entre a teoria e a prática, tornando o aprendizado mais acessível e tangível. Alguns ainda descrevem

que o uso da modelagem matemática também ajuda a desenvolver habilidades analíticas, o que é essencial para a formação de um pensamento crítico e para a resolução de problemas complexos (Participante 4 e Participante 6).

Alguns discentes, Participante 4 e Participante 7, percebem que a utilização de ferramentas de modelagem matemática valida conceitos químicos, como mecanismos de reação, dessa forma ocorre uma integração entre teoria e prática, promovendo uma aprendizagem mais significativa e prática. O Participante 4 ainda propõe que a modelagem matemática prepara os alunos para desafios acadêmicos e profissionais, ajudando-os a aplicar os conceitos aprendidos de forma mais prática e eficiente. Outro ponto de vista levantado pelo Participante 7 é de que a abordagem de utilizar a modelagem matemática torna o conteúdo mais interessante e relevante para os alunos, já que pode ocorrer o teste de hipóteses e visualizar os efeitos de diferentes fatores na reação química.

Desse modo, a utilização da modelagem matemática para validar os conceitos químicos é vista como uma poderosa ferramenta que não apenas facilita a compreensão, mas também promove o desenvolvimento de habilidades analíticas e prepara os alunos para os desafios acadêmicos e profissionais. Pois, percebemos isso quando analisamos os discursos por meio do programa IRAMUTEQ, o *software* nos retorna, como se vê no Gráfico 31, um número de hápax (35,12%) condizente com um discurso coeso por parte dos discentes.

Gráfico 31 – número de hápax referente ao discurso dos discentes sobre a utilização de modelagem matemática.

Resumo

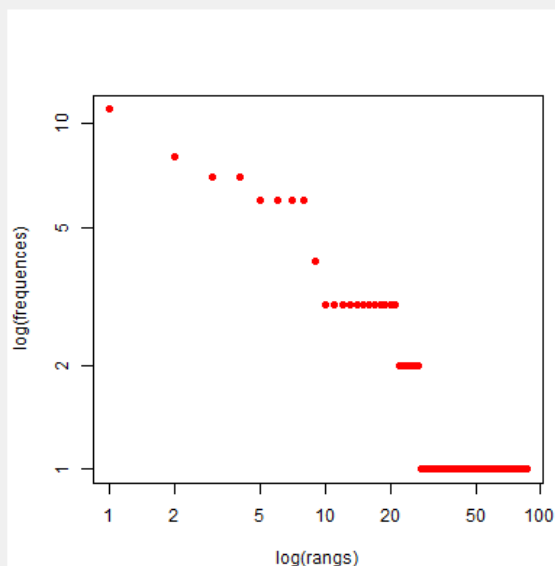
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 168

Número de formas : 86

Número de hapax : 59 (35.12% De ocorrências - 68.60% de formas)

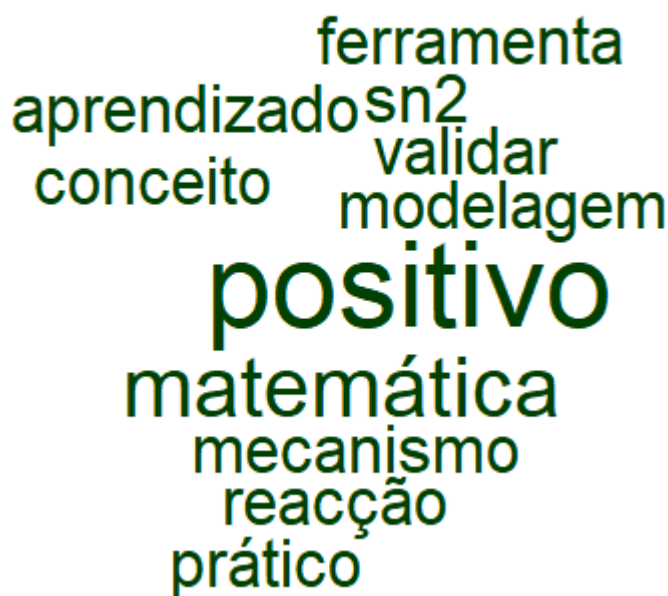
Média de ocorrências por texto : 168.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

Tal homogeneidade discursiva reflete na capacidade do *software* de gerar uma nuvem de palavras com os termos mais utilizados pelos discentes. Como podemos perceber na Figura 16 há uma relevância em algumas palavras expressadas nos discursos dos discentes.

Figura 16 – nuvem de palavras referentes ao uso da modelagem matemática.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 24 traz consigo as respostas dos discentes quando questionados sobre a importância da Mecânica Quântica (MQ) como uma ferramenta de apoio no processo de aprendizado de química. As respostas foram obtidas por meio da seguinte pergunta: *A Mecânica Quântica (MQ) é uma ferramenta muito utilizada fora do País para na realização de estudos envolvendo Química Orgânica. Em algumas literaturas, os aspectos quânticos são levados em consideração para aprofundar os estudos sobre as interações eletrônicas que ocorrem entre as espécies químicas de um sistema. Qual sua opinião sobre a utilização de conceitos voltados à MQ como ferramenta de apoio ao estudo de Química, facilitaria ou prejudicaria o processo de aprendizagem dos discentes? Justifique.*

Quadro 24 – respostas dos discentes quando questionados sobre o uso da Mecânica Quântica como ferramenta de apoio ao aprendizado de química.

Participante 1	Na minha opinião, a utilização de conceitos voltados à Mecânica Quântica (MQ) como ferramenta de apoio ao estudo de Química pode facilitar significativamente o processo de aprendizagem dos discentes, desde que aplicada de forma gradual e integradora
-----------------------	---

Participante 2	Pode facilitar e prejudicar dependendo da forma como é introduzida e aplicada
Participante 3	Sim. Uma complementa a outra.
Participante 4	A utilização da Mecânica Quântica (MQ) na Química Orgânica pode ser benéfica, pois aprofunda o entendimento das interações eletrônicas, desenvolve habilidades analíticas e integra teoria e prática. Ela ajuda a explicar fenômenos complexos que a Química clássica não aborda. Contudo, sua complexidade pode ser desafiadora para iniciantes, sendo essencial uma introdução gradual e bem contextualizada. Quando aplicada corretamente, a MQ facilita o aprendizado e oferece uma visão mais completa dos fenômenos químicos.
Participante 5	Facilitaria
Participante 6	Facilitaria. Pois se for ensinado de maneira correta, o entendimento da Mecânica Quântica, por ser uma ciência está bastante ligada aos estudos atômicos, pode facilitar o entendimento das interações moleculares.
Participante 7	A Mecânica Quântica pode ser facilitadora ao aprofundar o entendimento das interações moleculares, mas também pode ser desafiadora sem uma base sólida em física e matemática, tornando o aprendizado mais abstrato.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Ao analisarmos as respostas dos discentes, percebemos que a maioria reconhece que a Mecânica Quântica (MQ) pode ser usada como uma ferramenta facilitadora no aprendizado de química, desde que seja aplicada de maneira adequada. Para alguns participantes a introdução gradual da MQ com uma contextualização cuidadosa, pode facilitar a compreensão dos discentes. A aplicação integradora, onde a MQ, complementa os conceitos químicos também é considerada vantajosa (Participante 1, Participante 4 e Participante 6).

Outro grupo, formado pelos Participante 4, Participante 6 e Participante 7, destaca que a utilização da MQ ajuda a aprofundar o entendimento das interações eletrônicas e moleculares, oferece uma visão mais detalhada e completa dos

fenômenos químicos, facilitando o entendimento das reações e propriedades das substâncias. O Participante 7 reforça que, apesar dos benefícios, a complexidade existente na MQ pode ser bastante desafiadora, especialmente para iniciantes, e sua aplicação sem base sólida de física e matemática pode tornar o aprendizado mais abstrato e difícil.

Em concordância com os argumentos do Participante 7, o Participante 2 implica que a aplicação correta da MQ pode ser muito útil, mas isso depende da forma como será introduzida. Pois, se for mal aplicada, pode prejudicar a aprendizagem, já que exige uma compreensão prévia de conceitos mais complexos.

Desse modo, na percepção dos discentes a utilização da MQ é considerada uma excelente ferramenta para aprofundar a compreensão de fenômenos atômicos e moleculares, mas é importante que o seja feito de maneira gradual. Isso reflete no número de hápax (37,62%) presente no Gráfico 32 referentes aos discursos dos participantes que, mesmo que concordem com a ideia de que a MQ é uma ferramenta didática a ser utilizada no aprendizado de química, a homogeneidade do discurso se estende também para a forma como esta aplicação deve ser feita.

Gráfico 32 – número de hápax quanto as respostas dos discentes sobre a utilização da Mecânica Quântica como ferramenta de aprendizado em química.

Resumo

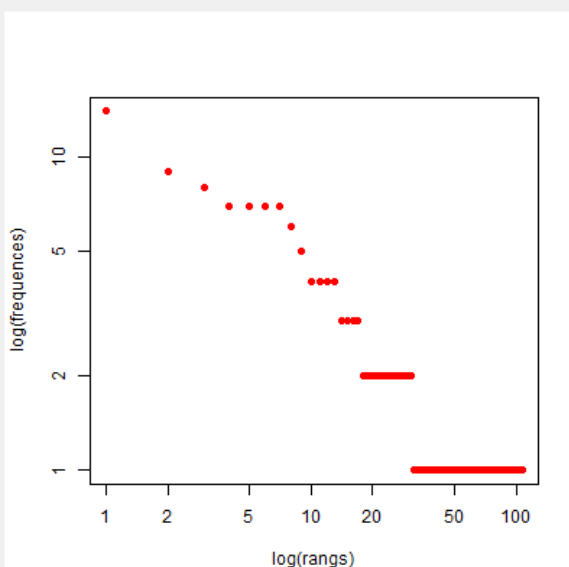
Número de textos : 1

Número de ocorrências : 202

Número de formas : 107

Número de hapax : 76 (37.62% De ocorrências - 71.03% de formas)

Média de ocorrências por texto : 202.00



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O programa IRAMUTEQ ainda conseguiu elaborar uma nuvem de palavra (Figura 17) com os termos mais utilizados pelos discentes, denotando a importância da utilização da MQ.

Figura 17 – nuvem de palavra com os termos relevantes nas respostas dos discentes referentes à Mecânica Quântica.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O Quadro 25 contém as respostas dos discentes quando questionados sobre a utilização da Teoria Funcional da Densidade (TFD) como ferramenta a ser utilizada no aprendizado de química tendo em vista que esta técnica permite o usuário visualizar diversas propriedades físicas pertinentes as propriedades da matéria. A pergunta realizada foi: *A Teoria Funcional da Densidade (TFD) utiliza funcionais para calcular parâmetros termodinâmicos em sistemas atômicos/moleculares o que facilita muito o estudo, por parte dos químicos teóricos e computacionais, sobre aspectos que regem o comportamento da matéria e a movimentação dos elétrons de uma espécie química para outra. Na sua opinião, a utilização dos resultados obtidos por meio da TFD como, por exemplo, mapa de potencial eletrostático, poderiam acarreta em benefícios para o aprendizado em, por exemplo, mecanismos de reações orgânicas? Justifique.*

Quadro 25 – respostas dos discentes quanto ao uso da TFD no aprendizado de química

Participante 1	Sim, a utilização dos resultados obtidos por meio da Teoria Funcional da Densidade (TFD), como o mapa de potencial
-----------------------	--

	eletrostático, pode acarretar benefícios significativos para o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas.
Participante 2	Sim a TDF pode trazer grandes benefícios para o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas
Participante 3	Sim, pois essa exemplificação tornaria mais fácil a compreensão do aluno.
Participante 4	A utilização da Teoria Funcional da Densidade (TFD), como mapas de potencial eletrostático, beneficia o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas ao ajudar a visualizar interações moleculares, identificar regiões reativas e entender o movimento dos elétrons durante as reações. Isso melhora a compreensão dos mecanismos e aproxima os alunos de abordagens modernas de pesquisa, desenvolvendo também habilidades analíticas e críticas essenciais para o estudo de Química.
Participante 5	<i>Optou por não responder</i>
Participante 6	Sim. Pois a TFD, ao fornecer uma maneira de descrever a distribuição de densidade eletrônica e as interações entre átomos e moléculas, permite uma compreensão mais aprofundada dos fatores que influenciam a reatividade química.
Participante 7	Sim, a utilização da TFD, como mapas de potencial eletrostático, pode beneficiar o aprendizado de mecanismos de reações orgânicas. Esses mapas ajudam a visualizar as interações entre moléculas, como a distribuição de cargas e o ataque de nucleófilos, tornando os conceitos de reatividade e transição mais claros e conectados à prática.

Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

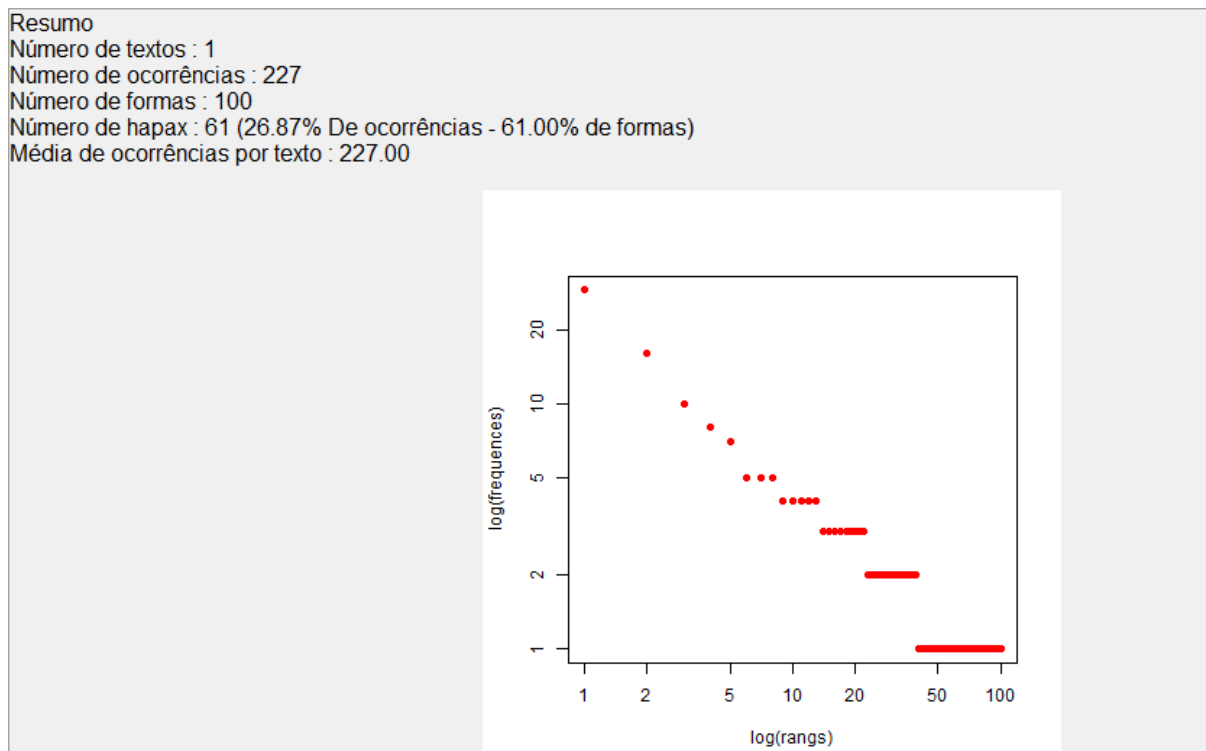
Ao analisarmos as respostas dos discentes notamos que a maioria deles vê o uso da TFD como uma poderosa ferramenta para o aprendizado de química, em especial, os mecanismos de reações orgânicas (exemplo didático utilizado na formulação da pergunta), especialmente devido à sua capacidade de visualizar interações moleculares e entender a dinâmica dos elétrons nas reações. Para um grupo, composto pelos seguintes membros Participante 1, Participante 4 e Participante 7, o uso de mapas de potencial eletrostático e outros resultados da TFD

ajuda os alunos a visualizarem melhor as interações moleculares, com a distribuição de cargas e as regiões reativas, o que facilita a compreensão dos mecanismos de reação e das propriedades das substâncias.

Outro grupo (Participante 6 e Participante 7) crê que a TFD permite aos alunos entenderem melhor os fatores, como, por exemplo, a densidade eletrônica influenciam a reatividade química e as interações entre átomos e moléculas. Isso aprofunda a compreensão dos alunos sobre como e porque certas reações ocorrerem. Na visão de alguns discentes a TFD torna os conceitos de reatividade e transição de estados, mais claro e acessíveis, ajudando os alunos a entenderem como os elétrons se movem durante as reações e como diferentes regiões da molécula reagem de maneira distinta (Participante 3 e Participante 7).

Desse modo, a TFD é vista como uma ferramenta que pode enriquecer o aprendizado, oferecendo uma compreensão mais detalhada dos mecanismos de reação orgânica e preparando os discentes para se aproximarem das tecnologias e metodologias avançadas da pesquisa em química. Percebemos também a coesão dos discentes em suas respostas ao analisarmos as respostas no programa IRAMUTEQ, pois conforme o Gráfico 33, abaixo, o número de hápax denota uma fala homogênea por parte dos participantes desta pesquisa.

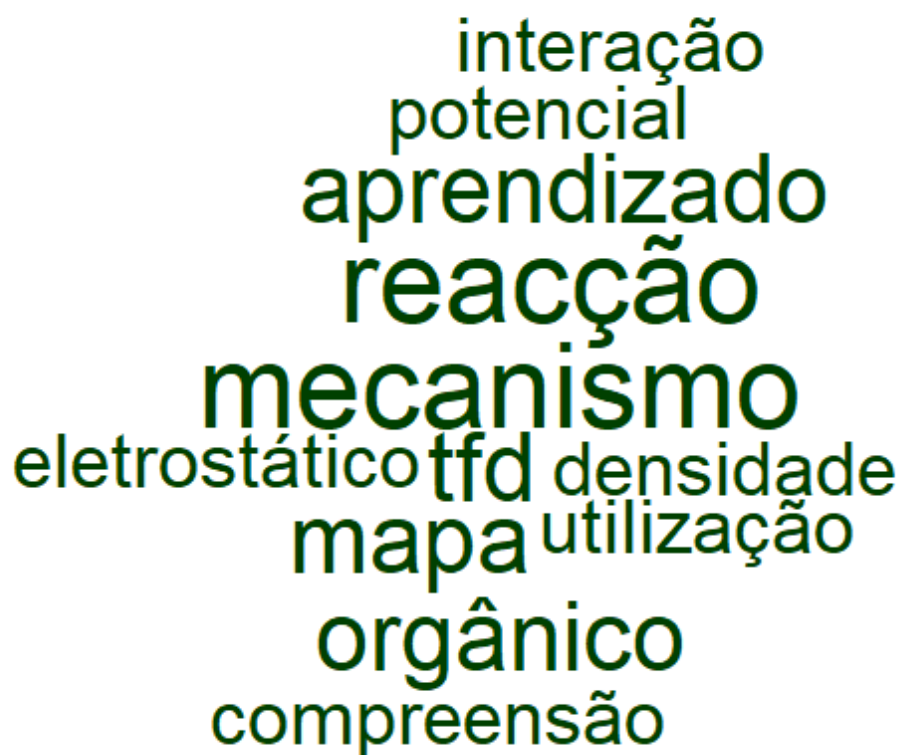
Gráfico 33 – número de hápax referente ao uso da TFD como ferramenta de aprendizado em química.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O programa ainda foi capaz de realizar uma análise dos termos mais utilizados pelos discentes ao responderem a pesquisa, Figura 18, denotando assim uma real importância para a utilização da Teoria Funcional da Densidade como uma ferramenta a ser utilizada para o aprendizado de química no ensino superior.

Figura 18 – nuvem de palavras dos termos mais utilizados quando questionados sobre a utilização da Teoria Funcional da Densidade como ferramenta utilizada no aprendizado de química no ensino superior.



Fonte: IRAMUTEQ (2024).

O cenário existente nos discursos dos discentes nos períodos do pré e pós teste consiste em uma similitude das respostas isso denota a importância de repensar em novas estratégias metodológicas para o ensino de química no ensino superior.

4.6 Pesquisa de satisfação quanto ao conteúdo programático da intervenção didática

Os resultados abaixo se referem quanto a satisfação dos discentes participantes da pesquisa no que tange ao conteúdo teórico/prático abordado na intervenção didática realizada pelo pesquisador. O Gráfico 34, a seguir, contém as informações quanto ao nível de satisfação dos discentes.

Gráfico 34 – nível de satisfação dos discentes

Dentro da aplicação do curso ofertado, como você se encontra?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

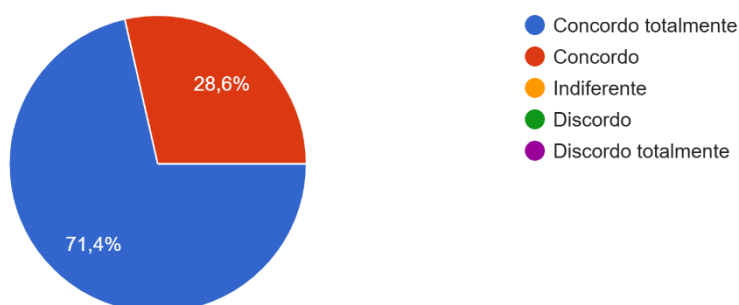
Os sete (100%) dos participantes dizem estar muito satisfeito com a aplicação da intervenção didática (curso) aplicada pelo pesquisador desta pesquisa. Não houve participantes que marcaram outros pontos da escala likert disponibilizada.

O Gráfico 35 contém as respostas referente à utilização da Química Computacional como ferramenta didática utilizada para o aprendizado de química no ensino superior.

Gráfico 35 – a utilização da Química Computacional como ferramenta didática.

Sobre a utilização da Química Computacional, você acredita que tenha sido ferramenta didática proveitosa para o aprendizado de conteúdos de Química?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

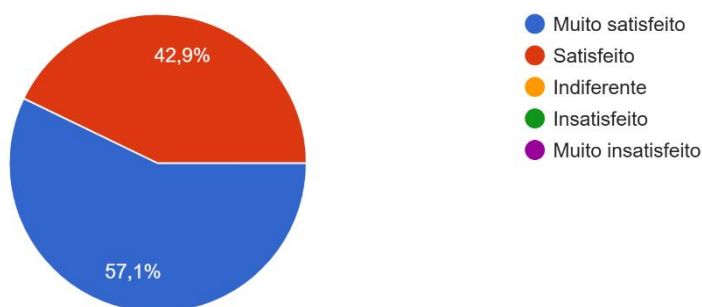
Quanto a utilização da Química Computacional como ferramenta didática para o aprendizado de química no ensino superior cinco participantes (representados por

71,4% do universo da pesquisa) diz que concorda totalmente que os métodos e técnicas utilizadas em Química Computacional podem ser utilizados como um aporte didático para o aprendizado de química; e, dois participantes (representando 28,6%) concorda totalmente.

Abaixo, encontra-se o Gráfico 36 com a percepção dos discentes quanto ao conteúdo de Mecânica Quântica abordado pelo pesquisador para a construção de uma base sólida, mesmo que não tão aprofunda (pois, devido ao universo da pesquisa não ser tão extenso, levou-se em consideração os níveis de dificuldade individual de cada discente participante).

Gráfico 36 – percepção dos discentes quanto ao conteúdo de Mecânica Quântica abordada na intervenção.

Com relação conteúdo programático sobre mecânica quântica aplicada à Química você se sente:
7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

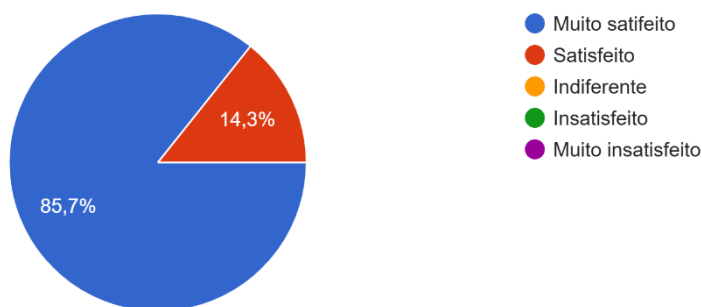
Dentro do universo da pesquisa, quatro participantes (representados por 57,1%) se dizem muito satisfeitos com o conteúdo programático abordado e, o restante dos participantes, 3 indivíduos, 42,9%, marcaram a opção de que ficaram satisfeitos com o conteúdo abordado.

O Gráfico 37, aborda as respostas dos discentes quanto a possibilidade de métodos computacionais fazerem parte do currículo acadêmico do curso de Licenciatura em Química do *Campus* na qual a pesquisa foi realizada, a pergunta foi realizada de modo a saber se, com a implementação de uma grade curricular com a disciplina curricular de Química Computacional os discentes iriam se sentir satisfeitos ou não.

Gráfico 37 – respostas dos discentes quando questionados sobre a implementação de uma disciplina de Química Computacional na grade curricular de seu curso superior.

Considerando que a Teoria Funcional da Densidade pode ser aplicada em outras áreas de estudo em Química (Astroquímica, Físico-Química, Química...em Química devido a sua aplicabilidade didática?

7 respostas



Fonte: Elaborado pelo autor (2024).

Percebemos pelo Gráfico 37 que seis participantes (representados por 85,7%) se mostram muito satisfeitos com a possibilidade de uma disciplina que envolva conceitos de Química Computacional em sua grade curricular; um participante (14,3%) se mostra satisfeito com a possibilidade.

Os resultados apresentados nesta dissertação trouxeram à tona os seis prismas que foram definidos como objetivos periféricos da pesquisa. Inicialmente, foi investigado o perfil socioeconômico dos alunos participantes, fornecendo uma visão sobre o contexto social e econômico dos discentes. Em seguida, o estudo abordou as noções prévias dos estudantes sobre Química, analisando seu conhecimento inicial sobre o tema. Outro aspecto importante foi a aplicação da Teoria Funcional da Densidade nos mecanismos de reação orgânica, explorando suas implicações teóricas. Além disso, foram observados os aspectos antes e após a intervenção didática, avaliando os efeitos dessa ação pedagógica. Finalmente, a pesquisa também considerou o nível de satisfação dos discentes envolvidos no processo, fornecendo uma visão ampla sobre os impactos da intervenção.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Atualmente, não há cursos no Estado do Ceará que a nível de Graduação na modalidade de Licenciatura em instituições públicas de ensino abordem as aplicações da Química Computacional como uma ferramenta pedagógica para uma abordagem mais empírica de conteúdos mais complexos, contribuindo assim para uma formação docente que se paute em uma perspectiva TDIC. Desse modo, esta dissertação se propôs a contribuir com as investigações pertinentes ao Ensino de Química a nível superior, às gnosiologias científicas que estão incorporadas no processo de aprendizagem, às perspectivas de formação inicial docente envolvendo a abordagem TDIC por meio de uma ferramenta didática funcional, a Química Computacional. Para tanto, foi-se idealizado uma atividade pedagógica que se compôs por etapas que consumaram nas análises específicas sobre a utilização da Química Computacional como ferramenta didática e o processo de aprendizagem sobre conteúdos de Química desenvolvido por estudantes do 1º semestre do curso de Licenciatura em Química.

Esta obra teve como objetivo geral, analisar a utilização de ferramentas de Química Computacional como aparelho pedagógico baseado em uma perspectiva TDIC e sua contribuição para aprendizagem de Química na formação inicial docente com estudantes da disciplina de Química Geral I de uma turma de 1º semestre do Curso Superior de Licenciatura em Química do Instituto Federal do Ceará – *Campus* Maracanaú. Desse modo, salienta-se que os prismas de pesquisa contemplaram os achados que atenderam aos objetivos específicos estipulados no início desta dissertação.

A ascensão de uma aprendizagem integral e contextualizada em Química foi viabilizada por meio de uma atividade que circundou o tópico de introdução à Química Computacional aplicada com foco em aplicações direta das técnicas numa perspectiva TDIC para discentes do 1º semestre do Curso Superior de Licenciatura em Química do Instituto Federal do Ceará. Tal processo contou com um minicurso de aulas expositivas, momento dialético de discussões, elaboração de projeto voltado a utilização das técnicas utilizadas em Química Computacional e apresentação de um projeto na qual os discentes apresentavam soluções para um problema de cunho químico. Com isso, nota-se, sustentado nas respostas fornecidas pelos discentes obtidas nos questionários aplicados, que as técnicas empregadas foram satisfatórias e que isso lhes deu assistência no processo de aprendizagem.

As percepções individuais prévia dos discentes sobre os entraves na disciplina de química no ensino superior foram descritas, notou-se, pelas respostas obtidas pelos educandos que, linguagem técnica, aplicação da linguagem matemática, e metodologias de ensino ultrapassadas são, na percepção dos alunos, os principais motivos de seus entraves na disciplina de química. Por estarem em curso superior de química, os discentes mostram uma afinidade com a Ciência, mas a afinidade se mostrava frágil devido as dificuldades supracitadas. Desse modo, os discentes mostraram interesse na aplicação de novas metodologias de ensino. Em verdade, ao fim das intervenções, os discentes demonstraram satisfação com a metodologia adotada e sua empregabilidade com uma abordagem TDIC demonstrando bom desempenho quanto as compreensões pertinentes à Mecânica Quântica e Teoria Funcional da Densidade.

De modo geral, o autor desta obra, apoiado nos resultados alcançados pelos discursos dialéticos decorrentes dos questionários aplicados, valida que a utilização de técnicas de Química Computacional com uma abordagem TDIC pôde contribuir de modo considerável com o aprendizado, de modo particular quanto a criticidade intelectual, dos discentes em questão, pois os métodos abordados lhes deram significados novos de conhecimentos prévios estabelecidos quanto à ciência Química.

Por fim, destaca-as que as implicações atingidas por esta obra investigativa defende que futuros trabalhos de pesquisa que façam alusão a TDIC ou a utilização de Química Computacional (ambas em âmbito de ensino superior, na formação docente) e suas abordagens pedagógicas, sejam no Instituto Federal do Ceará ou em quaisquer instituições de ensino superior nacional ou estrangeira, realizem críticas que impliquem quanto à conteúdos químicos mais específicos com a utilização de metodologias de ensino favoráveis a aprendizagem crítica e ativa do indivíduo. Além disso, ressalta-se que o processo de aprendizado dos discentes na contemporaneidade está intimamente ligada às tecnologias digitais, tais relações se mostram cada vez mais fortes devido ao rápido processo de avanço tecnológico. Desse modo, sugere-se que as metodologias de ensino precisam ser tão fluidas quanto o avançar das novas tecnologias e que lhe sirvam de subsídio para um aprendizado integral, crítico e contextualizado no Ensino de Química.

REFERÊNCIAS

ALVES, J. A. P.; MION, R. A.; CARVALHO, W. L. P. Implicações da relação Ciência Tecnologia-Sociedade-Ambiente na formação de professores de física. In: Simpósio Nacional em Ensino de Física. **Anais**. São Luís: CEFET, 2007. Disponível em: <https://sec.sbfisica.org.br/eventos/snef/xvii/atas/resumos/T0247-1.pdf>. Acesso em: 23 mar. 2023.

ATKINS, P. & JONES, L. **Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. Editora Bookman. Tradução: Ricardo Bicca de Alencastro. 3ª edição. 2006.

ALVES, N. B., SANGIOGO, F. A., PASTORIZA B. S. Dificuldades no ensino e na aprendizagem de Química Orgânica do Ensino Superior - estudo de caso em duas Universidades Federais. **Química Nova [on-line]**. Vol. 44, No. 6, 773-782, 2021. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/nVYznd5mkSqkm4DfsDrWB8J/#>. Acesso em: 22 ago. 2023.

AUSUBEL, D.P. (1963). **The psychology of meaningful verbal learning**. New York, Grune and Stratton.
BRAGA, J. P. & CARVALHO, F. S. **Métodos Numéricos em Química Quântica**. São Paulo. Livraria da Física, 2022.

BOYCE, W. E.; DiPRIMA, R. C. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno**. Editora LTC. Tradução: Valéria de Magalhães Iório. 1ª edição. 2010.

CARVALHO, A. M. P. de, GIL-PÉREZ, D. **Formação de professores de ciências**. São Paulo: Cortez, 1993

COSTA, D. G. S.; SCHAPPO, M. G. Mecânica Quântica no Ensino de Química: Comparação entre Tópicos do Livro Didático e da Formação de Professores. Exatas online. Vol. 12. N.2. nov. 2021. p. 129-139. Disponível em: https://wiki.sj.ifsc.edu.br/images/1/1c/Artigo_DeniseV12N2pag129-139_%281%29.pdf. Acesso: 15 de ago. 2023.

CRESWELL, J. W. **Research design: qualitative, quantitative, and mixed methods approaches**. Thousand Oaks, California: Sage, 2009.

FARAOU JÚNIOR, D. P.; CIRINO, M. M. Utilização das TIC no ensino de química durante a formação inicial. **Revista de Debates em Ensino de Química**, v. 2, n. 2, p. 102-113, 2016. Disponível em: <http://www.journals.ufrpe.br/index.php/REDEQUIM/article/download/1319/1078>. Acesso em 12 dez. 2024.

FIRMINO, E. S., *et. al.* Uso do software Avogadro no ensino de cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE). **ENCITEC** – Santo Ângelo – Vol. 10, n. 2., p. 67-77, mai/ago 2020. Disponível em: <https://srvapp2s.santoangelo.uri.br/seer/index.php/encitec/article/view/3026>. Acesso em: 29 abr. 2025.

GABINI, W. S.; DINIZ, R. E. S. Os professores de química e o uso do computador em sala de aula: discussão de um processo de formação continuada. **Ciência & Educação**, v. 15, n. 2, p. 343-358, 2009. Disponível em: <https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwj7ptD3ps-OAxVGppUCHaWaD5sQFnoECBgQAQ&url=https%3A%2F%2Fwww.scielo.br%2Fj%2Fciedu%2Fa%2FhxgMD7DwGppzSMGWmrDNvmL%2F%3Flang%3Dpt&usg=AOvVaw0rrNer-13Be-aNymDxuKDs&opi=89978449>. Acesso 12 dez. 2024.

GOIS, J. TIC como ferramenta cultural no ensino superior em química. **# Tear: Revista de Educação Ciência e Tecnologia**, v.9, n.2, 2020. Disponível em: https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwjghKvxo8-OAxXgr5UCHeOoOEAAQFnoECBUQAQ&url=https%3A%2F%2Fperiodicos.ifrs.edu.br%2Findex.php%2Ftear%2Farticle%2Fview%2F4106&usg=AOvVaw0BjKHlv02sl9owR5QO_RYF&opi=89978449. Acesso em 12 dez. 2024.

IUPAC. Glossary of terms used in computational drug design. *Pure&Appl. Chem.*, Vol. 69, No. 5, pp. 1137-1152, 1997. Printed in Great Britain. Disponível em: <https://old.iupac.org/publications/pac/1997/pdf/6905x1137.pdf>. Acesso em 17 ago. 2023

LACERDA, J. R. L., REIS, R. P. & SANTOS, M. A. B. Utilização de produtos naturais da região do Xingu-PA em experimentos didáticos para o ensino de química orgânica.

Scientia Plena. 2016, vol. 12. Num.06. Disponível em: <https://www.scientiaplenu.org.br/sp/article/view/2995/1500>. Acesso em: 02 fev. 2024.

LEITE, B. S. **Tecnologias no ensino de química: teoria e prática na formação docente.** 1 ed. Curitiba: Appris, 2015.

LIMA, V. M. R.; HARRES, J. B. S.; PAULA, M. C. **Caminhos da pesquisa qualitativa no campo da educação em Ciências: pressupostos, abordagens e possibilidades.** Editora: EDIPUCRS, Porto Alegre, 2018.

LUDOVICO, F. M.; BARCELLOS, P. S. C. C. Momentos de reflexão docente frente à sociedade da informação: inventividade e produção de subjetividades. **#Tear: Revista de Educação, Ciência e Tecnologia**, v. 8, n. 2, p. 1-10, 2019. DOI: <https://doi.org/10.35819/tear.v8.n2.a3602>. Disponível em: <https://periodicos.ifrs.edu.br/index.php/tear/article/view/3602>. Acesso em 12 dez. 2024.

MARIANO, A. *et. al.* O Ensino de reações orgânicas usando química computacional: Reações de adição eletrofílicas a alquenos. **Quim. Nova**, Vol. 31, No. 5, 1243-1249, 2008. Disponível em: https://quimicanova.sbq.org.br/pdf/Vol31No5_1243_54-ED06465. Acesso: 18 ago. 2023.

MONTEIRO, S. A. **Estudo da dependência das probabilidades de recobrimento com métodos de química computacional: análise dos diferentes tipos de funcionais da densidade.** Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Estadual da Paraíba. Campina Grande, p. 64. 2023. Disponível em: <http://tede.bc.uepb.edu.br/jspui/handle/tede/4708>. Acesso: 05 de ago. 2023.

MORAIS, C. A. & JUNIOR, J. G. T. Reflexões sobre o ensino de cálculo diferencial e integral em cursos de graduação em química. **Revista Eletrônica de Divisão e Formação Docente.** V. 2, n. 1. 2014. Disponível em: <https://seer.ufu.br/index.php/diversapratica/article/view/28062>. Acesso: 15 de jul. 2023.

MOREIRA, M.A., CABALLERO, M.C. & RODRÍGUEZ, M.L. (orgs.) (1997). **Actas del Encuentro Internacional sobre el Aprendizaje Significativo.** Burgos, España. pp. 19-44

MOREIRA, M. A. **APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA: da visão clássica à visão crítica**. Profº. Marco Antônio Morera. Porto Alegre, 2006. p. Disponível em: <http://moreira.if.ufrgs.br/visaoclasicavisaocritica.pdf>. Acesso em: 25 jan. 2024

MOREIRA, M. A. & MASINI, E. A. S. (1982) **Aprendizagem significativa: a teoria de aprendizagem de David Ausubel**. São Paulo: Editora Moraes. 112 p.

MORGON, N. H. Computação em química teórica: informações técnicas. *Revista Química Nova*. Vol. 24. No. 5. 2001. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/LhPN9fRnR5tcZrdjXVnfYYp/?format=pdf&lang=pt>. Acesso: 10 de jul. 2023.

NAGEL, E. **The structure of science**. New York: Harcourt, 1961.

ORTEGA, P. F. R.; PIRES, N. J.; LIMA, C. P. O critério de Euler como ferramenta para o estudo e diferenciação entre funções de estado e variáveis de processo em termodinâmica química. *Química Nova*. Vol. 41., Nº 8, 2018. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/69RmgGc7BNy3pmXNkNvMkXD/?format=pdf&lang=pt>. Acesso: 18 de jul. 2023.

OLIVEIRA, D. A. B. & GOMES, V. B. Uma crítica ao reducionismo filosófico da Química à Mecânica Quântica como elemento fundamental para a formação do professor. *Ciência & Educação*, Bauru, v. 7. 2021. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/ciedu/a/46RHBdF34G5xrwPmrWjdGSw/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 25 de jul. 2023.

PEDROSA, M. S.; MAFRA, J. C. M.; SIQUEIRA, A. S. Uma proposta de modelagem matemática: prática de diluição contínua monitorada por espectrofotometria visível na motivação do ensino de equações diferenciais para alunos de química. *Revista de Educação, Ciências e Matemática*. V. 5., n.1, 2015. Disponível em: <http://funes.uniandes.edu.co/25856/1/Pedrosa2015Uma.pdf>. Acesso em: 18 de jul. 2023.

PERIN, E. S.; FREITAS, M. C. D.; ROBLES, V. C. Competências digitais de docentes na educação básica. **#Tear**: Revista de Educação, Ciência e Tecnologia, v. 8, n. 2, 2019. DOI: <https://doi.org/10.35819/tear.v8.n2.a3596>. Disponível em: <https://periodicos.ifrs.edu.br/index.php/tear/article/view/3596>. Acesso em: 12 dez. 2024.

POSTMAN, N. & WEINGARTNER, C. (1969). **Teaching as a subversive activity**. New York: Dell Publishing Co. 219p.

ROSA, R. C. et al. Análise Computacional do hidrocarboneto aromático policíclico antraceno e sua aplicação na astroquímica. *Cadernos de astronomia*. V.2, n. 2, 2021. Disponível em: <https://periodicos.ufes.br/astrologia/article/view/35751>. Acesso em 17 set. 2023.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química. **Revista Liberato**, [S. l.], v. 9, n. 12, p. 13–22, 2013. Disponível em: <https://revista.liberato.com.br/index.php/revista/article/view/123>. Acesso em: 8 maio. 2025.

RAUPP, D. T.; Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 2015.

REIS, R. S.; LEITE, B.; LEÃO, M. C. Percepções sobre a incorporação da TIC em cursos de licenciatura em química no Brasil. **Debates em Educação**, v. 11, n. 23, 2019. Disponível em: <http://www.seer.ufal.br/index.php/debateseducacao/article/view/5125>. Acesso em: 12 dez. 2024.

RICHARDSON, R. J. **Pesquisa social: métodos e técnicas**. Editora Atlas. 3ª edição. São Paulo. 1999.

SANTOS, E. T. Mobilidade digital no curso de pedagogia: o que pensam os docentes sobre o celular na sala de aula. **#Tear: Revista de Educação, Ciência e Tecnologia**, v. 8, n. 2, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.35819/tear.v8.n2.a3609>. Acesso em: 12 dez. 2024.

SILVA, S.J.S. Transporte eletrônico e quiralidade molecular: um estudo de dispositivos orgânicos em sistemas de dois terminais. **Dissertação** (Mestrado em Física), Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, 2010.

SILVA, M. G. L.; SILVA, A. F.; NÚÑEZ, I. B. **Fundamentos do ensino aprendizagem das Ciências Naturais e da Matemática: o novo ensino médio**; Nuñez, I. B., Ramalho, B. L., orgs.; Sulina: Porto Alegre, 2004.

SILVA, O. B.; QUEIROZ, S. L. Produção acadêmica sobre a formação de professores de química no Brasil: focos temáticos das dissertações e teses defendidas no período de 2001 a 2010. **Alexandria**: Revista de Educação em Ciência e Tecnologia, v. 10, n. 1, p. 271-304, 2017. DOI: <https://doi.org/10.5007/1982-5153.2017v10n1p271>. Disponível em: <https://periodicos.ufsc.br/index.php/alexandria/article/view/1982-5153.2017v10n1p271>. Acesso em: 12 dez. 2024.

SCHAPPO, M. G. **Mecânica Quântica: Uma Iniciação para Ciências Exatas e da Natureza**. São Paulo: Livraria da Física, 2018.

SCHNETZLER R.P. Pesquisa em Ensino de Química no Brasil. Conquistas e Perspectivas. 2002. **Química Nova**. v.25; p. 14-24.

YIN, R. K. **Estudo de caso: planejamento e métodos**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

ZINAD, et. al. Adsorption, temperature and corrosion inhibition studies of a coumarin derivatives corrosion inhibitor for mild steel in acidic medium: gravimetric and theoretical investigation. **Int. J. Corros. Scale Inhib.**, 2020, 9, no. 1, 134–151. Disponível em: https://www.researchgate.net/profile/Dhafer-Zinad/publication/340208486_Adsorption_temperature_and_corrosion_inhibition_studies_of_a_coumarin_derivatives_corrosion_inhibitor_for_mild_steel_in_acidic_medium_Gravimetric_and_theoretical_investigations/links/5e7ce303458515efa0ad6890/Adsorption-temperature-and-corrosion-inhibition-studies-of-a-coumarin-derivatives-corrosion-inhibitor-for-mild-steel-in-acidic-medium-Gravimetric-and-theoretical-investigations.pdf. Acesso: 01 mai. 2025.

ANEXOS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA MESTRADO ACADÊMICO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Área de Concentração: Ensino de Química

Pesquisador: Murilo Rodrigues Dos Santos

Orientadora: Profa. Dra. Caroline De Goes Sampaio

Questionário I

1. Gênero:
 - a) Masculino;
 - b) Feminino;
 - c) Outro.

2. Você cursou o Ensino Médio em que rede de ensino?
 - a) Todo em escola particular;
 - b) Todo em escola pública;
 - c) Escola particular e pública, mas, a maior parte em escola da rede pública;
 - d) Escola particular e pública, mas, a maior parte em escola da rede particular.

3. Quanto equivale a sua renda familiar por integrante?
 - a) Menos de um salário-mínimo;
 - b) Um salário-mínimo;
 - c) Um salário-mínimo e meio;
 - d) Mais do que dois salários-mínimos.

4. Você possui alguma deficiência?
 - a) Não;
 - b) Física;
 - c) Mental;
 - d) Intelectual

5. Em sua residência, você dispõe de quais equipamentos para estudar?
 - a) Computador/notebook;
 - b) *Smartphone*;
 - c) livro;
 - d) Nenhuma das alternativas.

6. Você considera a Química Orgânica uma disciplina importante em sua formação acadêmica para futura atuação docente?

7. Você acredita que poderá utilizar os mecanismos de reações orgânicas em algum momento durante sua vida profissional?

8. Você sentiu dificuldades em compreender os mecanismos de reações orgânicas?

Sim ☐

Não ☐

9. Cite abaixo fatores que você julgaria como elementos que dificultam o aprendizado em Química?

10. Na sua percepção, você acredita que conteúdos de mecânica quântica aplicados à Química Orgânica II poderia facilitar ou prejudicar no processo de aprendizagem?

11. Você acredita que é possível realizar a modelagem matemática (processo de formalizar um problema do mundo real em uma expressão matemática) para calcular a espontaneidade de reações orgânicas, validando os mecanismos propostos?

12. Na sua opinião, simulações computacionais poderiam ter facilitado seu processo de aprendizagem do conteúdo referente às reações orgânicas?

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA
MESTRADO ACADÊMICO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Área de Concentração: Ensino de Química

Pesquisador: Murilo Rodrigues Dos Santos

Orientadora: Profa. Dra. Caroline De Goes Sampaio

Questionário II

1. Gênero:
 - a) Masculino;
 - b) Feminino;
 - c) Outro.

2. Você cursou o Ensino Médio em que rede de ensino?
 - a) Todo em escola particular;
 - b) Todo em escola pública;
 - c) Escola particular e pública, mas, a maior parte em escola da rede pública;
 - d) Escola particular e pública, mas, a maior parte em escola da rede particular.

3. Quanto equivale a sua renda familiar por integrante?
 - e) Menos de um salário-mínimo;
 - f) Um salário-mínimo;
 - g) Um salário-mínimo e meio;
 - h) Mais do que dois salários-mínimos.

4. Você possui alguma deficiência?
 - a) Não;
 - b) Física;
 - c) Mental;
 - d) Intelectual

5. Em sua residência, você dispõe de quais equipamentos para estudar?
 - a) Computador/notebook;
 - b) *Smartphone*;
 - c) livro;
 - d) Nenhuma das alternativas.

6. Você possui alguma noção sobre os mecanismos de reações orgânicas estudadas em Química Orgânica II?

7. Na sua opinião, a área da Química Orgânica pode ser considerada apenas como uma subárea da Química vista como empírica?

8. Comente um pouco sobre sua experiência com o Cálculo Diferencial e Integral no curso de Licenciatura em Química, você acredita que a Química Orgânica pode ter seus mecanismos de reação previstos por meio de cálculos matemáticos?

9. Mecanismos de reações orgânicas tratam da movimentação dos elétrons das espécies químicas envolvidas na formação de novos compostos de usos diversos. Comente um pouco sobre os fatores que causam essa possível migração eletrônica de uma espécie química para outra.

10. A mecânica quântica rege o comportamento do mundo atômico. Comente um pouco sobre seus conhecimentos sobre a mecânica quântica. Você acredita que existe uma relação da mecânica quântica e os mecanismos de reações orgânicas?

11. Você sabe da possibilidade de utilizar cálculos quânticos para prever o possível mecanismo de reação orgânica?

12. Comente se você já ouviu falar sobre a Teoria Funcional da Densidade?

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA
MESTRADO ACADÊMICO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Área de Concentração: Ensino de Química

Pesquisador: Murilo Rodrigues Dos Santos

Orientadora: Profa. Dra. Caroline De Goes Sampaio

Questionário III

1. É possível resolver a equação de Schrödinger para sistemas moleculares multi-eletrônicos?
 - a) Verdadeiro
 - b) Falso

2. A entidade básica da Teoria Funcional da Densidade é a densidade eletrônica que descreve a distribuição de carga em um átomo, molécula ou sólido?
 - a) Verdadeiro
 - b) Falso

3. Dentro dos possíveis resultados obtidos por meio dos cálculos computacionais em Química, qual não é obtido como parâmetro termodinâmico?
 - a) Energias totais e eletrônica
 - b) Geometria molecular;
 - c) Previsão dos espectros fotoeletrônicos de ultravioleta;
 - d) Zonas de alta densidade eletrônica;
 - e) Constante de velocidade de reação

4. Qual das opções abaixo não pode ser representado por meio de uma modelagem matemática?
 - a) Espontaneidade de uma reação química;
 - b) Potencial de redução e oxidação
 - c) Mecanismo de reação orgânica;
 - d) Eletronegatividade;
 - e) Potencial de ionização

5. Dentre os fatores abaixo, qual o mais indicado para a elaboração de um mecanismo de reação orgânica?
 - a) Energias totais da molécula;
 - b) Energia Livre de Gibbs;
 - c) Distribuição da carga de Mulliken;
 - d) Cálculo da entalpia de formação do produto orgânico

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA
MESTRADO ACADÊMICO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Área de Concentração: Ensino de Química

Pesquisador: Murilo Rodrigues Dos Santos

Orientadora: Profa. Dra. Caroline De Goes Sampaio

Questionário IV

1. Dentro da aplicação do curso ofertado, como você se encontra
(☐) Muito satisfeito;
(☐) Satisfeito;
(☐) Indiferente;
(☐) Insatisfeito
(☐) Muito insatisfeito.
2. Sobre a utilização da Química Computacional, você acredita que tenha sido uma ferramenta didática proveitosa para o aprendizado em mecanismos de reações orgânicas?
a) Concordo totalmente;
b) Concordo
c) Indiferente;
d) Discordo;
e) Discordo totalmente
3. Com relação ao conteúdo programático sobre mecânica quântica aplicada a Química Orgânica você se sente:
a) (☐) Muito satisfeito;
b) (☐) Satisfeito;
c) (☐) Indiferente;
d) (☐) Insatisfeito
e) (☐) Muito insatisfeito.
4. Sobre a utilização da modelagem matemática para validar mecanismos de reações orgânicas, você considera que o conteúdo do curso lhe deixou:
a) (☐) Muito satisfeito;
b) (☐) Satisfeito;
c) (☐) Indiferente;
d) (☐) Insatisfeito
e) (☐) Muito insatisfeito.
5. Considerando que a Teoria Funcional da Densidade pode ser aplicada em outras áreas de estudo em Química (Astroquímica, Físico-Química, Química Analítica, Química Inorgânica, Bioquímica são alguns exemplos de áreas de aplicação), você concorda que a utilização de métodos computacionais deveria fazer parte da grade do curso de Licenciatura em Química devido a sua aplicabilidade didática?
a) (☐) Muito satisfeito;
b) (☐) Satisfeito;
c) (☐) Indiferente;

- d) () Insatisfeito
- e) () Muito insatisfeito.

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA
MESTRADO ACADÊMICO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Área de Concentração: Ensino de Química

Pesquisador: Murilo Rodrigues Dos Santos

Orientadora: Profa. Dra. Caroline De Goes Sampaio

Questionário V

1. Quais são, em sua opinião, os entraves de aprendizagem mais comuns existente nos discentes quanto ao aprendizado de mecanismos de reações orgânicas?

2. De acordo com Bachelard (1996), o pensamento empírico só se torna claro depois, quando um conjunto de argumentos fica estabelecido. Ou seja, é necessário que haja a construção de uma cadeia de argumentos teóricos para que se possa validá-los por meio da experimentação. Na sua opinião como docente da disciplina, a falta de carga horária prática na disciplina implica algum prejuízo no processo de aprendizagem do educando?

3. Quando possível, a fim de verificar o processo de uma aprendizagem significativa, docentes realizam uma demonstração dos conceitos estudados fora do ambiente da sala de aula. Em sua prática docente, ao fazê-lo, você sente que esta exemplificação torna o aprendizado mais atraente para o educando?

4. A Teoria do Estado de Transição trabalha aspectos de modelagem matemática para a elaboração de diagramas de energia livre em reações do tipo S_N2 . Na sua opinião, a utilização da modelagem matemática para validar o mecanismo proposto pelo discente poderia ser uma ferramenta positiva ou negativa no processo de aprendizagem?

5. A Mecânica Quântica (MQ) é uma ferramenta muito utilizada fora do País para na realização de estudos envolvendo Química Orgânica. Em algumas literaturas, os aspectos quânticos são levados em consideração para aprofundar os estudos sobre as interações eletrônicas que ocorrem entre as espécies químicas de um sistema. Qual sua opinião sobre a utilização de conceitos voltados à MQ como ferramenta de apoio ao estudo de Química Orgânica II, facilitaria ou prejudicaria o processo de aprendizagem dos discentes?

6. A Teoria Funcional da Densidade (TFD) utiliza funcionais para calcular parâmetros termodinâmicos em sistemas atômicos/moleculares o que facilita muito o estudo, por parte dos químicos teóricos e computacionais, sobre aspectos que regem o comportamento da matéria e a movimentação dos elétrons de uma espécie química para outra. Na sua opinião, a utilização dos resultados obtidos por meio da TFD como, por exemplo, mapa de potencial eletrostático, poderiam acarretarem benefícios para o aprendizado em mecanismos de reações orgânicas?

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA
MESTRADO ACADÊMICO EM ENSINO DE CIÊNCIAS E MATEMÁTICA

Área de Concentração: Ensino de Química

Pesquisador: Murilo Rodrigues Dos Santos

Orientadora: Profa. Dra. Caroline De Goes Sampaio

Questionário VI

1. Você acredita que a intervenção didática por parte do pesquisador causou algum efeito positivo quanto a percepção dos alunos sobre os conceitos abordados na disciplina?

- a) Discordo totalmente;
- b) Discordo;
- c) Não estou decidida(o);
- d) Concordo;
- e) Concordo totalmente.

2. Após a intervenção didática você notou a facilidade dos discentes acerca do processo de aprendizagem dos conceitos voltados aos mecanismos de reações orgânicas?

- a) Discordo totalmente;
- b) Discordo;
- c) Não estou decidida(o);
- d) Concordo;
- e) Concordo totalmente.

3. A intervenção didática proposta utilizou elementos de modelagem matemática para validar os mecanismos de reações orgânicas propostas, você acredita que este processo interdisciplinar pode servir como ferramenta facilitadora no processo de ensino e aprendizagem?

- a) Discordo totalmente;
- b) Discordo;
- c) Não estou decidida(o);
- d) Concordo;
- e) Concordo totalmente.

4. Uma das propostas de intervenção utilizada pelo pesquisador durante sua execução se baseia na metodologia adotada por Eric Mazur conhecida por *peer instruction* (instrução por pares) na qual questionamentos de cunho puramente conceitual são abordados afim de complementar o aprendizado do discente sobre determinado assunto. Esta metodologia pode

ser adotada como ferramenta auxiliadora no processo de concepção do mecanismo de uma reação orgânica?

- a) Discordo totalmente;
- b) Discordo;
- c) Não estou decidida(o);
- d) Concordo;
- e) Concordo totalmente.

5. Conceitos voltados à mecânica quântica e sua aplicação em Química Orgânica podem ser abordados em sala de aula afim de proporcionar um aprofundamento maior dos conceitos necessários para o entendimento dos mecanismos de seta curva?

- a) Discordo totalmente;
- b) Discordo;
- c) Não estou decidida(o);
- d) Concordo;
- e) Concordo totalmente.

6. Comente um pouco sobre sua experiência com a turma após o processo de intervenção do pesquisador.

7. Comente um pouco sobre a metodologia adotada por parte do pesquisador ao fazer uso de conceitos voltados à mecânica quântica, modelagem matemática e química computacional via TFD para propor mecanismos de reações orgânicas. Você utilizaria alguma destas metodologias em seu processo de ensino?

8. Indique de que maneira o pesquisador poderia melhorar o processo de intervenção didática de modo a contribuir mais no aprendizado de mecanismos de reações orgânicas dos discentes.

APÊNDICE I

DECLARAÇÃO DE COMPROMISSO DE APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS

Mediante o presente documento, firmamos o compromisso de anexar os resultados da pesquisa intitulada **“QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.”** na Plataforma Brasil, garantindo-se o sigilo à identidade dos participantes, propriedades intelectuais e patentes industriais, conforme determinado pela Norma Operacional nº 001/2013 do Conselho Nacional de Saúde (CNS), alínea c, do dispositivo 3.3.

Ademais, declaramos conhecer e cumprir as orientações e determinações fixadas nas Resoluções nºs 466, de 12 de dezembro de 2012, e 510, de 07 de abril de 2016, e Norma Operacional nº 001/2013, pelo CNS, e disponíveis no Regimento Interno do Comitê de Ética em Pesquisa do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE).

_____, ____ de ____ de ____.

Nome completo e assinatura do (a) pesquisador (a) responsável

Murilo Rodrigues dos Santos

Caroline de Goes Sampaio

APÊNDICE II DECLARAÇÃO DE GARANTIA DE REGRESSO DOS BENEFÍCIOS DA PESQUISA

Mediante o presente documento, garantimos o retorno dos benefícios de adquirir e/ou aprofundar os conhecimentos referentes à Mecânica Quântica, Modelagem Matemática e a utilização de Química Computacional por meio da Teoria Funcional da Densidade como ferramentas a serem utilizadas no processo de aprendizagem aos conteúdos referentes à Mecanismos de Reações Orgânicas presente na disciplina de Química Orgânica II do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará – IFCE, resultantes da realização da pesquisa intitulada **“QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.”** aos participantes, consoante alínea d, do dispositivo 3.3, da Norma Operacional nº 001/2013 do Conselho Nacional de Saúde (CNS).

Ademais, declaramos conhecer e cumprir as orientações e determinações fixadas nas Resoluções nºs 466, de 12 de dezembro de 2012, e 510, de 07 de abril de 2016, e Norma Operacional nº 001/2013, pelo CNS, e disponíveis no Regimento

Interno do Comitê de Ética em Pesquisa do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE).

_____, ____ de _____ de _____.

Nome completo e assinatura do (a) pesquisador (a) responsável

Murilo Rodrigues Dos Santos

Caroline de Goes Sampaio

APÊNDICE III

ORÇAMENTO

Segue o orçamento previsto para a execução do projeto intitulado **“QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.”** a ser realizado pelos pesquisadores Murilo Rodrigues dos Santos e Caroline de Goes Sampaio.

Neste âmbito, ressaltamos que os valores relacionados ao ressarcimento dos participantes da pesquisa, assim como os referentes à indenização aos danos decorrentes da realização desse trabalho, serão cobertos (ou pagos) pelos (as) pesquisadores (as) Murilo Rodrigues dos Santos e Caroline de Goes Sampaio.

Descrição da Despesa	Tipo (Capital ou custeio)	Valor
Transporte	Custeio	R\$ 200,00
Material de Escritório (Internet, folhas A4 e outros)	Custeio	R\$ 150,00
Livros	Custeio	R\$ 300,00
Alimentação	Custeio	R\$ 100,00
	Total	R\$ 750,00

_____, ____ de ____ de ____

Nome completo e assinatura do (a) pesquisador (a) responsável

Murilo Rodrigues dos Santos

Caroline de Goes Sampaio

APÊNDICE IV

PREVISÃO DO CRONOGRAMA DE EXECUÇÃO

Segue a previsão do cronograma de execução do projeto intitulado “**QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ**” a ser realizado pelos pesquisadores Murilo Rodrigues dos Santos e Caroline de Goes Sampaio.

Neste âmbito, ressaltamos que a citada pesquisa será iniciada somente após a sua aprovação pelo Sistema CEP-CONEP, conforme disposto nas Resoluções nºs 466, de 12 de dezembro de 2012, (no item 10 da seção X3, no capítulo X) e 510, de 07 de abril de 2016, (no art. 28, inciso I, do capítulo VI) e Norma Operacional nº 001/2013 (especificamente, na alínea “f” da seção 3.3, no capítulo 3), apresentadas pelo Conselho Nacional de Saúde (CNS), e no Regimento Interno do Comitê de Ética em Pesquisa do IFCE, em seu art. 35.

Nº	ATIVIDADE	PERÍODO (Mês/Ano)
1º	Aprofundamento na pesquisa bibliográfica para revisão teórica	02/01/2024 - 31/01/2024
2º	Discussão do projeto de Dissertação e organização metodológica para a pesquisa com a professora orientadora	02/02/2024 - 13/02/2024
3º	Apresentação da proposta de pesquisa para gestão e entrega dos Termos De Consentimento Livre E Esclarecido (TCLE) aos estudantes que concluíram com êxito a disciplina de Química	02/02/2024 - 16/02/2024

	Orgânica II no semestre 2023.2 e aplicação do questionário I	
4º	Apresentação da pesquisa aos discentes regularmente matriculados na disciplina de Química Orgânica II e entrega do Termo de Consentimento Livre e Esclarecido	19/02/2024 - 23/02/2024
5º	Aplicação do questionário II e questionário IV	04/03/2024 - 08/03/2024
6º	Curso de Formação (parte 1)	11/03/2024 - 15/03/2024
7º	Curso de Formação (parte 2)	18/03/2024 - 22/03/2024
8º	Teste de mensuração de aprendizagem acerca do curso de formação ministrado e aplicação do questionário IV	25/03/2024 - 26/04/2024
9º	Aplicação do questionário III com os discentes e questionário VI com a(o) docente da disciplina	01/05/2024 - 10/05/2024
10º	Tabulação, análise e discussão dos resultados do questionário Pré curso	13/05/2024 - 17/05/2024
11º	Tabulação, análise e discussão dos resultados da Entrevista pós curso	01/06/2024 - 28/06/2024
12º	Elaboração da Dissertação	01/07/2024 - 27/09/2024
13º	Encontros com a Orientadora para análise final e organização do texto	30/09/2024 - 18/10/2024
14º	Revisão semântica, sintática e morfológica do texto escrito	21/10/2024 - 29/11/2024
15º	Defesa da Dissertação	02/12/2024 - 04/12/2024

_____, ____ de _____ de _____.

Nome completo e assinatura do (a) pesquisador (a) responsável

Murilo Rodrigues dos Santos

Caroline de Goes Sampaio

APÊNDICE V

TERMO DE AUTORIZAÇÃO E EXISTÊNCIA DE INFRAESTRUTURA

Eu, Luís José Silveira de Sousa, coordenador do Departamento de Extensão, Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação (DEPPI) do Instituto Federal do Ceará (IFCE) – *campus* Maracanaú, autorizo a realização do projeto intitulado “A UTILIZAÇÃO DE QUÍMICA QUÂNTICA E A MODELAGEM MATEMÁTICA PARA A COMPREENSÃO DE CONCEITOS RELACIONADOS AOS MECANISMOS DE REAÇÃO EM QUÍMICA ORGÂNICA COM O USO DE DADOS TERMODINÂMICOS QUÂNTICOS VIA TFD NO CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DO IFCE: UM ESTUDO DE CASO” pelos pesquisadores Murilo Rodrigues dos Santos e Caroline de Goes Sampaio, que envolverá o processo investigativo de uma pesquisa-ação com alunos da disciplina de Química Orgânica II no curso superior de Licenciatura em Química, mediante a aplicação de seis (06) questionários, a elaboração de um curso que terá como temática principal a aplicação da Mecânica Quântica (MQ) em Química Orgânica e a realização de uma aula dialogada para a coleta de dados que será iniciado após a aprovação pelo Sistema CEP-CONEP.

O Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – *campus* Maracanaú está ciente de seu compromisso no resguardo da segurança e bem-estar dos participantes da pesquisa, dispondo de infraestrutura necessária para desenvolvê-la em conformidade às diretrizes e normas éticas. Ademais, ratifico que não haverá quaisquer implicações negativas aos alunos e professores que não desejarem ou desistirem de participar do projeto.

Declaro, outrossim, na condição de representante desta organização, conhecer e cumprir as orientações e determinações fixadas nas Resoluções nºs 466, de 12 de dezembro de 2012, e Norma Operacional nº 001/2013, pelo Conselho Nacional de Saúde (CNS), e disponíveis no Regimento Interno do Comitê de Ética em Pesquisa do IFCE.

Maracanaú, 25 de outubro de 2023.

Assinatura e carimbo da(o) responsável pelo Departamento de Extensão, Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação (DEPPI) do IFCE – *campus* Maracanaú.

APÊNDICE VI

TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO DA(O) DISCENTE PARA A PARTICIPAÇÃO NA PESQUISA

QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.

MURILO RODRIGUES DOS SANTOS E CAROLINE DE GOES SAMPAIO

Você está sendo convidado a participar como voluntário de uma pesquisa. Este documento, chamado Termo de Consentimento Livre e Esclarecido, visa assegurar seus direitos como participante e é elaborado em duas vias, uma que deverá ficar com você e outra com o pesquisador.

Por favor, leia com atenção e calma, aproveitando para esclarecer suas dúvidas. Se houver perguntas antes ou mesmo depois de assiná-lo, você poderá esclarecê-las com o pesquisador. Se preferir, pode levar este Termo para casa e consultar seus familiares ou outras pessoas antes de decidir participar. Não haverá nenhum tipo de penalização ou prejuízo se você não aceitar participar ou retirar sua autorização em qualquer momento.

Justificativa e objetivos:

Este estudo tem por objetivo analisar a intervenção didática sobre a aplicação de concepções da Mecânica Quântica (MQ) voltadas à Química Orgânica fazendo o uso da Modelagem Matemática e da Teoria do Funcional da Densidade (TFD) para propor mecanismos de reações orgânicas discutidas na disciplina de Química Orgânica II presente na modalidade de ensino superior do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – *campus* Maracanaú. A pesquisa irá analisar os entraves epistemológicos dos estudantes quanto ao processo de aprendizagem dos mecanismos de reações orgânicas abordados na referida disciplina. Com esta premissa, serão abordados discentes que concluíram o curso de Química Orgânica II, no semestre 2023.2, com êxito para que possam explanar as dificuldades e entraves encontrados por eles no decorrer da disciplina de modo a sondar quais as principais problemáticas a serem enfrentadas na pesquisa. Com isso, esta pesquisa tem por objetivo, também, realizar um curso voltado à MQ, modelagem matemática, e introdução ao método computacional que utiliza a TFD como ferramentas extras para o entendimento e aprofundamento dos conhecimentos abordados na disciplina.

Procedimentos:

Participando do estudo você está sendo convidado a aprender assuntos da disciplina de Química Orgânica II, mais precisamente sobre os seguintes assuntos: Mecânica Quântica, Modelagem Matemática, Química Computacional com o uso da Teoria Funcional da Densidade, através de uma intervenção didática (por meio de um curso de formação inicial) e a responder um (01) questionário que, após ser entregue

contará com o período total de 01 hora (caso o participante necessite de mais tempo, duas horas serão acrescidas):

Questionário I: Questionário discente sobre as percepções da disciplina de Química Orgânica II e suas dificuldades pessoais quanto aos obstáculos epistemológicos da disciplina.

Para a realização desta pesquisa, será necessário o cumprimento de duas etapas: 1ª. A identificação pelo pesquisador responsável dos discentes que concluíram com êxito a disciplina para que possa ser pegue a assinatura do TCLE pelos discentes; 2ª Questionário I discente sobre os obstáculos epistemológicos dos alunos na referida disciplina e suas concepções finais.

Desse modo, todas as informações coletadas nos questionários serão digitalizadas e armazenadas em um dispositivo eletrônico local dos pesquisadores, podendo, assim, ser consultado a qualquer instante pelo Comitê de Ética do IFCE, caso seja necessário.

Desconfortos e riscos:

Você não deve participar deste estudo se não estiver totalmente confortável e ciente da atividade proposta pelo pesquisador a ser desenvolvida, por quaisquer motivos como: motivadores da investigação ou qualquer influência eu possa existir e implicar em sua personalidade emocional/religiosa, étnico/racial ou qualquer outro parâmetro que lhe seja relevante. Os pesquisadores explicitam que os únicos riscos possíveis envolvem a possibilidade de constrangimento do docente ao responder o instrumento de coleta de dados; receio em responder o questionário por falta de conhecimento ou de ser identificado na instituição; estresse; quebra de sigilo; cansaço ou vergonha ao responder os levantamentos.

Benefícios:

Os benefícios advindos deste estudo serão uma visão mais sólida sobre o processo de aprendizagem em Química, especialmente no que tange aos aspectos ligados aos mecanismos de reações orgânicas e das reflexões que os conteúdos sobre Mecânica Quântica, Modelagem Matemática, Computação Química por meio da Teoria Funcional da Densidade podem fornecer aos discentes no ambiente de sala de aula.

Acompanhamento e assistência:

O acompanhamento desta pesquisa será contemplado pelos cientistas responsáveis em todos os momentos de sua aplicação (presenciais ou não), bem como a coleta dos dados. A assistência será garantida por meio dos canais de comunicação adotados pelos pesquisadores e informados neste documento. Em caso de algum desconforto, o docente participante poderá informar de imediato aos cientistas que de maneira pronta irão solucionar o problema solicitando o suporte técnico das equipes de enfermagem, psicologia ou do Núcleo de Atendimento às Pessoas com Necessidades Educacionais Específicas (NAPNE) do próprio *campus* investigado. Mediante a isso, qualquer problema levantado pela(o) docente será solucionado mediante a comum acordo entre o participante, pesquisadores e os responsáveis pela instituição

Sigilo e privacidade:

Você tem a garantia de que sua identidade será mantida em sigilo e nenhuma informação será dada a outras pessoas que não façam parte da equipe de

pesquisadores. Na divulgação dos resultados desse estudo, seu nome não será citado.

Ressarcimento e Indenização:

Você terá direito ao ressarcimento das despesas diretamente decorrentes de sua participação na pesquisa e à indenização pelos danos resultantes desta, nos termos da Lei.

Contato:

Em caso de dúvidas sobre a pesquisa, você poderá entrar em contato com os pesquisadores: Murilo Rodrigues dos Santos, Diretoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação, Av. Treze de Maio, 2081 – Benfica, Fortaleza – CE, (85) 991172209, murilo.rodrigues.santos61@aluno.ifce.edu.br ou Caroline de Goes Sampaio, Diretoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação, Av. Treze de Maio, 2081 – Benfica, Fortaleza – CE (85) 3307-4020, carolinesampaio@ifce.edu.br.

Em caso de denúncias ou reclamações sobre sua participação e sobre questões éticas do estudo, você poderá entrar em contato com a secretaria do Comitê de Ética em Pesquisa (CEP) do IFCE das 08:00hs às 12:00hs e das 13:00hs as 17:00hs no IFCE Reitoria - R. Jorge Dumar, 1703 - Jardim América, Fortaleza - CE, 60410-426; fone (85) 34012332 e-mail: cep@ifce.edu.br

Consentimento livre e esclarecido:

Após ter recebido esclarecimentos sobre a natureza da pesquisa, seus objetivos, métodos, benefícios previstos, potenciais riscos e o incômodo que esta possa acarretar, aceito participar e declaro estar recebendo uma via original deste documento assinada pelo pesquisador e por mim, tendo todas as folhas por nós rubricadas:

Nome _____ do(a) _____ participante:

Contato _____ telefônico _____ (opcional):

e-mail _____ (opcional):

(Assinatura do participante ou nome e assinatura do seu RESPONSÁVEL LEGAL)

Data: ____/____/____.

Responsabilidade do Pesquisador:

Asseguro ter cumprido as exigências da resolução 466/2012 CNS/MS e complementares na elaboração do protocolo e na obtenção deste Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. Asseguro, também, ter explicado e fornecido uma via deste documento ao participante. Informo que o estudo foi aprovado pelo

CEP perante o qual o projeto foi apresentado. Comprometo-me a utilizar o material e os dados obtidos nesta pesquisa exclusivamente para as finalidades previstas neste documento ou conforme o consentimento dado pelo participante.

Nome do(a) pesquisador(a): Murilo Rodrigues dos Santos

Assinatura do(a) pesquisador(a) responsável

Data: ____/____/____.

APÊNDICE VII

TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO DA(O) DISCENTE PARA A PARTICIPAÇÃO NA PESQUISA

QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.

MURILO RODRIGUES DOS SANTOS E CAROLINE DE GOES SAMPAIO

Você está sendo convidado a participar como voluntário de uma pesquisa. Este documento, chamado Termo de Consentimento Livre e Esclarecido, visa assegurar seus direitos como participante e é elaborado em duas vias, uma que deverá ficar com você e outra com o pesquisador.

Por favor, leia com atenção e calma, aproveitando para esclarecer suas dúvidas. Se houver perguntas antes ou mesmo depois de assiná-lo, você poderá esclarecê-las com o pesquisador. Se preferir, pode levar este Termo para casa e consultar seus familiares ou outras pessoas antes de decidir participar. Não haverá nenhum tipo de penalização ou prejuízo se você não aceitar participar ou retirar sua autorização em qualquer momento.

Justificativa e objetivos:

Este estudo tem por objetivo analisar a intervenção didática sobre a aplicação de concepções da Mecânica Quântica (MQ) voltadas à Química Orgânica fazendo o uso da Modelagem Matemática e da Teoria do Funcional da Densidade (TFD) para propor mecanismos de reações orgânicas discutidas na disciplina de Química Orgânica II presente na modalidade de ensino superior do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – *campus* Maracanaú. A pesquisa irá analisar os entraves epistemológicos dos estudantes quanto ao processo de aprendizagem dos mecanismos de reações orgânicas abordados na referida disciplina. Com esta premissa, serão abordados discentes que concluíram o curso de Química Orgânica II, no semestre 2023.2, com êxito para que possam explanar as dificuldades e entraves encontrados por eles no decorrer da disciplina de modo a sondar quais as principais problemáticas a serem enfrentadas na pesquisa. Com isso, esta pesquisa tem por objetivo, também, realizar um curso voltado à MQ, modelagem matemática, e introdução ao método computacional que utiliza a TFD como ferramentas extras para o entendimento e aprofundamento dos conhecimentos abordados na disciplina.

Procedimentos:

Participando do estudo você está sendo convidado a aprender assuntos da disciplina de Química Orgânica II, mais precisamente sobre os seguintes assuntos: Mecânica Quântica, Modelagem Matemática, Química Computacional com o uso da Teoria Funcional da Densidade, através de uma intervenção didática (por meio de um curso de formação inicial) e a responder três (03) questionários que, após serem

entregue contarão com o período total de 01 hora (caso o participante necessite de mais tempo, duas horas serão acrescidas):

Questionário II: Questionário discente sobre as percepções iniciais da disciplina de Química Orgânica II bem como as dificuldades encontradas na hora de estudar conteúdos voltados a esta disciplina, o questionário também visa aspectos de caracterização social do discente;

Questionário III: Questionário discente empregado utilizando a metodologia *Peer Instruction*, sendo aplicado em dois momentos (um pré e um após a intervenção do pesquisador) sobre conceitos aplicados à Química Orgânica dentro por meio da Mecânica Quântica (MQ), Modelagem Matemática e Química computacional por meio da Teoria Funcional da Densidade;

Questionário IV: Questionário discente destinado a avaliação dos alunos sobre a metodologia adotada pelo pesquisador quanto à utilização de conceitos aplicados a elaboração de mecanismos de reações orgânicas.

Para a realização desta pesquisa, será necessário o cumprimento de quatro etapas: 1ª. Ambientação do pesquisador responsável e assinatura do TCLE pelo docente; 2ª Questionário docente sobre os obstáculos epistemológicos diagnosticados pelo docente durante sua atividade docente 3ª. Aula; 4ª. Questionário docente sobre a aprendizagem dos discentes durante a atividade proposta pelo pesquisador.

Desse modo, todas as informações coletadas nos questionários serão digitalizadas e armazenadas em um dispositivo eletrônico local dos pesquisadores, podendo, assim, ser consultado a qualquer instante pelo Comitê de Ética do IFCE, caso seja necessário.

Desconfortos e riscos:

Você não deve participar deste estudo se não estiver totalmente confortável e ciente da atividade proposta pelo pesquisador a ser desenvolvida, por quaisquer motivos como: motivadores da investigação ou qualquer influência eu possa existir e implicar em sua personalidade emocional/religiosa, étnico/racial ou qualquer outro parâmetro que lhe seja relevante. Os pesquisadores explicitam que os únicos riscos possíveis envolvem a possibilidade de constrangimento do docente ao responder o instrumento de coleta de dados; receio em responder o questionário por falta de conhecimento ou de ser identificado na instituição; estresse; quebra de sigilo; cansaço ou vergonha ao responder os levantamentos.

Benefícios:

Os benefícios advindos deste estudo serão uma visão mais sólida sobre o processo de aprendizagem em Química, especialmente no que tange aos aspectos ligados aos mecanismos de reações orgânicas e das reflexões que os conteúdos sobre Mecânica Quântica, Modelagem Matemática, Computação Química por meio da Teoria Funcional da Densidade podem fornecer aos discentes no ambiente de sala de aula.

Acompanhamento e assistência:

O acompanhamento desta pesquisa será contemplado pelos cientistas responsáveis em todos os momentos de sua aplicação (presenciais ou não), bem como a coleta dos dados. A assistência será garantida por meio dos canais de comunicação adotados pelos pesquisadores e informados neste documento. Em caso de algum desconforto, o docente participante poderá informar de imediato aos cientistas que de maneira

pronta irão solucionar o problema solicitando o suporte técnico das equipes de enfermagem, psicologia ou do Núcleo de Atendimento às Pessoas com Necessidades Educacionais Específicas (NAPNE) do próprio *campus* investigado. Mediante a isso, qualquer problema levantado pela(o) docente será solucionado mediante a comum acordo entre o participante, pesquisadores e os responsáveis pela instituição

Sigilo e privacidade:

Você tem a garantia de que sua identidade será mantida em sigilo e nenhuma informação será dada a outras pessoas que não façam parte da equipe de pesquisadores. Na divulgação dos resultados desse estudo, seu nome não será citado.

Ressarcimento e Indenização:

Você terá direito ao ressarcimento das despesas diretamente decorrentes de sua participação na pesquisa e à indenização pelos danos resultantes desta, nos termos da Lei.

Contato:

Em caso de dúvidas sobre a pesquisa, você poderá entrar em contato com os pesquisadores: Murilo Rodrigues dos Santos, Diretoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação, Av. Treze de Maio, 2081 – Benfica, Fortaleza – CE, (85) 991172209, murilo.rodrigues.santos61@aluno.ifce.edu.br ou Caroline de Goes Sampaio, Diretoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação, Av. Treze de Maio, 2081 – Benfica, Fortaleza – CE (85) 3307-4020, carolinesampaio@ifce.edu.br.

Em caso de denúncias ou reclamações sobre sua participação e sobre questões éticas do estudo, você poderá entrar em contato com a secretaria do Comitê de Ética em Pesquisa (CEP) do IFCE das 08:00hs às 12:00hs e das 13:00hs as 17:00hs no IFCE Reitoria - R. Jorge Dumar, 1703 - Jardim América, Fortaleza - CE, 60410-426; fone (85) 34012332 e-mail: cep@ifce.edu.br

Consentimento livre e esclarecido:

Após ter recebido esclarecimentos sobre a natureza da pesquisa, seus objetivos, métodos, benefícios previstos, potenciais riscos e o incômodo que esta possa acarretar, aceito participar e declaro estar recebendo uma via original deste documento assinada pelo pesquisador e por mim, tendo todas as folhas por nós rubricadas:

Nome	do(a)	participante:
Contato	telefônico	(opcional):
e-mail		(opcional):

(Assinatura do participante ou nome e assinatura do seu RESPONSÁVEL LEGAL)

Data: ____/____/____.

Responsabilidade do Pesquisador:

Asseguro ter cumprido as exigências da resolução 466/2012 CNS/MS e complementares na elaboração do protocolo e na obtenção deste Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. Asseguro, também, ter explicado e fornecido uma viadeste documento ao participante. Informo que o estudo foi aprovado pelo CEP perante o qual o projeto foi apresentado. Comprometo-me a utilizar o material e os dados obtidos nesta pesquisa exclusivamente para as finalidades previstas neste documento ou conforme o consentimento dado pelo participante.

Nome do(a) pesquisador(a): Murilo Rodrigues dos Santos

Assinatura do(a) pesquisador(a) responsável

Data: ____/____/____.

APÊNDICE VIII

TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO DA(O) DOCENTE REGENTE PARA A PARTICIPAÇÃO NA PESQUISA

QUÍMICA QUÂNTICA APLICADA AOS MECANISMOS DE REAÇÕES ORGÂNICAS: UMA FORMAÇÃO INICIAL DE PROFESSORES DE QUÍMICA DO IFCE – CAMPUS MARACANAÚ.

MURILO RODRIGUES DOS SANTOS E CAROLINE DE GOES SAMPAIO

Você está sendo convidado a participar como voluntário de uma pesquisa do Programa de Pós-graduação em Ensino de Ciências e Matemática (PGECEM) do Instituto Federal do Ceará – *campus* Fortaleza. Este documento, chamado Termo de Consentimento Livre e Esclarecido, visa assegurar seus direitos como participante e é elaborado em duas vias, uma que deverá ficar com você e outra com o pesquisador.

Por favor, leia com atenção e calma, aproveitando para esclarecer suas dúvidas. Se houver perguntas antes ou mesmo depois de assiná-lo, você poderá esclarecê-las com o pesquisador. Se preferir, pode levar este Termo para casa e consultar seus familiares ou outras pessoas antes de decidir participar. Não haverá nenhum tipo de penalização ou prejuízo se você não aceitar participar ou retirar sua autorização em qualquer momento.

Justificativa e objetivos:

Este estudo tem por objetivo analisar a intervenção didática sobre a aplicação de concepções da Mecânica Quântica (MQ) voltadas à Química Orgânica fazendo o uso da Modelagem Matemática e da Teoria do Funcional da Densidade (TFD) para propor mecanismos de reações orgânicas discutidas na disciplina de Química Orgânica II presente na modalidade de ensino superior do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – *campus* Maracanaú. A pesquisa irá analisar os entraves epistemológicos dos estudantes quanto ao processo de aprendizagem dos mecanismos de reações orgânicas abordados na referida disciplina. Com esta premissa, serão abordados discentes que concluíram o curso de Química Orgânica II, no semestre 2023.2, com êxito para que possam explicar as dificuldades e entraves encontrados por eles no decorrer da disciplina de modo a sondar quais as principais problemáticas a serem enfrentadas na pesquisa. Com isso, esta pesquisa tem por objetivo, também, realizar um curso voltado à MQ, modelagem matemática, e introdução ao método computacional que utiliza a TFD como ferramentas extras para o entendimento e aprofundamento dos conhecimentos abordados na disciplina.

Procedimentos:

Participando do estudo você está sendo convidado a: contribuir com os estudos sobre o processo de aprendizagem dos discentes no Ensino Superior na área de Química, de modo particular em uma proposta de ensino que envolve aspectos interdisciplinar entre Mecânica Quântica, Modelagem Matemática, Química Computacional com o uso da Teoria Funcional da Densidade e a responder dois (02)

questionários que, após serem entregues contarão com o período total de 03 horas (caso o participante necessite de mais tempo, duas horas serão acrescidas):

Questionário V: Questionário docente sobre as dificuldades enfrentadas pelos alunos antes a intervenção da pesquisa;

Questionário VI: Questionário docente sobre a utilização da intervenção do pesquisador e o processo de aprendizagem dos estudantes mediante a atividade.

Para a realização desta pesquisa, será necessário o cumprimento de quatro etapas: 1ª. Ambientação do pesquisador responsável e assinatura do TCLE pelo docente; 2ª. Questionário docente sobre os obstáculos epistemológicos diagnosticados pelo docente durante sua atividade docente 3ª. Aula; 4ª. Questionário docente sobre a aprendizagem dos discentes durante a atividade proposta pelo pesquisador.

Desse modo, todas as informações coletadas nos questionários serão digitalizadas e armazenadas em um dispositivo eletrônico local dos pesquisadores, podendo, assim, ser consultado a qualquer instante pelo Comitê de Ética do IFCE, caso seja necessário.

Desconfortos e riscos:

Você não deve participar deste estudo se não estiver totalmente confortável e ciente da atividade proposta pelo pesquisador a ser desenvolvida, por quaisquer motivos como: motivadores da investigação ou qualquer influência eu possa existir e implicar em sua personalidade emocional/religiosa, étnico/racial ou qualquer outro parâmetro que lhe seja relevante. Os pesquisadores explicitam que os únicos riscos possíveis envolvem a possibilidade de constrangimento do docente ao responder o instrumento de coleta de dados; receio em responder o questionário por falta de conhecimento ou de ser identificado na instituição; estresse; quebra de sigilo; cansaço ou vergonha ao responder os levantamentos.

Benefícios:

Os benefícios advindos deste estudo serão uma visão mais sólida sobre o processo de aprendizagem em Química, especialmente no que tange aos aspectos ligados aos mecanismos de reações orgânicas e das reflexões que os conteúdos sobre Mecânica Quântica, Modelagem Matemática, Computação Química por meio da Teoria Funcional da Densidade podem fornecer aos discentes no ambiente de sala de aula.

Acompanhamento e assistência:

O acompanhamento desta pesquisa será contemplado pelos cientistas responsáveis em todos os momentos de sua aplicação (presenciais ou não), bem como a coleta dos dados. A assistência será garantida por meio dos canais de comunicação adotados pelos pesquisadores e informados neste documento. Em caso de algum desconforto, o docente participante poderá informar de imediato aos cientistas que de maneira pronta irão solucionar o problema solicitando o suporte técnico das equipes de enfermagem, psicologia ou do Núcleo de Atendimento às Pessoas com Necessidades Educacionais Específicas (NAPNE) do próprio *campus* investigado. Mediante a isso, qualquer problema levantado pela(o) docente será solucionado mediante a comum acordo entre o participante, pesquisadores e os responsáveis pela instituição

Sigilo e privacidade:

Você tem a garantia de que sua identidade será mantida em sigilo e nenhuma informação será dada a outras pessoas que não façam parte da equipe de pesquisadores. Na divulgação dos resultados desse estudo, seu nome não será citado.

Ressarcimento e Indenização:

Você terá direito ao ressarcimento das despesas diretamente decorrentes de sua participação na pesquisa e à indenização pelos danos resultantes desta, nos termos da Lei.

Contato:

Em caso de dúvidas sobre a pesquisa, você poderá entrar em contato com os pesquisadores: Murilo Rodrigues dos Santos, Diretoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação, Av. Treze de Maio, 2081 – Benfica, Fortaleza – CE, (85) 991172209, murilo.rodrigues.santos61@aluno.ifce.edu.br ou Caroline de Goes Sampaio, Diretoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação, Av. Treze de Maio, 2081 – Benfica, Fortaleza – CE (85) 3307-4020, carolinesampaio@ifce.edu.br.

Em caso de denúncias ou reclamações sobre sua participação e sobre questões éticas do estudo, você poderá entrar em contato com a secretaria do Comitê de Ética em Pesquisa (CEP) do IFCE das 08:00hs às 12:00hs e das 13:00hs às 17:00hs no IFCE Reitoria - R. Jorge Dumar, 1703 - Jardim América, Fortaleza - CE, 60410-426; fone (85) 34012332 e-mail: cep@ifce.edu.br

Consentimento livre e esclarecido:

Após ter recebido esclarecimentos sobre a natureza da pesquisa, seus objetivos, métodos, benefícios previstos, potenciais riscos e o incômodo que esta possa acarretar, aceito participar e declaro estar recebendo uma via original deste documento assinada pelo pesquisador e por mim, tendo todas as folhas por nós rubricadas:

Nome _____ do(a) _____ participante:

Contato _____ telefônico _____ (opcional):

e-mail _____ (opcional):

(Assinatura do participante ou nome e assinatura do seu RESPONSÁVEL LEGAL)

Data: ____/____/____.

Responsabilidade do Pesquisador:

Asseguro ter cumprido as exigências da resolução 466/2012 CNS/MS e complementares na elaboração do protocolo e na obtenção deste Termo de Consentimento Livre e Esclarecido. Asseguro, também, ter explicado e fornecido

uma via deste documento ao participante. Informo que o estudo foi aprovado pelo CEP perante o qual o projeto foi apresentado. Comprometo-me a utilizar o material e os dados obtidos nesta pesquisa exclusivamente para as finalidades previstas neste documento ou conforme o consentimento dado pelo participante.